

ADSORPSI ATOM GERMANIUM PADA DINDING *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) (8.0) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

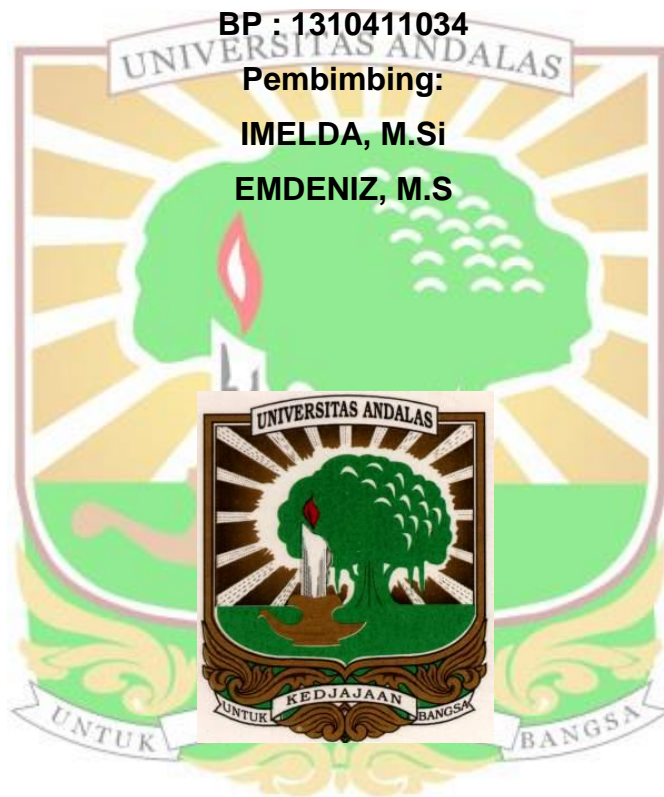
SRI NOLA VEBIOLA

BP : 1310411034

Pembimbing:

IMELDA, M.Si

EMDENIZ, M.S



JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2017

ADSORPSI ATOM GERMANIUM PADA DINDING *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) (8.0) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1

Oleh:

SRI NOLA VEBIOLA

BP : 1310411034

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 DINDING *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) (8.0) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1

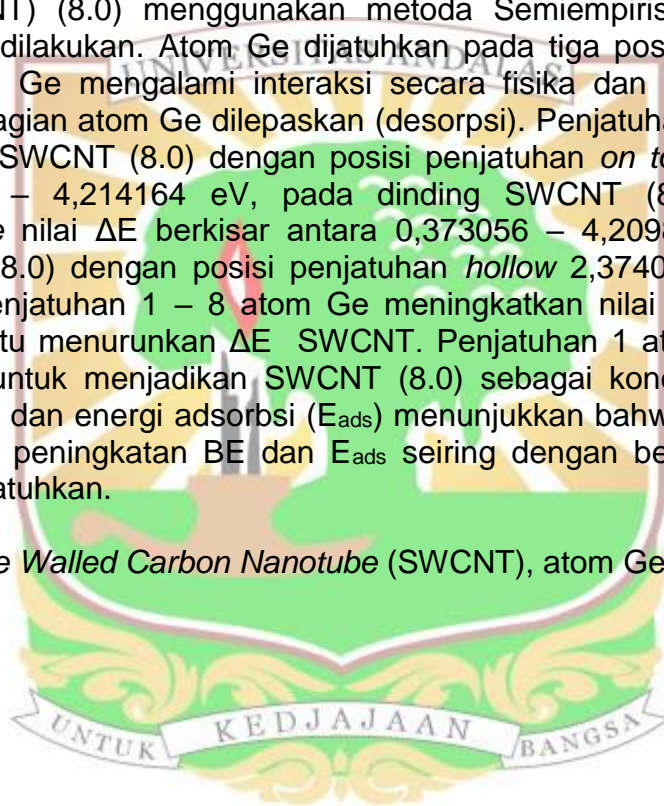
Oleh:

Sri Nola Vebiola (BP: 1310411034)

Dibimbing oleh Imelda, M.Si dan Emdeniz, MS

Penelitian mengenai adsorpsi atom Germanium pada dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0) menggunakan metoda Semiempiris AM1 dari paket *Hyperchem* telah dilakukan. Atom Ge dijatuhkan pada tiga posisi : *on top*, *bridge*, dan *hollow*. Atom Ge mengalami interaksi secara fisika dan kimia pada dinding SWCNT, dan sebagian atom Ge dilepaskan (desorpsi). Penjatuhan 1 sampai 8 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *on top* nilai ΔE berkisar antara 1,687036 – 4,214164 eV, pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *bridge* nilai ΔE berkisar antara 0,373056 – 4,209844 eV dan pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *hollow* 2,374053 – 3,905996 eV. Secara umum, penjatuhan 1 – 8 atom Ge meningkatkan nilai ΔE SWCNT, tetapi pada posisi tertentu menurunkan ΔE SWCNT. Penjatuhan 1 atom Ge pada posisi *bridge* potensial untuk menjadikan SWCNT (8.0) sebagai konduktor. Perhitungan energi ikatan (BE) dan energi adsorpsi (E_{ads}) menunjukkan bahwa, penjatuhan atom Ge menyebabkan peningkatan BE dan E_{ads} seiring dengan bertambahnya jumlah atom Ge yang di jatuhkan.

Kata kunci: *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT), atom Ge, AM1.



ABSTRACT

ADSORPTION GERMANIUM ATOMS AT SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE (SWCNT) (8.0) WALL USING SEMIEMPIRICAL AM1 METHOD

By:

**Sri Nola Vebiola (BP: 1310411034)
Imelda, M.Si dan Emdeniz, MS**

This research about adsorption germanium atoms on SWCNT (8.0) wall using Semiempirical AM1 method from Hyperchem package has been done. Ge atoms were dropped on three position : on top, bridge, and hollow. Ge atoms were adsorbed chemically and physically on SWCNT wall and most of Ge atoms were desorption. Imposition of 1 - 8 Ge atoms in the walls of SWCNT (8.0) imposing position on top ΔE value ranging from 1,687036 – 4,214164 eV . The value of ΔE SWCNT (8.0) bridge and hollow are 0,373056 – 4,209844 eV and 2,374053 – 3,905996 eV respectively. In general, the imposition 1 - 8 Ge atom increases the value of ΔE SWCNT, but at a certain position lowered ΔE SWCNT. Imposition 1 Ge atoms in the bridge position the potential to make SWCNT (8.0) as a conductor. The calculation of bonding energy (BE) and adsorption energy (E_{ads}) showed that the dropped of Ge atoms can increase of BE and E_{ads} .

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

