

ABSTRAK

Gas volatil organik seperti formaldehid, asetaldehid, dan aseton adalah golongan senyawa yang memiliki sifat karsinogenik dimana paparan dalam jangka waktu yang lama terbukti dapat meningkatkan risiko kanker seperti leukemia. Penelitian sebelumnya telah menunjukkan adanya peningkatan jumlah adsorpsi gas formaldehid pada heterostruktur grafena boron nitrida (G/h-BN) sebesar 9 kali lipat dibandingkan grafena oksida tereduksi. Oleh karena itu, penelitian ini berfokus untuk menelusuri lebih lanjut terkait hasil penelitian sebelumnya melalui studi komputasi dalam upaya mendapatkan pemahaman yang lebih rinci terhadap fenomena adsorpsi yang terjadi di level kuantum. Dalam upaya mewujudkan penelitian ini, pemodelan berbasis DFT (Density Functional Theory) digunakan untuk melakukan optimasi dan perhitungan interaksi antarmolekul. Optimasi parameter seperti energi cutoff, titik k, fungsi pertukaran korelasi dan fungsi dispersi dilakukan terlebih dahulu. Ketiga ligan formaldehid, asetaldehid, dan aseton beserta kedua reseptor grafena dan G/h-BN dioptimasi sebelum diinteraksikan untuk membentuk sistem kompleks. Pada sistem kompleks, posisi ketiga ligan tersebut divariasikan dalam 12 orientasi berbeda di atas reseptor grafena dan G/h-BN untuk mengetahui orientasi adsorpsi yang optimal. Hasil perhitungan yang diperoleh pada optimasi parameter adalah energi cutoff terkonvergensi di 680 eV, titik k terkonvergensi di ukuran grid 7x7x1 dan 15x15x1, fungsi pertukaran korelasi yang sesuai adalah GGA (Generalized Gradient Approximation), dan fungsi dispersi vdW-DF2 menghasilkan perhitungan yang relevan dengan penelitian sebelumnya. Optimasi sistem kompleks menunjukkan adanya peningkatan kekuatan adsorpsi pada sistem G/h-BN dibandingkan sistem grafena yang ditandai dengan peningkatan energi adsorpsi sebesar 0,864 kJ/mol pada adsorpsi ligan formaldehid, 3,08 kJ/mol pada adsorpsi ligan asetaldehid dan 3,682 kJ/mol pada adsorpsi ligan aseton. Orientasi adsorpsi yang terjadi menunjukkan pola yang sama dimana gugus karbonil dari setiap ligan berada tepat di atas hollow reseptor grafena dan di atas atom karbon ketika berinteraksi dengan reseptor G/h-BN.

Kata kunci: Gas volatil organik, hetero grafena boron nitrida, zat padat, DFT, Quantum ESPRESSO