

**ADSORPSI ATOM GERMANIUM PADA UJUNG TERBUKA *SINGLE WALLED*
CARBON NANOTUBE (SWCNT) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

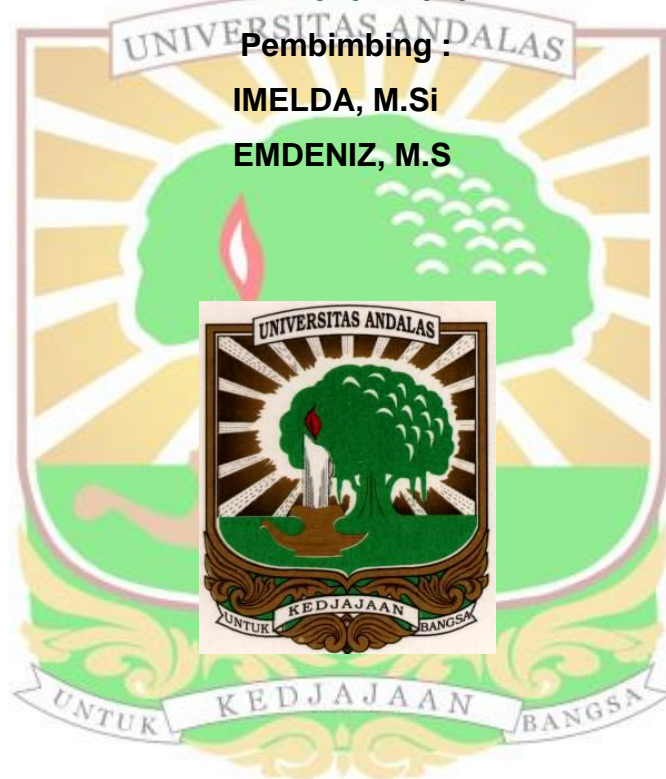
DWI YUSMILIA

BP : 1310411075

Pembimbing :

IMELDA, M.Si

EMDENIZ, M.S



JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2017

**ADSORPSI ATOM GERMANIUM PADA UJUNG TERBUKA *SINGLE WALLED*
CARBON NANOTUBE (SWCNT) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1**

Oleh

DWI YUSMILIA

BP : 1310411075

Pembimbing :

IMELDA, M.Si

EMDENIZ, M.S



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains
Pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Andalas

**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2017**

INTISARI

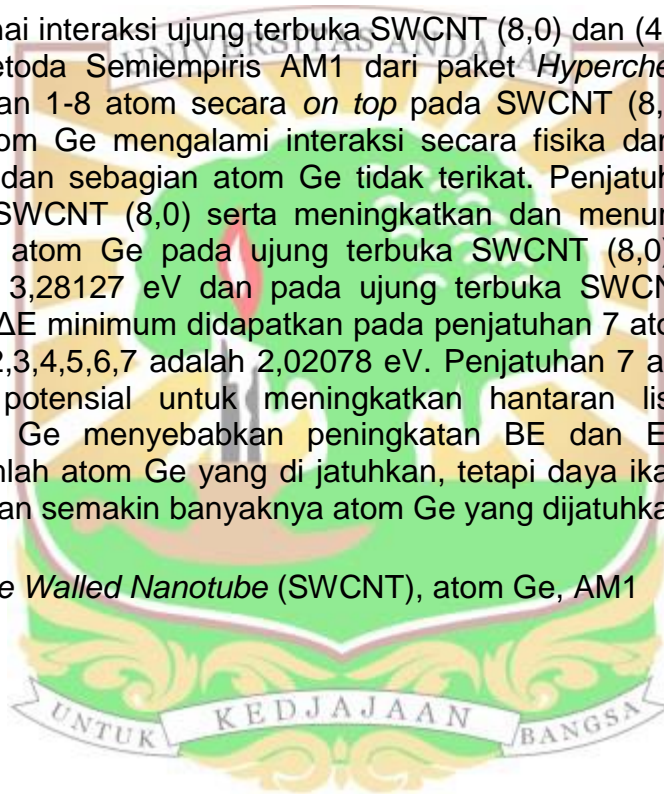
ADSORPSI ATOM GERMANIUM PADA UJUNG TERBUKA *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1

Oleh:

Dwi Yusmilia (BP: 1310411075)
Dibimbing oleh Imelda, M.Si dan Emdeniz, M.S

Penelitian mengenai interaksi ujung terbuka SWCNT (8,0) dan (4,4) dengan atom Ge menggunakan metoda Semiempiris AM1 dari paket *Hyperchem* telah dilakukan. Atom Ge dijatuhkan 1-8 atom secara *on top* pada SWCNT (8,0) dan *bridge* pada SWCNT (4,4). Atom Ge mengalami interaksi secara fisika dan kimia pada ujung terbuka SWCNT, dan sebagian atom Ge tidak terikat. Penjatuhan atom Ge dapat menurunkan ΔE SWCNT (8,0) serta meningkatkan dan menurunkan ΔE SWCNT (4,4). Penjatuhan atom Ge pada ujung terbuka SWCNT (8,0) menghasilkan ΔE antara 2,02078 - 3,28127 eV dan pada ujung terbuka SWCNT (4,4) 3,45508 – 4,69140 eV. Nilai ΔE minimum didapatkan pada penjatuhan 7 atom Ge pada atom C dengan nomor 1,2,3,4,5,6,7 adalah 2,02078 eV. Penjatuhan 7 atom Ge pada posisi tersebut sangat potensial untuk meningkatkan hantaran listrik dari SWCNT. Penjatuhan atom Ge menyebabkan peningkatan BE dan E_{ads} seiring dengan bertambahnya jumlah atom Ge yang di jatuhkan, tetapi daya ikat SWCNT per atom Ge menurun dengan semakin banyaknya atom Ge yang dijatuhkan.

Kata Kunci: *Single Walled Nanotube* (SWCNT), atom Ge, AM1



ABSTRACT

ADSORPTION GERMANIUM ATOMS ON THE OPEN ENDED *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) USE SEMIEMPIRIS METHODE AM1

By:

**Dwi Yusmilia (BP: 1310411075)
Imelda, M.Si dan Emdeniz, MS**

The research about interaction of the open ended SWCNT (8,0) and (4,4) with Ge atoms has been done. The research used AM1 method from hyperchem package. 1-8 Ge atoms were dropped with two position: on top and bridge. The result showed that Ge atoms were adsorbed chemically, physically and desorbed on SWCNT. Ge atoms can decrease ΔE SWCNT (8,0) and decrease/increase band gap of SWCNT (4,4). the value of ΔE SWCNT (8,0) and SWCNT (4,4) are 2,02078 – 3,28127 eV and 3,45508 – 4,69140 eV respectively. Minimum ΔE was obtained on dropped 7 Ge atoms on atom C with position 1,2,3,4,5,6,7 is 2,02078 eV. Ge atoms was dropped on that position is very potential for increasing electrical conductivity of SWCNT. Ge atoms can increase bonding energy (BE) and adsorption energy (E_{ads}) with increasing of number Ge atoms. But holding capacity SWCNT Ge atoms decreases with increasing number of Ge atoms are dropped.

Keywords: *Single Walled Nanotube* (SWCNT), Ge atoms, AM1

