

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR SIMBOL	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	viii
GLOSARIUM.....	xi
RINGKASAN.....	xii
<i>SUMMARY</i>	xiii
BAB I.....	xiii
PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
BAB II.....	7
TINJAUAN PUSTAKA	7
II.1 Sensor Gas.....	7
II.2 Gas H ₂ S (Hidrogen Sulfida)	10
II.3 Gas SO ₂ (Sulfur Oksida).....	11
II.4 Grafena/h-BN antarlapisan	12
II.5 Cacat pada Struktur Kristal.....	14
II.6 Adsorpsi.....	15
II.7 <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	16
II.8 Pemodelan Struktur Periodik Material Padat	21
II.9 QUANTUM ESPRESSO Package	24
II.10 Analisis Hasil.....	26
II.10.1 Energi Interaksi.....	26
II.10.2 Sifat Elektronik.....	26
II.10.3 Waktu Pemulihan.....	27
II.10.4 <i>Work function</i>	28
BAB III	29
METODOLOGI PENELITIAN.....	29
III.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	29
III.2 Alat dan Bahan	29

III.2.1	Alat	29
III.2.2	Bahan	29
III.3	Variabel Penelitian	30
III.3.1	Variabel Tetap.....	30
III.3.2	Variabel Bebas.....	30
III.3.3	Variabel Terukur.....	30
III.4	Prosedur Penelitian.....	30
III.4.1	Parameter Perhitungan.....	30
III.4.2	Perhitungan DFT Grafena.....	31
III.4.3	Perhitungan DFT Molekul H ₂ S dan SO ₂	32
III.4.4	Perhitungan DFT Antarlapisan G/h-BN: Murni dan Cacat Kristal.....	32
III.4.5	Perhitungan DFT Adsorpsi Molekul H ₂ S dan SO ₂ pada Permukaan Grafena dan Antarlapisan G/h-BN.....	33
III.4.6	Analisa Hasil	35
III.4.5.1	Energi Interaksi.....	35
III.4.5.2	Sifat Elektronik.....	35
III.4.5.3	Waktu Pemulihan.....	35
III.4.5.4	<i>Work function</i>	36
BAB IV	37
HASIL DAN PEMBAHASAN	37
IV.1	Adsorpsi Gas H ₂ S dan SO ₂ pada permukaan Grafena.....	37
IV.2	Antarlapisan G/h-BN: Murni dan Cacat Kristal	39
IV.3.1	Struktur Geometri Antarlapisan G/h-BN	39
IV.3.2	Sifat Elektronik Antarlapisan.....	45
IV.3	Adsorpsi Molekul H ₂ S dan SO ₂ pada Permukaan Antarlapisan G/h-BN.....	47
IV.3.1	Properti Geometri dan Adsorpsi Antarlapisan.....	47
IV.3.2	Parameter Elektronik Antarlapisan.....	52
BAB 5	56
PENUTUP	56
V.1.	Kesimpulan.....	56
V.2.	Saran	57
DAFTAR PUSTAKA	58
LAMPIRAN	61