

BAB I

PENDAHULUAN

I.1. Latar Belakang

Formaldehid merupakan senyawa volatil organik paling melimpah ditemukan di dalam ruangan yang dapat meningkatkan risiko kanker leukemia (Vera dkk., 2024; Wang dan Xiao, 2022). Sumber utamanya berasal dari perabot rumah tangga berbahan kayu, cat dinding, serta *wallpaper* (van den Broek dkk., 2020). Studi menunjukkan bahwa konsentrasi formaldehid di dalam tempat tinggal di 300 wilayah Indonesia tercatat sebesar 0,172 ppm (Sani dkk., 2023). Adapun studi lainnya di beberapa kota besar China tercatat sebesar 153 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ pada bangunan perumahan, 163 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ pada bangunan sekolah, dan 94 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ pada gedung perkantoran (Fang dkk., 2022). Menurut standar kesehatan dunia WHO (*World Health Organization*), paparan formaldehid maksimal yang dapat ditoleransi adalah 0,08 ppm. Hal ini menunjukkan konsentrasi formaldehid telah melampaui batas.

Salah satu solusi yang dapat diupayakan adalah penggunaan adsorben yang dapat menyerap formaldehid. Beberapa peneliti pada tahun 2021 telah berhasil mensintesis heterostruktur grafena boron nitrida (G/h-BN) yang terbukti efektif dalam mengadsorpsi formaldehid (Androulidakis dkk., 2021). Menariknya ketika dibandingkan dengan grafena, jumlah formaldehid yang teradsorpsi pada sistem G/h-BN meningkat hampir 10 kali lipat lebih banyak. Hasil ini membuktikan material berbasis grafena termodifikasi sangat menjanjikan sebagai adsorben formaldehid yang dapat diaplikasikan untuk *filter* pada masker (Chaudhary dkk., 2022). Sayangnya, penelitian dan informasi mekanisme adsorpsi formaldehid dengan G/h-BN di level atomik masih sangat terbatas.

Oleh karena itu, penelitian ini difokuskan untuk menganalisis mekanisme adsorpsi gas formaldehid pada sistem zat padat G/h-BN melalui pendekatan *in silico* berbasis mekanika kuantum dengan teori fungsi kerapatan (DFT). Beberapa peneliti sebelumnya telah membuktikan penggunaan metode komputasi berbasis DFT untuk sistem zat padat saat ini dapat memberikan hasil perhitungan dengan tingkat akurasi >95% terhadap hasil eksperimen (Brémond dkk., 2026; Liu dkk., 2024; Siahaan dkk., 2026; Vázquez-Parga dkk., 2023). Dalam upaya mendapatkan hasil yang relevan seperti penelitian sebelumnya, optimasi parameter zat padat seperti energi *cutoff*, ukuran grid titik k, fungsi pertukaran korelasi, dan fungsi dispersi perlu dilakukan terlebih dahulu karena penelitian sebelumnya tidak menggunakan material G/h-BN (Tuan Hung dkk., 2022).

Struktur G/h-BN yang dimodelkan pada penelitian ini adalah model tumpukan AB dimana atom karbon dari lapisan grafena berada tepat di atas atom boron dari lapisan h-BN. Pemilihan model ini didasari oleh nilai energi interaksi antarlapisan yang lebih tinggi dibanding model lainnya yang merujuk pada kestabilan struktur yang lebih baik (Liu dkk., 2022). Karena potensi G/h-BN yang efektif dalam menjerap formaldehid, penambahan variasi ligan asetaldehid dan aseton dilakukan dalam penelitian ini disebabkan kedua senyawa tersebut juga memiliki kemiripan struktur serta dapat meningkatkan risiko kanker layaknya formaldehid (Zhang dkk., 2023). Penelitian ini diharapkan dapat melengkapi informasi seperti energi interaksi, jarak interaksi, serta sifat elektronik seperti DOS yang belum terungkap dari hasil eksperimen *in vitro* sebelumnya, sehingga dapat membantu eksplorasi potensi G/h-BN untuk diaplikasikan sebagai adsorben di masa depan.

I.2. Rumusan Masalah

1. Bagaimana menentukan parameter yang optimal untuk sistem adsorpsi reseptor grafena dan G/h-BN terhadap ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton?
2. Bagaimana menentukan pengaruh penambahan h-BN pada grafena terhadap efektivitas adsorpsi ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton?
3. Bagaimana menentukan orientasi adsorpsi yang disukai pada ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton terhadap reseptor grafena dan G/h-BN?

I.3. Tujuan Penelitian

1. Menentukan parameter optimal untuk sistem adsorpsi reseptor grafena dan G/h-BN terhadap ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton.
2. Menentukan pengaruh penambahan h-BN pada grafena terhadap efektivitas adsorpsi ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton.
3. Menentukan orientasi adsorpsi yang disukai pada ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton terhadap reseptor grafena dan G/h-BN.