

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penelitian mengenai Boron Carbon Oxynitride (BCNO) mulai berkembang, material ini pertama kali disintesis dan dikembangkan oleh Takashi Ogi dkk pada tahun 2008, pada penelitian tersebut menggunakan metode *facile liquid-phase* yang menghasilkan BCNO dengan emisi panjang gelombang pada 387-571 nm [1] [2] [3]. Material *boron carbon oxynitride* (BCNO) merupakan nanomaterial semikonduktor berbasis boron nitride yang tidak beracun, proses sintesis yang sederhana, efisiensi kuantum yang tinggi dan memiliki kemampuan untuk mengadsorpsi suatu zat, serta sifat fisiko-kimia yang dapat diatur dengan memvariasikan komposisi boron, karbon, nitrogen, dan oksigen [4, 5]. Material ini dapat digunakan dalam berbagai aplikasi seperti LED [6], deteksi ion, kemosensor, identifikasi sidik jari [7], fotokatalisis [8], dan adsorpsi [9]. Diantara aplikasi tersebut, proses adsorpsi menjadi pembahasan yang menarik karena berpotensi dalam penanganan dan pengolahan limbah yang menjadi masalah lingkungan.

Penggunaan bahan semikonduktor seperti BCNO berpotensi dalam degradasi kontaminan, seperti penghilangan polutan dalam air, senyawa organik dan anorganik. bahan berbasis karbon, karbon mesopori, graphen, dan nanokompositnya telah terbukti dapat di aplikasikan dalam pengolahan air [10]. Dalam sebuah penelitian menunjukkan, BCNO efektif terhadap adsorpsi zat warna. Hal ini dikarenakan adanya ikatan boron dan B-O. Situs boron adalah asam lewis yang dapat menarik dan memutus ikatan azo yang mendukung reaksi lebih lanjut dengan melibatkan atom nitrogen [11]. Terdapat beberapa jenis pewarna yang dapat memicu terjadinya pencemaran, di antaranya pewarna azo, antraquinon, indigo, santin, ftalosianin, pewarna nitrasasi dan nitrosasi, pewarna difenilmetana dan trifenilmetana, serta pewarna sianin [12]. Dari beberapa golongan tersebut, metil hijau dengan rumus molekul $C_{26}H_{33}Cl_2N_3$ merupakan golongan trifenilmetana yang cukup banyak digunakan dalam industri tekstil, bidang kesehatan, dan biologi. Masuknya zat warna tersebut ke dalam lingkungan dapat mempengaruhi karakteristik kimia dan potensi pencemaran. Selain itu, metil hijau ini bersifat

mutagenik, alergenik, karsinogenik, beracun, serta tahan terhadap degradasi biologis alami [13].

Namun, senyawa BCNO ini juga memiliki kekurangan yaitu tingkat energi celah pita yang lebar sekitar 5,8 eV, hal ini disebabkan karakter ionik antara atom karbon dan nitrogen [14]. Hal ini akan menyebabkan interaksi yang lemah pada proses adsorpsi [15]. Dalam sebuah penelitian secara teoritis menunjukkan bahwa doping kimia dengan logam transisi (M) dapat meningkatkan sifat elektroniknya, yang berdampak pada meningkatnya sensitivitas dan kinerja bahan dalam aplikasi adsorpsi [16]. Hossain dkk, melaporkan bahwa doping logam transisi (Co, Cu, dan Zn) dapat menurunkan nilai energi celah pita dan meningkatkan kinerja adsorpsi cholormethana pada material BN [17]. Penggunaan logam Co sebagai doping dikarenakan kobalt termasuk logam transisi yang memiliki orbital yang masih belum terisi penuh, logam Co ini juga memiliki energi ikat yang lebih tinggi daripada energi kohesifnya yang diharapkan dapat meningkatkan energi adsorpsi zat warna pada BCNO [18]. Logam Cu dipilih sebagai dopan karena tidak mudah teroksidasi dan mempunyai potensial reduksi yang tinggi, sehingga diperkirakan logam Cu dapat secara efektif menjebak elektron dan memperkecil kemungkinan terjadinya rekombinasi elektron-hole [19].

Dalam dua dekade terakhir, perkembangan ilmu kimia terutama dalam studi komputasi semakin pesat, hal ini mendorong banyak penelitian terkait bidang tersebut. Dengan studi kimia komputasi dapat memprediksi sifat-sifat dari suatu senyawa. Selain itu, dalam penelitian kimia komputasi dapat meminimalisir kesalahan eksperimen, biaya dan waktu yang efektif. Salah satu metode yang sering digunakan adalah metode *Density Functional Theory* (DFT) [20]. Pemilihan metode DFT dikarenakan memiliki efisiensi waktu dan keakuratan yang lebih baik dibandingkan dengan metode lain. Penelitian yang mempelajari mekanisme adsorpsi zat warna menggunakan komputasi telah banyak dilakukan, di antaranya adsorpsi zat warna dasar [21], zat warna kationik [22], dan adsorpsi zat warna reaktif [23], serta masih banyak lagi.

Berdasarkan penjelasan diatas, penambahan dopan Co, Cu, dan Zn pada struktur BCNO berpotensi dalam mengoptimalkan proses adsorpsi. Oleh karena itu, penelitian ini membahas tentang adsorpsi zat warna metil hijau pada BCNO yang

didoping dengan logam transisi (Co, Cu, dan Zn) melalui perhitungan DFT. Dilakukan juga analisis geometri nanosheet BCNO sebelum dan sesudah adsorpsi. Kemudian, untuk memahami efek solvasi, adsorpsi metil hijau pada BCNO dalam fasa gas dibandingkan dengan pelarut air. Energi adsorpsi, parameter reaktivitas, dan sifat orbital molekul termasuk plot *density of state* (DOS) dihitung menggunakan perhitungan DFT. Selain itu, interaksi antara metil hijau dan BCNO dipelajari menggunakan perhitungan QTAIM dan NBO.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka permasalahan yang dapat dirumuskan sebagai berikut :

1. Bagaimana pengaruh penambahan doping logam transisi terhadap sifat elektronik BCNO?
2. Bagaimana perbandingan energi adsorpsi BCNO murni dan BCNO terdoping logam?
3. Bagaimana karakteristik interaksi antar metil hijau dengan BCNO murni dan BCNO terdoping logam?

1.3 Batasan Masalah

Berdasarkan permasalahan yang telah dirumuskan, penelitian ini akan dibatasi pada beberapa masalah berikut :

1. Posisi target atom yang dianalisis meliputi atom boron, karbon, nitrogen, dan oksigen, serta addatom. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode DFT.
2. Doping yang digunakan adalah doping logam transisi meliputi kobalt (Co), tembaga (Cu), dan seng (Zn). Serta zat warna yang digunakan pada penelitian ini adalah metil hijau.
3. Karakteristik interaksi antar molekul dianalisis menggunakan metode NBO dan QTAIM.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan latar belakang dan rumusan masalah yang diajukan, tujuan dilakukannya penelitian ini sebagai berikut :

1. Mengidentifikasi pengaruh doping logam transisi terhadap sifat BCNO.

2. Menganalisis energi adsorpsi BCNO murni dan BCNO terdoping logam transisi terhadap metil hijau.
3. Menganalisis pengaruh solvasi dan karakteristik interaksi molekul BCNO murni dan BCNO terdoping logam transisi dengan metil hijau.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan manfaat dan informasi bagi semua pihak, khususnya di bidang komputasi dan juga bidang lingkungan untuk mengatasi pencemaran akibat zat warna melalui proses adsorpsi dengan material BCNO terdoping logam transisi.

