

## ABSTRAK

### STUDI KOMPUTASI ADSORPSI METIL HIJAU PADA BCNO DENGAN DOPING LOGAM Co, Cu, DAN Zn MENGGUNAKAN METODE DFT

*Boron carbon oxynitride* (BCNO) merupakan bahan semikonduktor yang terdiri dari unsur B, C, N, dan O. Material ini dapat dimanfaatkan dalam berbagai aplikasi, salah satunya adsorpsi yang berpotensi sebagai solusi dari pencemaran air seperti zat warna metil hijau. Namun, BCNO memiliki celah pita yang lebar, oleh karena itu perlu dilakukan peningkatan sifat optik dengan cara doping. Pada penelitian ini, dianalisis adsorpsi metil hijau pada permukaan *nanosheet* BCNO yang di doping logam (M-BCNO; dimana M adalah logam transisi Co, Cu, dan Zn). Analisis dilakukan secara komputasi menggunakan teori fungsi kerapatan (DFT) dan level teori B97-3c dengan mengasumsikan molekul dalam fasa gas dan fasa air. Selain itu dilakukan analisis reaktivitas elektronik, interaksi antara molekul (NBO), dan analisis topologi molekul (QTAIM). Fasa gas memiliki energi adsorpsi yang lebih negatif daripada fasa cair. Nilai energi adsorpsi metil hijau pada konfigurasi Co-BCNO lebih kuat daripada BCNO murni, secara berturut-turut nilai adsorpsi yang diperoleh  $\text{Co-BCNO} > \text{Cu-BCNO} > \text{Zn-BCNO} > \text{BCNO}$  murni. Perhitungan QTAIM mengkonfirmasi ikatan *Van Der Waals* antara metil hijau dengan BCNO/M-BCNO, dan sesuai dengan analisis NBO. Perubahan struktur elektron dianalisis lebih lanjut dengan spektrum (DOS). Celah pita energi HOMO-LUMO pada adsorpsi fasa gas lebih rendah (0,55 eV – 2,17 eV) daripada fasa cair (0,60 eV – 2,30 eV). Oleh karena itu, BCNO dengan doping logam Co diprediksi memiliki kinerja adsorpsi yang baik.

Kata-kata kunci: adsorpsi; BCNO; DFT; logam transisi; metil hijau.



## ABSTRACT

### COMPUTATIONAL STUDY OF ADSORPTION OF METHYL GREEN ON BCNO DOPED Co, Cu, AND Zn USING DFT METHOD

Boron carbon oxynitride (BCNO) is a semiconductor material consisting of elements B, C, N, and O. This material can be used in various applications, one of which is adsorption which has the potential as a solution to water pollution such as methyl green dyes. However, BCNO has a wide band gap, therefore it is necessary to improve optical properties by doping. In this study, methyl green adsorption was analyzed on the surface of metal-doped BCNO nanosheets (M-BCNO; where M is the transition metal Co, Cu, and Zn). The analysis was conducted computationally using density functional theory (DFT) with the B97-3c level of theory, assuming the molecules in the gas and aqueous phases. Additionally, electronic reactivity analysis, natural bond orbital (NBO) interaction, and molecular topological analysis (QTAIM) were performed. The gas phase showed more negative adsorption energy compared to the liquid phase. The adsorption energy values of methyl green on Co-BCNO configuration were stronger than pure BCNO, with the following adsorption strengths: Co-BCNO > Cu-BCNO > Zn-BCNO > pure BCNO. QTAIM calculations confirmed the van der Waals interaction between methyl green and BCNO/M-BCNO, consistent with NBO analysis. Further analysis of electron structure was conducted through the density of states (DOS) spectrum. The HOMO-LUMO energy bandgap for gas phase adsorption was lower (0.55 eV – 2.17 eV) compared to the liquid phase (0.60 eV – 2.30 eV). Therefore, BCNO doped with Co is predicted to have an effective adsorption performance.

*Keywords:* adsorption; BCNO; DFT; transition metals; methyl green.