

**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:

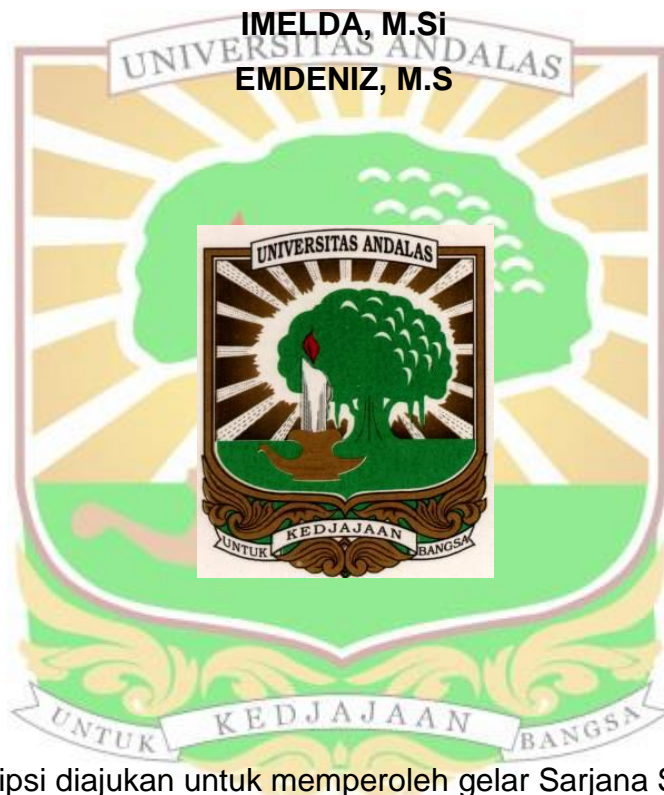
**SRI NOLA VEBIOLA**

**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**

LEMBARAN PENGESAHAN

Adsorpsi Atom Germanium Pada Dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0) Menggunakan Metoda Semiempiris AM1 skripsi oleh Sri Nola Vebiola (SP 1310411034) salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains (Strata 1) pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas, dan telah diuji tanggal 19 April 2017.

Disetujui oleh.

Pembimbing I



Imelda, M.Si

NIP: 197711082005012002

Pembimbing II




Emdeniz, MS

NIP: 195706041983031020

Mengetahui

Ketua Jurusan Kimia



Dr. Afrizal

NIP: 196002091987031004

## PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa Skripsi ini tidak dapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan disuatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu didalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Padang, 19 April 2017

Tanda Tangan



Sri Nola Vebiola

# بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Rasulullah SAW bersabda :

*“Sesungguhnya orang-orang yang berilmu itu adalah para pewaris nabi, mereka (para nabi) tidak mewariskan dinar dan dirham, melainkan hanya mewariskan ilmu. Barang siapa mengambil ilmu itu, berarti ia telah mengambil barang yang banyak”*  
(HR. Ibnu Majah dan Hibban)

*“Ya., ALLAH SWT.,*

*Segela puji serta syukur yang tiada henti slalu ku ucapkan atas nikmatMu., berkat izin dan kuasaMu lah aku dapat menggapai ini, semoga semua ini mampu menerangi jalan dan memperkuat langkah ku untuk menghadapi masa depan., Amiiin.,”*

*Semua ini ku persembahkan untuk Ayahanda & Ibunda tercinta (Syafiril & Lisma). Ayah & Ibuku terima kasih atas semua perjuangan serta kesabaranmu, tulusnya cinta dan kasih kasayangmu slalu ku rasakan setiap saat, dukungan dan nasehat-nasehatmu slalu mengalir untukku, maafmu slalu ada ketika khilafku melukai hatimu, Ayah & Ibu terima kasih telah menjadi orang tua terbaik, aku kan slalu ingat semua pesan-pesanmu.,*

*Syukur dan terima kasih kuucapkan kepada abang dan Kakakku tersayang (Ratna Wilis, Jusianita, Masizal, dan Albar Sati) yang setiap saat memberikan energi agar tetap semangat dalam mencapai kesuksesan.,*

*Terima kasih yang tak hingga untuk seluruh dosen serta karyawan Kimia FMIPA UNAND, terutama kepada Ibu Imelda, M.Si dan Bapak Emdeniz, MS selaku pembimbing dalam menyelesaikan skripsi. Bapak Dr Syukri Arief, M.Eng selaku Penasehat Akademik atas semua tuntunan serta nasehat-nasehatnya.*

menghampirinya saat hati lupa dan mencarinya saat jiwa memerlukan kedamaian,”

Sangat terkhhusus buat teman-teman seperjuangan Kimia; Moodbooster (Atik, Indra, Dwi, Puput, Rahma dan Wanda), kepada Annisa, Nindri dan Rifqi sahabat terbaik serta Keluarga Bp 034, Nuclear, dan teman-teman angkatan 2010-2016 yang telah banyak membantu sampai saat ini

Rasa syukur dan terima kasih yang tak kan pernah lupa buat seseorang yang telah banyak mengorbankan waktu dan tenaga atas semua dukungan semangat serta hari-hari indah dan menyenangkan yang slalu dihiasi canda tawanya, Terakhir terima kasih yang tiada hingga buat semuanya yang tidak dapat disebutkan namanya satu persatu, semoga kita semua dapat meraih sukses bersama., Amin.,

Padang, 19 April 2017



Sri Nola Vebiola

## INTISARI

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

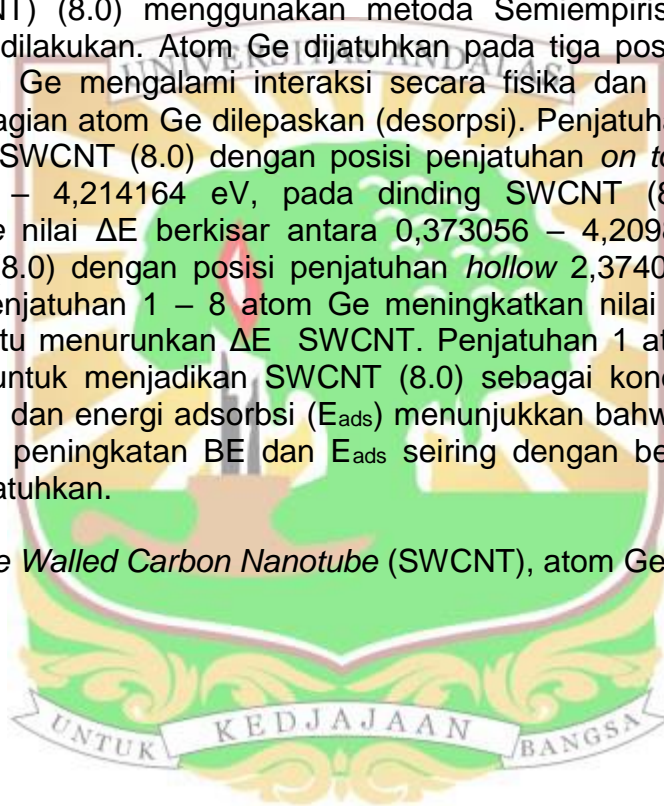
Oleh:

**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  $\Delta E$  berkisar antara 1,687036 – 4,214164 eV, pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *bridge* nilai  $\Delta E$  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  $\Delta E$  SWCNT, tetapi pada posisi tertentu menurunkan  $\Delta E$  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

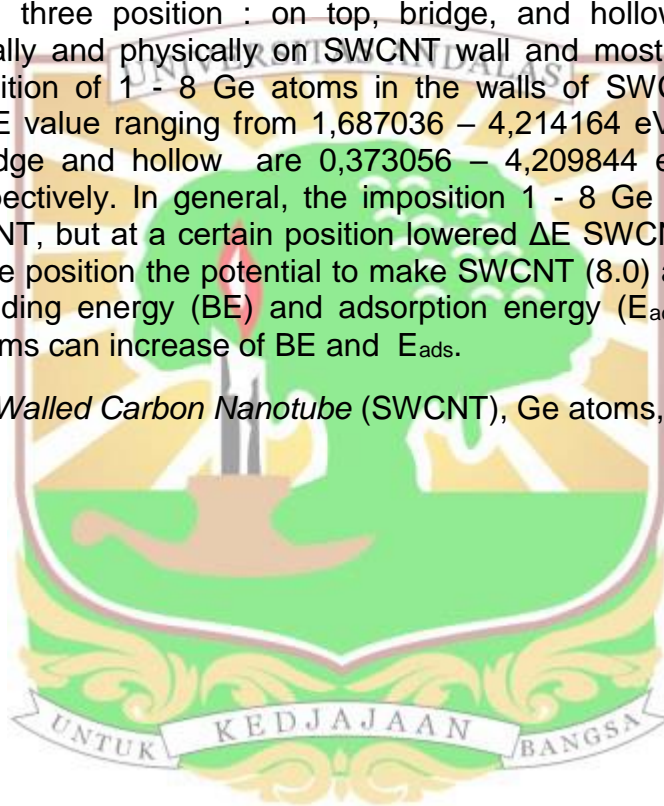
### ADSORPTION GERMANIUM ATOMS AT SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE (SWCNT) (8.0) WALL USING SEMIEMPIRICAL AM1 METHOD

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  $\Delta E$  value ranging from 1,687036 – 4,214164 eV . The value of  $\Delta E$  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  $\Delta E$  SWCNT, but at a certain position lowered  $\Delta E$  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*





## UCAPAN TERIMA KASIH

Syukur Alhamdulillah penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala karunia dan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penulisan skripsi dengan judul "Adsorpsi Atom Germanium Pada Dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0) Menggunakan Metoda Semiempiris AM1". Dalam penyusunan skripsi ini penulis banyak mendapat bimbingan, arahan, nasihat, bantuan serta dorongan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih dan penghargaan yang sebesar-besarnya kepada:

1. Ibu Imelda, M.Si dan Bapak Emdeniz, MS selaku Dosen Pembimbing yang telah meluangkan banyak waktu dan memberikan ilmu, bimbingan dan arahan yang begitu bermakna pada penulis sehingga skripsi ini dapat diselesaikan.
2. Bapak Dr. Syukri Arief, M.Eng selaku Penasehat Akademik yang telah memberikan perhatian dan bimbingan selama masa perkuliahan.
3. Kedua orangtua; ayah (Syafri) dan mama (Lisma) yang telah memberikan do'a dan semangat dalam setiap kegiatan.
4. Bapak Dr. Afrizal selaku Ketua Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas.
5. Semua pihak yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, oleh karena itu penulis menerima saran dan kritikan dari pembaca. Semoga skripsi ini bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan khususnya di bidang kimia komputasi.

Padang, 19 April 2017



Penulis

## DAFTAR ISI

LEMBARAN PENGESAHAN.....	i
HALAMAN PERNYATAAN.....	ii
INTISARI.....	v
ABSTRACT.....	vi
UCAPAN TERIMA KASIH.....	vii
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
DAFTAR GAMBAR.....	xi
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG.....	xiii
BAB I. PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	2
1.4 Manfaat Penelitian.....	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 <i>Carbon Nanotube</i> (CNT).....	4
2.2 Adsorpsi.....	5
2.3 Germanium.....	6
2.4 Kimia Komputasi.....	6
2.5 Metoda Semi Empiris <i>Austin Model 1</i> (AM1).....	7
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN.....	8
3.1 Tempat Penelitian.....	8
3.2 Peralatan.....	8
3.3 Struktur yang Diamati.....	8
3.4 Prosedur Penelitian.....	8
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	14
4.1 Optimasi SWCNT.....	14
4.2 Penjatuhan Atom Ge Pada Dinding SWCNT <i>on top</i> .....	14
4.2.1 Penjatuhan 1 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	14
4.2.2 Penjatuhan 2 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	15
4.2.3 Penjatuhan 3 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	15
4.2.4 Penjatuhan 4 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	16
4.2.5 Penjatuhan 5 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	17
4.2.6 Penjatuhan 6 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	17
4.2.7 Penjatuhan 7 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	18
4.2.8 Penjatuhan 8 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	19
4.3 Penjatuhan Atom Ge Pada Dinding SWCNT <i>bridge</i> .....	19
4.3.1 Penjatuhan 1 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	19
4.3.2 Penjatuhan 2 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	20
4.3.3 Penjatuhan 3 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	21
4.3.4 Penjatuhan 4 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	21
4.4 Penjatuhan Atom Ge Pada Dinding SWCNT <i>hollow</i> .....	22
4.4.1 Penjatuhan 1 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	22
4.4.2 Penjatuhan 2 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	23
4.4.3 Penjatuhan 3 Atom Ge pada Dinding SWCNT.....	23
4.5 Nilai celah energi ( $\Delta E$ ) penjatuhan atom Ge pada dinding SWCNT (8.0).....	24
4.6 Nilai <i>Binding Energy</i> (BE) penjatuhan atom Ge pada dinding SWCNT (8.0).....	2
4.7 Nilai energi adsorpsi ( $E_{ads}$ ) penjatuhan atom Ge pada dinding.....	

SWCNT (8.0).....	26
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN.....	28
5.1 Kesimpulan .....	28
5.2 Saran .....	28
DAFTAR PUSTAKA .....	29
LAMPIRAN .....	31



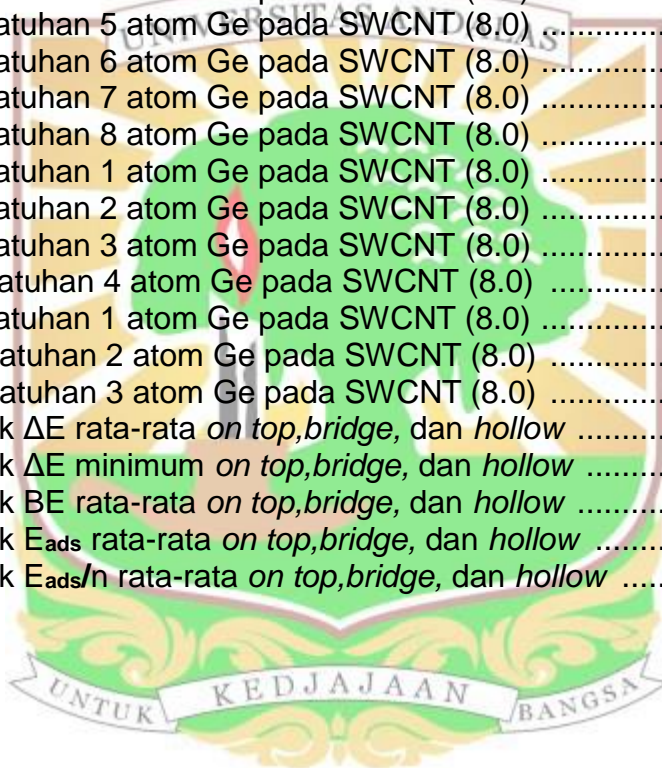
## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1.	Gambar hasil optimasi penjatuhan atom Ge .....	31
Lampiran 2.	Nilai $\Delta E$ , BE dan $E_{ads}$ hasil optimasi.....	44
Lampiran 3.	Tabel data nilai hasil $\Delta E$ rata-rata, $\Delta E$ minimum, BE rata-rata, $E_{ads}$ rata-rata, dan $E_{ads}/n$ rata-rata atom Ge .....	53
Lampiran 4.	Data panjang ikatan hasil optimasi penjatuhan atom Ge .....	54
Lampiran 5.	Note pad hasil optimasi SWCNT (8.0) .....	61
Lampiran 6.	Prosedur kerja.....	62



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 3.1 SWCNT setelah Optimasi .....	9
Gambar 3.2 Penomoran SWCNT (8.0) untuk posisi penjatuhan atom Ge pada <i>on top</i> .....	9
Gambar 3.3 Penomoran SWCNT (8.0) untuk posisi penjatuhan atom Ge pada <i>bridge</i> .....	9
Gambar 3.4 Penomoran SWCNT (8.0) untuk posisi penjatuhan atom Ge pada <i>hollow</i> .....	9
Gambar 3.5 Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8.0) <i>On top</i> .....	10
Gambar 3.6 Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8.0) <i>On bridge</i> .....	10
Gambar 3.7 Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8.0) <i>hollow</i> .....	11
Gambar 4.1 Penjatuhan 1 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	14
Gambar 4.2 Penjatuhan 2 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	15
Gambar 4.3 Penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	15
Gambar 4.4 Penjatuhan 4 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	16
Gambar 4.5 Penjatuhan 5 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	17
Gambar 4.6 Penjatuhan 6 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	18
Gambar 4.7 Penjatuhan 7 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	18
Gambar 4.8 Penjatuhan 8 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	19
Gambar 4.9 Penjatuhan 1 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	20
Gambar 4.10 Penjatuhan 2 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	20
Gambar 4.11 Penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	21
Gambar 4.12 Penjatuhan 4 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	22
Gambar 4.13 Penjatuhan 1 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	22
Gambar 4.14 Penjatuhan 2 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	23
Gambar 4.15 Penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT (8.0) .....	24
Gambar 4.16 Grafik $\Delta E$ rata-rata <i>on top, bridge, dan hollow</i> .....	24
Gambar 4.17 Grafik $\Delta E$ minimum <i>on top, bridge, dan hollow</i> .....	25
Gambar 4.18 Grafik BE rata-rata <i>on top, bridge, dan hollow</i> .....	25
Gambar 4.19 Grafik $E_{ads}$ rata-rata <i>on top, bridge, dan hollow</i> .....	26
Gambar 4.20 Grafik $E_{ads}/n$ rata-rata <i>on top, bridge, dan hollow</i> .....	26



## DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Tabel Parameter Atom yang Digunakan Dalam Program AM1 .....	12
Tabel 3.2 Tabel jenis ikatan.....	13



## DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

Singkatan	Nama	Pemakaian pertama kali pada halaman
SWCNT	<i>Single Walled Carbon Nanotube</i>	1
$\Delta E$	Celah energi	3
BE	Energi ikatan	3
$E_{ads}$	Energi adsorpsi	3
HOMO	<i>Highest Occupied Molecular Orbital</i>	13
LUMO	<i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i>	13
Lambang		
g/mol	Gram/mol	6
Nm	Nano meter	6
eV	Elektron Volt	6
kcal/mol	Kilo <i>calori</i> /mol	12
Å	Amstrong	12
KJ/mol	Kilo <i>Joule</i> /mol	14



# I. PENDAHULUAN

## 1.1 Latar Belakang

Penggunaan teknologi nano telah berkembang sangat pesat, di sisi lain teknologi nano juga mulai menarik minat para ilmuwan. Teknologi nano ini dapat dimanfaatkan dalam bidang elektronik (khususnya teknologi komputer) untuk terciptanya perangkat yang lebih portabel, cepat, dapat diandalkan dan hemat energi<sup>1</sup>.

Dalam harapan untuk mendapatkan manfaat dari teknologi nano tersebut, maka peneliti terpacu untuk mendapatkan material nano yang bersifat semikonduktor, sehingga dapat diaplikasikan dalam pembuatan perangkat elektronik. Selama ini material nano yang telah banyak menarik minat para ilmuwan adalah *carbon nanotube* (CNT). Para ilmuwan tertarik dikarenakan sifat-sifat elektronik, mekanik, dan termal yang luar biasa dari CNT. *Carbon nanotube* berdinding tunggal dapat bersifat konduktor atau semikonduktor tergantung pada arah penggulungan dan jaringannya<sup>2</sup>.

*Carbon nanotube* sangat diminati untuk diteliti secara teoritis maupun eksperimen karena merupakan material elektronik yang sangat menjanjikan untuk aplikasi nanoelektronik. Selain merupakan material yang memiliki banyak keunggulan dibandingkan material lain juga memiliki ukuran yang sangat kecil sehingga sangat efektif dan efisien untuk digunakan. Selain itu karena strukturnya yang berongga dan sifat transfer muatannya yang baik maka sangat baik digunakan untuk bahan penyerap<sup>3</sup>. CNT memiliki peran yang menjanjikan dalam aplikasi sel energi, sensor gas, emisi lapangan, dan penyimpanan hidrogen<sup>4</sup>.

*Carbon Nanotube* memiliki dua tipe, yaitu *Single-Walled Nanotube* (SWNT) dan *Multi-Walled Nanotube* (MWNT). *Carbon nanotube* yang sering digunakan dalam berbagai aplikasi adalah SWCNT karena lebih reaktif. Hal menarik dari SWCNT adalah perbedaan diameter dan kiralitasnya yang memberikan perbedaan sifat elektronik sehingga dapat dilakukan kontrol terhadap sifatnya apakah bersifat logam atau semikonduktor. Peningkatan sifat hantaran listriknya juga bisa dilakukan dengan mengadsorpsikan atom atau molekul pada SWCNT<sup>2</sup>.

Penelitian mengenai pengaruh adsorpsi suatu logam terhadap sifat elektronik pada *Carbon Nanotube* telah banyak dilakukan. Beberapa penelitian melaporkan, adsorpsi atom Ga dan As ternyata mengubah sifat konduktivitas listrik *Carbon Nanotube* secara drastis<sup>5</sup>. Ashrafi *et al* juga menginvestigasi pengaruh adsorpsi



nitrogen (N) pada dinding karbon nanotube yang juga mengubah sifat elektroniknya secara signifikan<sup>6</sup>.

Beberapa penelusuran literatur yang telah dilakukan, penelitian mengenai adsorpsi atom pada ujung terbuka SWCNT telah banyak dilakukan. Akan tetapi, adsorpsi atom pada dinding SWCNT dengan diameter (*zigzag* (8.0) dan *armchair* (4.4)) masih jarang ditemukan dan diketahui karbon nanotube memiliki reaktivitas yang berbeda pada bagian dinding dan ujung terbukanya<sup>7</sup>.

Salah satu metode komputasi yang sering digunakan pada penelitian – penelitian sebelumnya yaitu Metode Semiempiris *Austin Model 1* (AM1). Metode Semiempiris *Austin Model 1* (AM1) memiliki ketepatan prediksi yang lebih baik, tidak memerlukan memori yang besar dan waktu yang relatif cepat dalam proses perhitungannya<sup>8</sup>.

Berdasarkan uraian diatas, maka penulis tertarik untuk melakukan penelitian yang berjudul: Adsorpsi Atom Germanium Pada Dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0) Menggunakan Metoda Semiempiris AM1.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas, maka yang menjadi permasalahan dalam penelitian ini adalah:

1. Bagaimana adsorpsi Germanium pada dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0).
2. Bagaimana pengaruh interaksi atom germanium terhadap celah energi ( $\Delta E$ ), energi ikatan (BE), energi adsorpsi dari SWCNT (8.0).

## 1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah:

1. Menentukan pengaruh adsorpsi Germanium pada dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0).
2. Menentukan pengaruh interaksi atom germanium terhadap celah energi ( $\Delta E$ ), energi ikatan (BE), energi adsorpsi dari SWCNT (8.0).

#### 1.4 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat penelitian ini adalah:

1. Memberikan informasi bagaimana adsorpsi Germanium pada dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0).
2. Memberikan informasi pengaruh interaksi atom germanium terhadap celah energi ( $\Delta E$ ), energi ikatan (BE), energi adsorpsi dari SWCNT (8.0).



## II. TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1 Carbon Nanotube (CNT)

*Carbon nanotube* (CNT) ditemukan pada tahun 1991 oleh ilmuwan Jepang *Sumio Iijima* merupakan molekul karbon berbentuk silinder dan termasuk ke dalam kelompok *alotrop* karbon. Senyawa ini yang ideal terbentuk dari sebuah lembaran ikatan karbon seperti grafit yang dilengkungkan membentuk silinder. Istilah nanotube muncul karena ukuran diameternya yang mempunyai orde nanometer dengan panjang beberapa centimeter<sup>9</sup>. CNT adalah salah satu kelas yang paling populer karena memiliki sifat fisik, sifat kimia, dan sifat listrik yang luar biasa<sup>10</sup>.

*Carbon Nanotube* memiliki dua tipe, yaitu *Single-Walled Nanotube* (SWNT) dan *Multi-Walled Nanotube* (MWNT). SWNT terbentuk dari sebuah lembaran grafit yang dilengkungkan. Sebuah SWNT terdiri dari dua bagian yang mempunyai sifat fisika dan kimia yang berbeda. Bagian pertama adalah bagian sisi dinding silinder dan bagian lain adalah ujung-ujung silinder. MWNT terbentuk dari gabungan beberapa SWNT dengan diameter yang berbeda-beda. Panjang dan diameter MWNT sangat berbeda dengan SWNT, sehingga sifat fisika dan kimianya pun akan sangat berbeda<sup>11</sup>. CNT menunjukkan potensi besar dalam setiap bidang ilmu pengetahuan dan teknologi, karena CNT memiliki sifat semikonduktor yang baik<sup>12</sup>.

*Carbon Nanotube* telah dikarakterisasi didasarkan pada luas permukaannya yang besar, daya hantar listriknya yang baik, serta sifat kimia dan mekaniknya yang baik. Karakter ini membuat senyawa ini menjadi subjek investigasi para peneliti untuk dapat memanfaatkan dalam berbagai bidang aplikasi. Struktur *carbon nanotube* yang berongga dan sifat transfer elektron yang dimilikinya membuat material ini mempunyai kemampuan untuk berinteraksi dan menyimpan molekul asing, sehingga baik digunakan sebagai adsorben. *Tensile strength* dan modulus elastisitas yang besar dari *carbon nanotube* dapat digunakan sebagai material komposit. Kestabilan kimia dan konduktivitas elektrik yang baik dari *carbon nanotube* dapat digunakan sebagai bahan elektroda dan komponen listrik. Selain aplikasi diatas, juga dapat digunakan sebagai bahan filter dan biosensor<sup>13</sup>.

CNT merupakan bahan seperti fiber namun memiliki kemampuan yang jauh lebih unggul karena memiliki sifat-sifat yang sangat menakjubkan, yaitu konduktivitas listrik lebih tinggi daripada tembaga, konduktivitas panas lebih tinggi dari berlian, daya tahan terhadap temperatur tinggi, lebih ringan dari aluminium, sifat elektronik dapat diatur (superkonduktor, semikonduktor, dan isolator), *modulus young* dan

kekuatan regang yang tinggi, keras, kuat tetapi mudah dibengkokkan, mempunyai fleksibilitas yang tinggi<sup>14</sup>.

## 2.2 Adsorpsi

Adsorpsi adalah peristiwa penyerapan pada lapisan permukaan atau antar fasa, dimana molekul dari suatu materi terkumpul pada bahan pengadsorpsi. Materi atau partikel yang diadsorpsi disebut adsorbat, sedangkan bahan yang berfungsi sebagai pengadsorpsi disebut adsorben. Salah satu faktor penting yang mempengaruhi proses adsorpsi adalah adsorben. Adsorben yang baik harus memiliki sifat sebagai berikut:

1. Adsorben harus memiliki luas permukaan efektif yang besar
2. Adsorben harus memiliki sejumlah besar jaringan pori-pori sebagai jalan bagi molekul menuju ke dalam adsorben<sup>15</sup>.

Adsorpsi reaktan pada situs aktif katalis akan melepaskan energi dalam bentuk panas, sehingga akan mempermudah molekul reaktan melewati energi aktivasi. Panas yang dilepaskan pada proses adsorpsi berkaitan dengan kekuatan adsorpsi reaktan pada permukaan katalis. Kekuatan adsorpsi reaktan pada permukaan katalis sangat menentukan aktivitas katalis tersebut. Jika adsorpsi yang terjadi sangat lemah, energi yang dilepaskan juga kecil, sehingga hanya sebagian kecil fraksi permukaan yang ditempati oleh reaktan, dan pada akhirnya reaksi berjalan dengan lambat.

Adsorpsi terjadi karena adanya interaksi gaya permukaan padatan dengan molekul - molekul adsorbat. Energi adsorpsi yang dihasilkan bergantung pada tipe adsorpsi yang terjadi. Tipe adsorpsi ini merupakan fungsi logam dan fungsi adsorben.

Adsorpsi molekul pada permukaan dibedakan menjadi dua jenis, yaitu adsorpsi kimia dan adsorpsi fisika. Serapan pada CNT menggunakan kontribusi pengukuran secara terpisah dari adsorpsi kimia dan adsorpsi fisika untuk kapasitas penyimpanan secara keseluruhan pada CNT<sup>16</sup>. Adsorpsi kimia terjadi karena adanya interaksi tumpang tindih orbital molekul di permukaan padatan dengan molekul adsorbat. Adsorpsi ini bersifat spesifik dan ireversibel, sehingga melibatkan gaya yang jauh lebih besar daripada adsorpsi fisika.

Menurut Langmuir, molekul teradsorpsi ditahan pada permukaan oleh gaya valensi yang tipenya sama dengan yang terjadi antara atom-atom dalam molekul.

Adanya ikatan kimia pada permukaan adsorben menyebabkan terbentuknya suatu lapisan atau layer, dimana akan menghambat proses penyerapan selanjutnya oleh batuan adsorben sehingga efektifitasnya berkurang. Sedangkan pada adsorpsi fisika, ikatan yang terjadi adalah ikatan *Van Der Waals* yang lemah. Adsorpsi fisika bersifat reversibel, sehingga semua molekul gas yang teradsorpsi secara fisik akan dilepaskan kembali dengan menaikkan temperatur atau menurunkan tekanan<sup>17</sup>.

### 2.3 Germanium

Germanium adalah suatu unsur kimia dalam tabel periodik yang memiliki lambang unsur (Ge). Unsur ini logam yang putih keabu-abuan, massa atomnya 72,64 g/mol. Dalam bentuk murni, germanium berbentuk kristal dan rapuh<sup>18</sup>. Dalam analisis berikutnya peneliti menemukan bahwa logam ini cocok dengan deskripsi dari elemen Mendeelev sebelumnya disebut "ekacilicon". Winkler memutuskan untuk memberi nama unsur baru germanium, sebagai penghormatan pada tanah airnya<sup>19</sup>.

Celah energi Ge adalah 0,7 eV dengan jari-jari Bohr relatif lebih besar dari 24 nm, sehingga membuatnya sensitif dan sangat baik untuk studi aplikasi<sup>20</sup>. Ge menjadi lebih penting karena keunggulan mobilitas lubang elektron yang merupakan salah satu semikonduktor yang umum digunakan. Keuntungan semikonduktor yang dilihat dari sifat optik dan kimia, maka atom Ge dapat diaplikasikan untuk perangkat detektor inframerah, sistem lensa optik untuk inframerah, serat optik, perangkat elektronik dan sel surya<sup>21</sup>. Salah satu yang menarik perhatian yaitu germanium kawat nano yang memiliki sifat elektronik dan optik yang unik<sup>22</sup>. Dilihat dari segi keuntungan dalam penggunaan dimana atom Ge tidak beracun, ramah lingkungan, stabil, dan berlimpah dialam<sup>23</sup>.

Silikon (Si) dan germanium (Ge) merupakan dua bahan semikonduktor yang masing-masingnya mempunyai celah energi 1,1 dan 0,7 eV. Kedua unsur ini berada pada group IVA pada tabel periodik dan mempunyai ikatan kovalen<sup>21</sup>. Dengan kata lain, resistivitas bahan tersebut terletak antara konduktor dan isolator. Bahan demikian dikelompokkan sebagai semikonduktor. Semikonduktor mempunyai sifat-sifat yang bermanfaat dan sangat intensif digunakan dalam rangkaian elektronik<sup>24</sup>.

### 2.4 Kimia Komputasi

Kimia komputasi adalah cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan kedalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan

perubahannya. Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (atau banyak molekul), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Contoh sifat molekul yang dihitung antara lain struktur atom, energi dan selisih energi, muatan, momen dipol, kereaktifan, frekuensi getaran dan besaran spektroskopi lainnya. Istilah kimia teori dapat didefinisikan sebagai deskripsi matematika untuk kimia, sedangkan kimia komputasi biasanya digunakan ketika metode matematika dikembangkan dengan cukup baik untuk digunakan dalam program komputer<sup>25</sup>.

Kimia komputasi dapat dikelompokkan menjadi:

1. Semiempiris

Program ini membutuhkan parameter, dimana parameter ini diperlukan untuk mendapatkan hasil yang tidak jauh berbeda dengan penelitian lainnya.

2. Ab initio

Program ini memberikan hasil kualitatif yang sangat baik dan dapat memberikan keakuratan jika molekul yang dikaji semakin kecil.

3. Density functional theory

Program ini digunakan untuk memprediksi bagaimana energi tergantung pada kerapatan daripada fungsi gelombang<sup>26</sup>.

## 2.5 Metoda Semi Empiris *Austin Model 1 (AM1)*

Kimia komputasi dengan metoda semiempiris *Austin Model 1 (AM1)* cukup baik untuk memprediksi cincin beranggota enam. Selain itu metoda semiempirik AM1 merupakan metoda semiempiris standar untuk perhitungan senyawa organik.

Dalam kimia komputasi digunakan beberapa macam program salah satunya yang disebut dengan *HyperChem*. Pada program tersebut terdapat banyak metoda yang dapat digunakan dalam kimia kuantum. Salah satunya *Austin Model 1 (AM1)*. Metoda semiempiris AM1 ini tidak memerlukan memori yang besar dan waktu yang banyak. Selain itu, metoda ini dapat memprediksi molekul-molekul dengan jumlah elektron valensi banyak dengan ketepatan yang lebih baik dan mampu menghitung energi yang ditimbulkan oleh ikatan hidrogen dari atom O dan N. Pada metoda AM1 senyawa-senyawa bervalensi banyak dapat diprediksi dengan ketepatan lebih baik dan dilibatkan atom-atom hidrogen dalam perhitungan<sup>8</sup>.

### III. METODOLOGI PENELITIAN

#### 3.1 Waktu dan tempat

Penelitian ini dilaksanakan pada bulan November 2016-Maret 2017 di Laboratorium Komputasi Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas.

#### 3.2 Peralatan

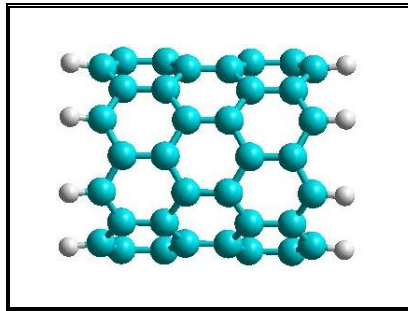
1. Sebuah laptop COMPAQ Presario CQ40 Notebook PC, Intel® Core™ i5-2450M CPU @2.5 GHz, RAM 2.00 GB (1.48 GB usable).
2. Compact Disc paket Program *HyperChem* pro 8.0 (Metoda AM 1).
3. Program Avogadro.

#### 3.3 Atom atau Molekul yang diamati

1. *Single-Walled Carbon Nanotube* (SWCNT).
2. Atom Germanium (Ge)
3. *Single-Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) dengan adsorpsi atom germanium (Ge).

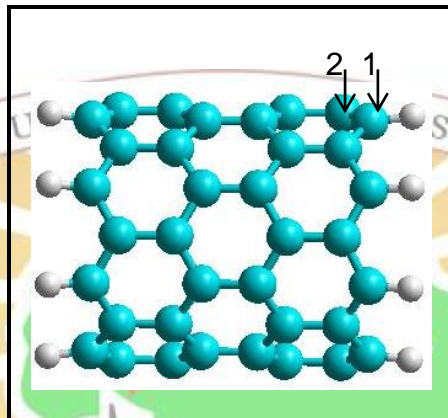
#### 3.4 Prosedur Penelitian

- A. Pembuatan SWCNT dengan program Avogadro
  - Buka jendela *Avogadro*, pada kotak dialog *draw setting*, pilih *element* pilih *Carbon*, tentukan *Bond Order*, pilih *double Bond*.
  - Pilih menu *build*, pilih *Nanotube Builder* sehingga muncul kotak dialog *Nanotube Builder*, tentukan indeks kiral (n,m), tentung panjang nanotube yang diinginkan, pilih *build*.
  - Simpan file dalam format .pdb.
- B. Optimasi geometri dengan *Hyperchem*
  1. Memanggil data dari Avogadro
    - Pilih menu *file*, pilih *open*, sehingga muncul kotak dialog, buka file pada Avogadro, ganti *Files of types* dengan *pdb*. Pilih *Ok*.
    - File akan terbuka pada jendela *Hyperchem* kemudian dioptimasi.
    - SWCNT akan dijatuhi dengan atom Ge kemudian dioptimasi kembali, sehingga didapatkan keadaan yang optimal untuk setiap penjatuhan atom Ge.

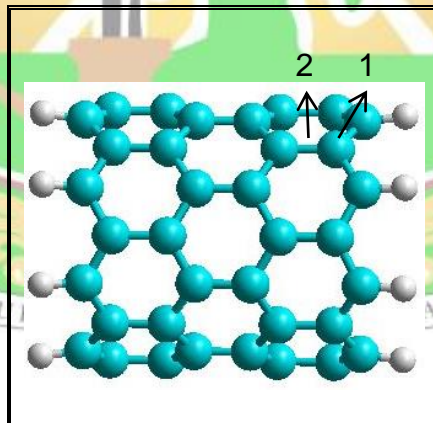


Gambar 3.1 SWCNT setelah optimasi

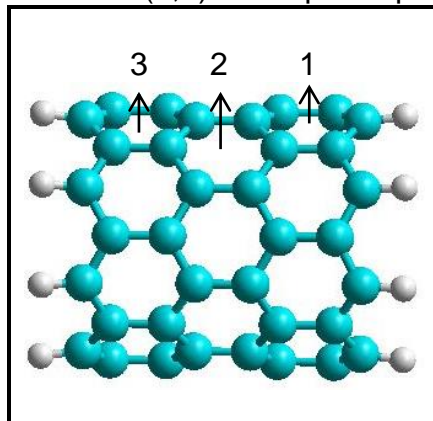
Penjatuhan atom Ge pada SWCNT dilakukan dengan memvariasikan jumlah dan posisi jatuhnya atom dimulai dari 1 atom sampai 8 atom.



Gambar 3.2 Penomoran SWCNT (8,0) untuk posisi penjatuhan atom Ge *on top*



Gambar 3.3 Penomoran SWCNT (8,0) untuk posisi penjatuhan atom Ge *bridge*



Gambar 3.4 Penomoran SWCNT (8,0) untuk posisi penjatuhan atom Ge *hollow*



## 2. SWCNT dengan Adanya Penjatuhan Atom Ge

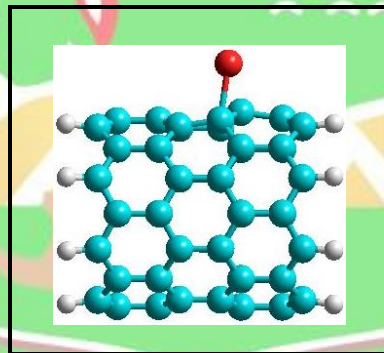
SWCNT yang telah dioptimasi kemudian dijatuhkan atom Ge. Pada SWCNT (8,0) penjatuhan atom Ge dilakukan pada *posisi on top*, dimana atom Ge dijatuhkan pada atom C pada dinding SWCNT. Untuk posisi *bridge* dimana atom Ge dijatuhkan pada atom C pada dinding SWCNT (8,0) artinya atom Ge berada diantara dua atom C. Untuk posisi *hollow* dimana atom Ge dijatuhkan pada atom C pada dinding SWCNT (8,0) artinya atom Ge berada ditengah-tengah atom C.

Setelah dilakukan optimasi pada dinding SWCNT didapatkan nilai celah energi ( $\Delta E$ ), nilai energi ikatan ( $BE$ ), dan energi adsorpsi ( $E_{ads}$ ). Nilai energi adsorpsi diperoleh dengan rumus :

$$E_{ads} = BE_{SWCNT + Ge} - BE_{SWCNT} - BE_{Ge}$$

## 3. Penjatuhan Atom Ge pada dinding SWCNT (8,0). Penjatuhan dilakukan dengan berbagai perlakuan yaitu:

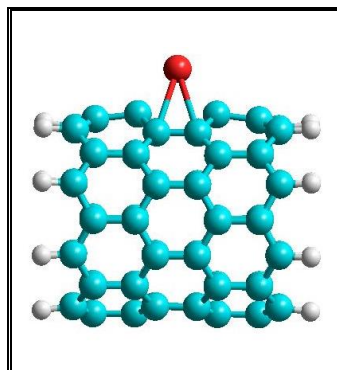
- Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT dengan atom Ge terikat pada atom C SWCNT pada posisi *on top* atau Ge dijatuhkan tepat diatas atom C.



Gambar 3.5 Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8,0) *on top*

Perlakuan yang sama selanjutnya dilakukan untuk jumlah atom Ge mulai satu hingga delapan atom.

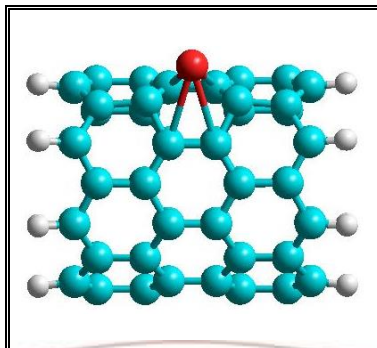
- Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT dengan atom Ge terikat pada atom C SWCNT pada posisi *bridge* atau Ge dijatuhkan diantara 2 atom C.



Gambar 3.6 Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8,0) *bridge*

Perlakuan yang sama selanjutnya dilakukan untuk jumlah atom Ge mulai satu hingga empat atom.

- c) Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT dengan atom Ge terikat pada atom C SWCNT pada posisi *hollow* atau atom Ge dijatuhkan ditengah-tengah.



Gambar 3.7 Penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8.0) *hollow*.

Perlakuan yang sama selanjutnya dilakukan untuk jumlah atom Ge mulai satu hingga tiga atom.

C. Mengaktifkan Program kerja

- Pilih menu *compute*
- Pilih *geometry optimization*, sehingga muncul kotak dialog *semi-empirical optimization*, tentukan RMS gradient dan *maximum cycle*
- Pilih ok
- Jika program telah berhenti bekerja, Pilih menu file dan pilih *save as* dalam *file hin*.

D. Perhitungan

1. Perhitungan dilakukan dengan *single point*
  - Pilih *file*, pilih *start log* tulis nama file.log-nya.
  - Kemudian pilih menu *compute*, pilih *single point*.
  - Lalu pilih *file*, pilih *stop log* dan *save as* dalam *file hin*.

2. Memanggil Data parameter Atom

Untuk memanggil parameter atom-atom penyusun molekul:

- Pilih kanan *start*, pilih open windows explorer.
- Pilih partisi C: lalu pilih *hyper 80*.
- Pilih Runfiles, pilih AM\_1 (dalam bentuk notepad).
- Sesuaikan dengan nomor atom unsur (contoh: 6C, maka dicari nomor 6).

Adapun parameter atom yang digunakan dalam perhitungan AM1 dimuat pada Tabel 3.1 dibawah ini:

Tabel 3.1. Parameter atom yang digunakan dalam program AM1

Parameter	C	H	Ge
Z	6	1	32
U <sub>ss</sub>	-52,028658	-11,396427	-34,1838890
U <sub>pp</sub>	-39,614239	0,0000000	-28,6408110
U <sub>dd</sub>	0,0000000	0,0000000	0,000
$\beta$ s	-15,715783	-6,1737870	-4,3566070
$\beta$ p	-7,7192830	0,0000000	-0,9910910
$\beta$ d	0,0000000	0,0000000	0,000
$\zeta$ s	1,8086650	1,1880780	1,219631
$\zeta$ p	1,6851160	0,0000000	1,982794
$\zeta$ d	0,0000000	0,0000000	0,000
<b>A</b>	2,6482740	2,8823240	2,1364050
E <sub>atom</sub>	-120,81600	-11,396000	-78,708
H <sub>atom</sub>	170,89000	52,102000	89,500

Keterangan :

U = energi kisi s-s, p-p, d-d (eV)

$\beta$  = parameter ikatan orbital s, p, d (eV)

$\zeta$  = eksponen Slater orbital s, p, d (a.u)

$\alpha$  = parameter repulsi inti

E<sub>atom</sub> = energi elektronik atom pada keadaan dasar (eV)

H<sub>atom</sub> = panas pembentukan atom bebas (kcal/mol)

#### E. Luaran Data dalam keadaan Optimal

Luaran data disesuaikan dengan kebutuhan seperti E<sub>HOMO</sub>, E<sub>LUMO</sub>, BE, E<sub>ads</sub>, Panjang ikatan, dan sebagainya. Prosedur yang di pilih dalam penelitian ini adalah metoda Semiempiris AM1

Spin pairing : RHF

Convergence limit : 0,01

Algorithm : Polak-Ribiere (Conjugate Gradient)

RMS gradient : 0,001 kcal/(Å mol)

Maksimum cycle di sesuaikan dengan kebutuhan.

Selain luaran data diatas, juga diperlukan nilai HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) dan LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*). Nilai HOMO dan LUMO ini diperoleh setelah optimasi dengan membuka menu *compute, orbitals*. Langkah ini dilakukan sebelum *stop log*. Nilai HOMO dan LUMO digunakan untuk menentukan sifat elektronik molekul, yang dihubungkan dengan nilai  $\Delta E$ .

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

dimana :

$\Delta E > 3,5$  eV, molekul bersifat isolator

$\Delta E = 1 - 3,5$  eV, molekul bersifat semikonduktor

$\Delta E < 1$  eV, molekul bersifat konduktor

Penelitian juga ditentukan energi ikatan dari atom Ge yang diatuhkan pada SWCNT ujung terbuka. Energi adsorpsi Ge dapat dihitung dengan menggunakan rumus.

$$E_{\text{ads}} = BE_{\text{SWCNT} + \text{Ge}} - BE_{\text{SWCNT}} - BE_{\text{Ge}}$$

dimana:

$E_{\text{ads}}$  : Energi adsorpsi

BE : *Bonding Energi* (energi ikatan)

Dalam penelitian ini juga dapat diasumsikan jenis ikatan C-Ge yang terbentuk, jenis ikatan ini didasarkan pada panjang ikatan yang diperoleh sebagai berikut :

Tabel 3.2. Jenis ikatan berdasarkan panjang ikatan

Ikatan	Ikatan kimia (Å)	Ikatan fisika (Å)	Tidak terikat (Å)
C – Ge	<2,3	2,4 – 2,9	>2,9

## IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

### 4.1 Optimasi SWCNT

Penelitian ini mempelajari interaksi dari atom Ge yang dijatuhkan pada dinding SWCNT dengan menggunakan metoda kimia kuantum semiempiris *Austin Model 1* dari program *HyperChem*.

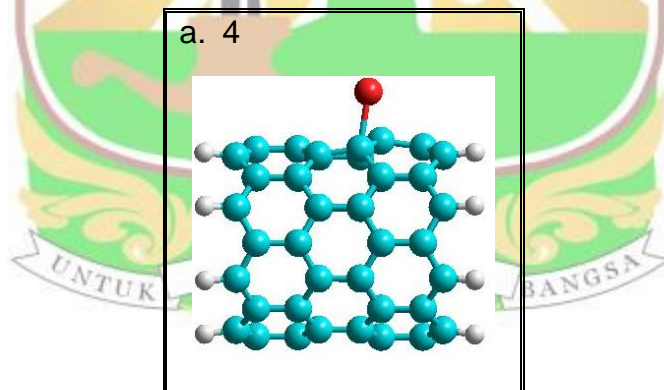
Hasil optimasi dari SWCNT *zigzag* (8,0) mempunyai:

- Energi total = -193579,5705459 (kkal/mol)
- Energi ikatan = -11061,9023859 (kkal/mol)
- $E_{HOMO}$  = -5,7 eV
- $E_{LUMO}$  = -3,6 eV
- $\Delta E$  = 2,1 eV

### 4.2 Penjatuhan Atom Ge pada Dinding SWCNT secara *On Top*

#### 4.2.1 Penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT

Penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT (8,0) posisi penjatuhan *on top*, pada umumnya atom Ge masih terikat pada dinding SWCNT (Lampiran 1). Pada SWCNT (8,0), atom Ge terikat secara kimia dengan atom C dari SWCNT (8,0) dengan nilai  $r_{C-Ge} = 1,9986 \text{ \AA}$ . (Gambar 4.1).

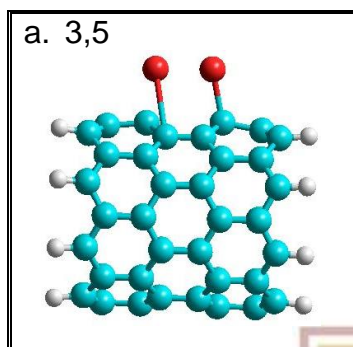


Gambar 4.1. Penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT (8,0)

Nilai  $\Delta E$  rata – rata yang didapatkan untuk penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT yaitu 2,274908 eV untuk SWCNT (8,0). Berdasarkan grafik pada (gambar 4.16) terlihat dengan penjatuhan 1 atom Ge menaikkan celah energi ( $\Delta E$ ) dari SWCNT (8,0). Nilai energi ikatan (BE) rata-rata dengan penjatuhan 1 atom yaitu -11099,785420 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata = -217,498765 KJ/mol (Lampiran 2). Tanda negatif menunjukkan bahwa adsorpsi merupakan proses eksotermis.

#### 4.2.2 Penjatuhan 2 atom Ge pada dinding SWCNT

Adsorpsi atom Ge pada SWCNT (8.0) posisi *on top* dengan penjatuhan 2 atom Ge menunjukkan bahwa atom C – Ge ada yang terikat secara kimia, dan fisika, pada dinding SWCNT (8.0), dimana 1 atom Ge terikat secara kimia dengan  $r_{C3-Ge} = 2,0107 \text{ \AA}$ , sedangkan untuk  $r_{C5-Ge} = 2,8084 \text{ \AA}$  terikat secara fisika (Gambar 4.2).

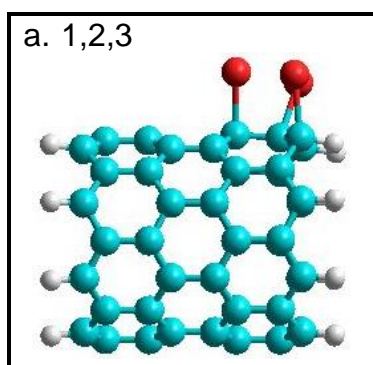


Gambar 4.2. Penjatuhan 2 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata – rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 2 atom Ge pada dinding SWCNT yaitu 3,116560 eV. Dapat dilihat pada grafik (Gambar 4.16) terjadinya kenaikan  $\Delta E$  rata-rata molekul SWCNT (8.0). Hal ini disebabkan karena penjatuhan 2 atom Ge pada beberapa posisi mengakibatkan adanya struktur SWCNT yang berubah sehingga berpengaruh terhadap nilai  $\Delta E$ . Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul SWCNT (8.0) yaitu -11195,94108 kkal/mol. Berdasarkan perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) posisi *on top* = -621,35253 KJ/mol (Lampiran 2). Pada penelitian ini diperoleh  $E_{ads}$  semakin besar dengan peningkatan jumlah atom Ge yang dijatuhkan.

#### 4.2.3 Penjatuhan 3 atom Ge pada dinding SWCNT

Atom Ge yang dijatuhkan pada dinding SWCNT (8.0) dengan penjatuhan 3 atom diperoleh semua ikatan C – Ge terikat secara kimia. Pada SWCNT (8.0) diperoleh C - Ge yang terikat secara kimia yaitu  $r_{C1-Ge} = 2,0473 \text{ \AA}$ ,  $r_{C2-Ge} = 2,1015 \text{ \AA}$ , dan  $r_{C3-Ge} = 2,089 \text{ \AA}$ . (Gambar 4.3).

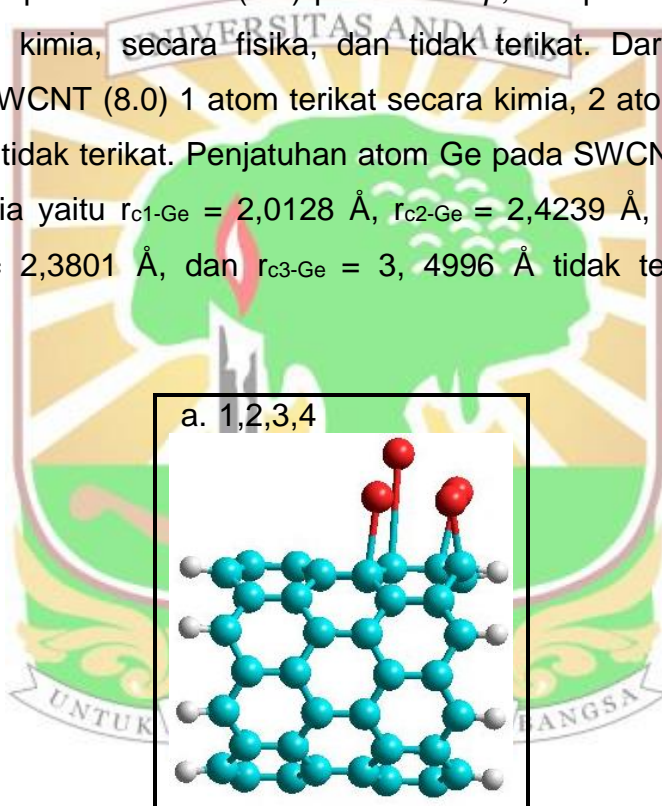


Gambar 4.3. Penjatuhan 3 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata molekul dengan penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT (8.0) terjadi kenaikan dari nilai SWCNT tanpa penjatuhan atom Ge.  $\Delta E$  rata-rata molekul SWCNT (8.0) posisi *on top* = 3,545686 eV. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11294,49670 kkal/mol. Semakin besar nilai BE rata-rata maka atom Ge makin terikat kuat pada SWCNT. Sedangkan untuk energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) = -1035,28614 KJ/mol (Lampiran 2).  $E_{ads}$  semakin besar dengan bertambahnya jumlah atom Ge yang dijatuhkan. Selain itu  $E_{ads}$  juga berbanding lurus dengan energi ikatan.

#### 4.2.4 Penjatuhan 4 atom Ge pada dinding SWCNT

Penjatuhan 4 atom pada SWCNT (8.0) posisi *on top*, didapatkan hasil bahwa atom Ge terikat secara kimia, secara fisika, dan tidak terikat. Dari 4 atom Ge yang dijatuhkan pada SWCNT (8.0) 1 atom terikat secara kimia, 2 atom Ge terikat secara fisika, dan 1 atom tidak terikat. Penjatuhan atom Ge pada SWCNT untuk C-Ge yang terikat secara kimia yaitu  $r_{c1-Ge} = 2,0128 \text{ \AA}$ ,  $r_{c2-Ge} = 2,4239 \text{ \AA}$ , yang terikat secara fisika yaitu  $r_{c4-Ge} = 2,3801 \text{ \AA}$ , dan  $r_{c3-Ge} = 3,4996 \text{ \AA}$  tidak terikat atau desorpsi (Gambar 4.4).



Gambar 4.4. Penjatuhan 4 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata molekul dengan penjatuhan 4 atom Ge pada SWCNT (8.0) yaitu = 3,491063 eV. Nilai  $\Delta E$  ini mengalami kenaikan, dimana setiap penjatuhan atom pada posisi tertentu akan menghasilkan sifat elektronik yang berbeda karena perubahan struktur yang terjadi setelah dilakukan optimasi. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata yaitu -11366,73447 kkal/mol (Lampiran 2). Dari perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) = -1338,68476 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.2.5 Penjatuhan 5 atom Ge pada dinding SWCNT

Penjatuhan atom Ge yang dijatuhkan sebanyak 5 atom pada SWCNT (8.0) di dapatkan hasil bahwa atom dapat terikat secara kimia, secara fisika, dan tidak terikat. Dimana 2 atom Ge terikat secara kimia, 1 atom terikat secara fisika dan 2 atom tidak terikat (desorpsi) dengan atom C pada SWCNT (8.0) untuk molekul yang terikat secara kimia  $r_{c1-ge} = 1,9883 \text{ \AA}$ ,  $r_{c8-ge} = 1,9883 \text{ \AA}$ , sedangkan yang terikat secara fisika  $r_{c2-ge} = 2,6144 \text{ \AA}$ , dan yang tidak terikat (desorpsi)  $r_{c3-ge} = 3,4373 \text{ \AA}$ ,  $r_{c4-ge} = 3,6063 \text{ \AA}$  (Gambar 4.5).



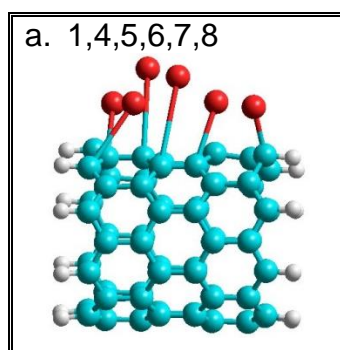
Gambar 4.5. Penjatuhan 5 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata molekul dengan penjatuhan 5 atom Ge diperoleh yaitu = 3,455487 eV. Sedangkan nilai BE dan  $E_{ads}$  rata-rata molekul pada SWCNT (8.0) posisi *on top* mengalami kenaikan, dimana  $E_{ads}$  semakin besar dengan peningkatan jumlah atom Ge yang dijatuhkan sehingga  $E_{ads}$  berbanding lurus dengan energi ikatan.

#### 4.2.6 Penjatuhan 6 atom Ge pada dinding SWCNT

Optimasi penjatuhan atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) dengan penjatuhan 6 atom Ge pada posisi tertentu, maka diperoleh C – Ge ada yang terikat secara kimia, secara fisika, dan ada yang tidak terikat (desorpsi), yang terikat secara kimia yaitu  $r_{c1-ge} = 2,0244 \text{ \AA}$ , yang terikat secara fisika ada 2 atom  $r_{c4-ge} = 2,8278 \text{ \AA}$ ,  $r_{c7-ge} = 2,7081 \text{ \AA}$ , dan yang tidak terikat (desorpsi) yaitu sebanyak 3 atom  $r_{c5-ge} = 4,0373 \text{ \AA}$ ,  $r_{c6-ge} = 4,1112 \text{ \AA}$ , dan  $r_{c8-ge} = 3,2075 \text{ \AA}$  (Gambar 4.6).



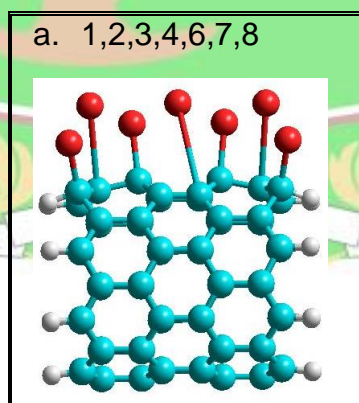


Gambar 4.6. Penjatuhan 6 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata dengan penjatuhan 6 atom Ge menunjukkan hasil  $\Delta E$  rata-rata SWCNT (8.0) yaitu = 3,459701 eV. Sedangkan nilai BE rata-rata yaitu -11538,25497 kkal/mol, pada energi adsorpsi diperoleh  $E_{\text{ads}}$  rata-rata sebesar -2059,07088 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.2.7 Penjatuhan 7 atom Ge pada dinding SWCNT

Penjatuhan 7 atom Ge pada SWCNT (8.0) menunjukkan hal yang hampir sama dengan penjatuhan yang lain bahwa atom C – Ge ada yang terikat secara kimia dan ada yang tidak terikat (desorpsi). Pada SWCNT (8.0) penjatuhan 7 atom Ge pada posisi tertentu, 4 atom Ge terikat secara kimia dengan  $r_{\text{C1-ge}} = 1,944 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C3-ge}} = 2,0641 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C6-ge}} = 2,064 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C8-ge}} = 1,944 \text{ \AA}$  sedangkan untuk  $r_{\text{C2-ge}} = 3,1883 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C4-ge}} = 4,0316 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C7-ge}} = 3,1384 \text{ \AA}$  tidak terikat atau desorpsi (Gambar 4.7).



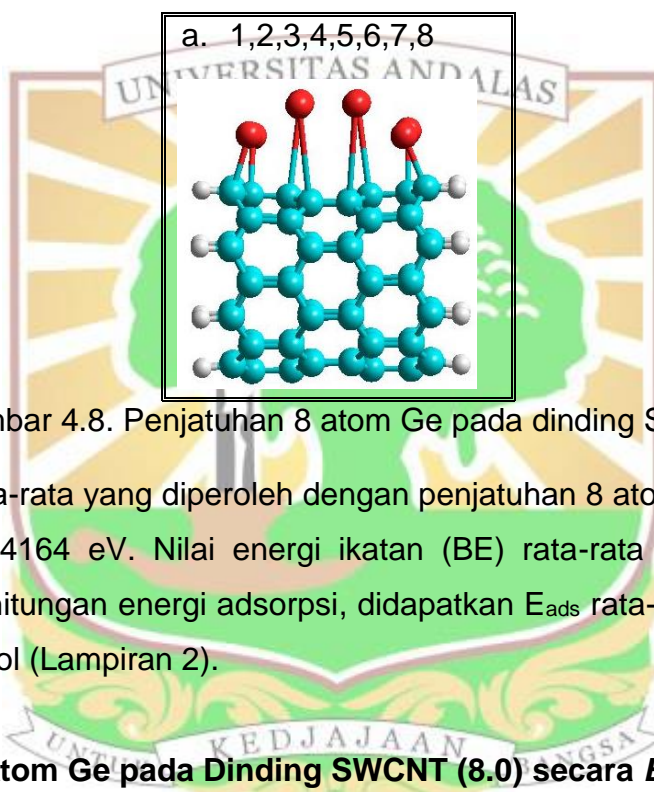
Gambar 4.7. Penjatuhan 7 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 7 atom Ge pada SWCNT yaitu 3,690787 eV. Nilai  $\Delta E$  pada penjatuhan 7 atom Ge ini mengalami kenaikan dapat dilihat pada grafik (Gambar 4.16). Hal ini di sebabkan karena penjatuhan 7 atom Ge pada posisi tertentu mengakibatkan adanya struktur SWCNT yang berubah sehingga berpengaruh terhadap nilai  $\Delta E$ . Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11657,1233 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, di

dapatkan  $E_{\text{ads}}$  rata-rata SWCNT (8.0) yaitu -2558,31786 KJ/mol (Lampiran 2). Semakin banyak atom Ge yang dijatuhkan maka  $E_{\text{ads}}$  semakin besar.

#### 4.2.8 Penjatuhan 8 atom Ge pada dinding SWCNT

Penjatuhan 8 atom Ge pada SWCNT (8.0) pada umumnya atom Ge masih terikat pada dinding SWCNT (8.0). Atom C – Ge ada yang terikat secara kimia, secara fisika, dan ada yang tidak terikat (desorpsi). Tiga atom Ge terikat secara kimia dengan  $r_{\text{C1-ge}} = 2,0354 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C7-ge}} = 2,3402 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C8-ge}} = 2,1637 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C2-ge}} = 2,4408 \text{ \AA}$  untuk atom Ge yang terikat secara fisika, sedangkan untuk  $r_{\text{C3-ge}} = 3,5131 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C4-ge}} = 3,5301 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C5-ge}} = 3,5156 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{C7-ge}} = 3,5191 \text{ \AA}$  tidak terikat atau desorpsi (Gambar 4.8).



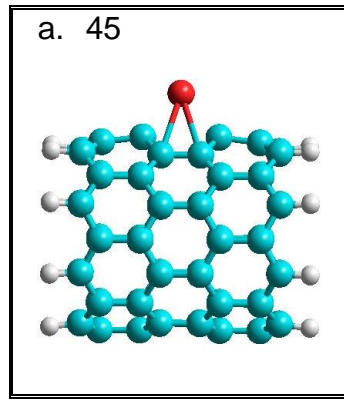
Gambar 4.8. Penjatuhan 8 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata yang diperoleh dengan penjatuhan 8 atom Ge pada SWCNT (8.0) yaitu = 4,214164 eV. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata yaitu -11927,46290 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{\text{ads}}$  rata-rata SWCNT (8.0) = -3693,74418 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.3. Penjatuhan Atom Ge pada Dinding SWCNT (8.0) secara *Bridge*

##### 4.3.1 Penjatuhan 1 atom pada dinding SWCNT (8.0)

Optimasi penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) pada posisi *bridge* menunjukkan bahwa atom C - Ge ada yang terikat secara fisika pada SWCNT (8.0) penjatuhan 1 atom Ge pada posisi tertentu 2 atom terikat secara fisika yaitu  $r_{\text{C4-ge}} = 2,592 \text{ \AA}$  (Gambar 4.9).

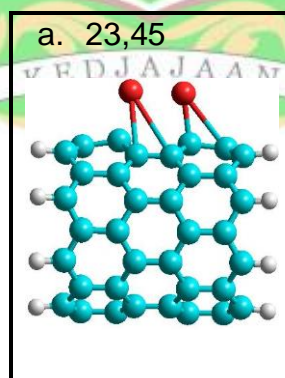


Gambar 4.9. Penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata yang di dapatkan pada penjatuhan 1 atom Ge pada SWCNT yaitu 2,053137 eV. Nilai ini terjadi penurunan dibandingkan dengan nilai  $\Delta E$  SWCNT tanpa penjatuhan, sehingga dengan penjatuhan 1 atom Ge ini dapat meningkatkan hantaran listriknya. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11058,36324 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, di dapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) yaitu -43,5256168 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.3.2 Penjatuhan 2 atom pada dinding SWCNT (8.0)

Penjatuhan 2 atom Ge pada SWCNT (8.0) posisi *bridge* menunjukkan hal yang hampir sama dengan penjatuhan sebelumnya. Pada SWCNT (8.0) di dapatkan hasil bahwa atom dapat terikat secara kimia, fisika dan tidak terikat. Atom Ge terikat secara fisika  $r_{c-ge} = \pm 2,79275 \text{ \AA}$ , Untuk atom C yang terikat pada atom Ge secara kimia  $r_{c-ge} = 2,0274 \text{ \AA}$ , yang tidak terikat yaitu  $r_{c-ge} = 3,2807 \text{ \AA}$  (gambar 4.10).



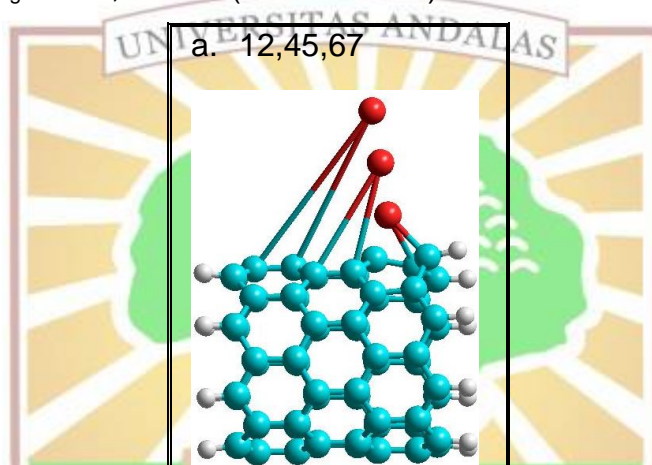
Gambar 4.10. Penjatuhan 2 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 2 atom Ge pada SWCNT yaitu 2,88342 eV. Nilai  $\Delta E$  pada penjatuhan 2 atom Ge ini mengalami kenaikan dapat dilihat pada grafik (gambar 4.16). Hal ini di sebabkan karena penjatuhan 2 atom Ge pada posisi tertentu mengakibatkan adanya struktur SWCNT yang berubah sehingga berpengaruh terhadap nilai  $\Delta E$ .

Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11190,11010 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, di dapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) yaitu -596,8624323 KJ/mol (Lampiran 2). Pada penelitian ini di peroleh  $E_{ads}$  yang semakin besar dengan peningkatan jumlah atom Ge yang dijatuhkan.

#### 4.3.3 Penjatuhan 3 atom pada dinding SWCNT (8.0)

Penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT (8.0) menunjukkan hal yang hampir sama dengan penjatuhan sebelumnya. Pada SWCNT (8.0) didapatkan hasil bahwa atom Ge dapat terikat secara kimia, fisika dan tidak terikat (desorpsi). Dimana atom Ge terikat secara kimia  $r_{c-ge} = 2,0524 \text{ \AA}$ , terikat secara fisika  $r_{c-ge} = 2,3843$  dan yang tidak terikat (desorpsi)  $r_{c-ge} = \pm 5,6588 \text{ \AA}$  (Gambar 4.11).

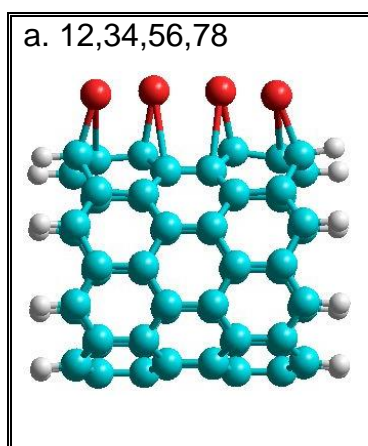


Gambar 4.11. Penjatuhan 3 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT yaitu 3,849798 eV. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11321,20587 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, di dapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) yaitu -1147,464647 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.3.4 Penjatuhan 4 atom pada dinding SWCNT (8.0)

Penjatuhan 4 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) menunjukkan hal yang berbeda dengan penjatuhan sebelumnya. Pada SWCNT (8.0) Penjatuhan 4 atom Ge terikat secara kimia dan terikat secara fisika dimana panjang ikatan yang terikat secara kimia adalah  $r_{c-ge} = \pm 2,06505 \text{ \AA}$ , dan yang terikat secara fisika  $r_{c-ge} = \pm 2,650025 \text{ \AA}$ . (Gambar 4.12).



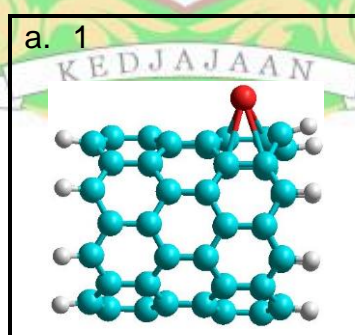
Gambar 4.12. Penjatuhan 4 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata-rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 4 atom Ge pada SWCNT yaitu 3,396731 eV. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11379,46843 kkal/mol. Nilai BE rata-rata ini mengalami peningkatan sehingga ikatan yang terjadi antara atom C-Ge semakin kuat. Dari perhitungan energi adsorpsi, di dapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) yaitu -1392,167406 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.4. Penjatuhan Atom Ge pada Dinding SWCNT (8.0) secara *hollow*

##### 4.4.1 Penjatuhan 1 atom pada dinding SWCNT (8.0)

Penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) posisi *hollow*, didapatkan hasil bahwa semua atom Ge terikat secara fisika. Atom Ge yang dijatuhkan pada dinding SWCNT atom terikat secara fisika dengan nilai  $r_{C-Ge} = \pm 2,576525 \text{ \AA}$  (Gambar 4.13).

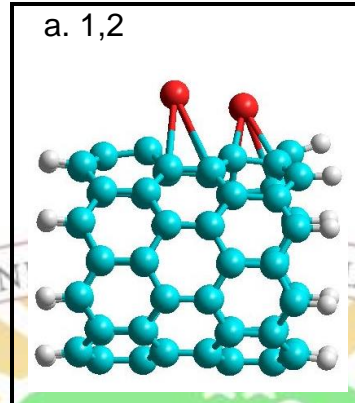


Gambar 4.13. Penjatuhan 1 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) *hollow*

Nilai  $\Delta E$  rata – rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 1 atom Ge pada permukaan dinding SWCNT yaitu 2,5111925 eV untuk SWCNT (8.0). Nilai energi ikatan (BE) rata-rata dengan penjatuhan 1 atom yaitu -11116,50072 kkal/mol, dari perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata sebesar = -287,703003 KJ/mol (Lampiran 2).

#### 4.4.2 Penjatuhan 2 atom pada dinding SWCNT (8.0)

Pada dinding SWCNT (8.0) posisi *hollow*, penjatuhan 2 atom Ge pada posisi tertentu menunjukkan bahwa atom C – Ge ada yang terikat secara kimia, fisika, dan tidak terikat (desorpsi). Atom Ge yang terikat secara kimia dengan  $r_{C-Ge} = 2,0282 \text{ \AA}$ , sedangkan untuk  $r_{C-Ge} = \pm 2,5054 \text{ \AA}$  terikat secara fisika, dan  $r_{C-Ge} = \pm 3,06698 \text{ \AA}$  tidak terikat atau desorpsi (Gambar 4.14).



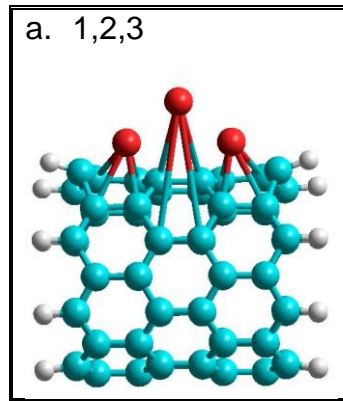
Gambar 4.14. Penjatuhan 2 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

Nilai  $\Delta E$  rata – rata yang di dapatkan untuk penjatuhan 2 atom Ge pada SWCNT yaitu 3,555081 eV untuk SWCNT (8.0) posisi *hollow*. Penjatuhan 2 atom Ge pada beberapa posisi mengakibatkan adanya struktur SWCNT yang berubah sehingga berpengaruh terhadap nilai  $\Delta E$ .

Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul SWCNT (8.0) *hollow* yaitu -11210,76041 kkal/mol. Dari perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) pada posisi *hollow* = -683,593701 KJ/mol (Lampiran 2). Pada penelitian ini diperoleh  $E_{ads}$  semakin besar dengan peningkatan jumlah atom Ge yang dijatuhkan sehingga  $E_{ads}$  berbanding lurus dengan energi ikatan.

#### 4.4.3 Penjatuhan 3 atom Ge pada dinding SWCNT

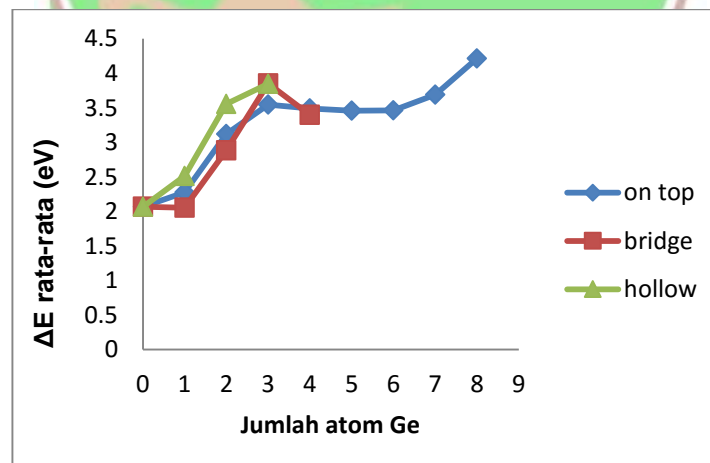
Penjatuhan 3 atom Ge pada SWCNT (8.0) posisi *hollow* menunjukkan hal yang hampir sama dengan penjatuhan 2 atom Ge. Dimana setelah optimasi atom germanium terikat secara kimia, secara fisika, dan tidak terikat (desorpsi). Panjang ikatan secara kimia yaitu  $r_{C-Ge} = 2,177 \text{ \AA}$ ,  $r_{C-Ge} = \pm 2,6529 \text{ \AA}$ , yang terikat secara fisika, dan  $r_{C-Ge} = \pm 3,6788 \text{ \AA}$  untuk C-Ge yang tidak terikat (Gambar 4.15).



Gambar 4.15. Penjatuhan 3 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)

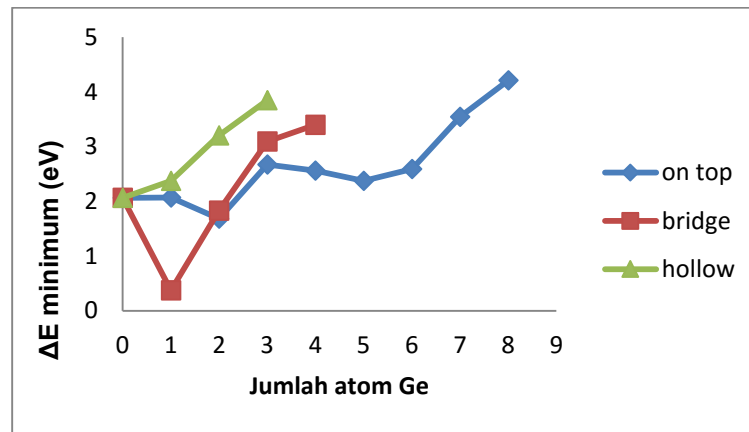
Nilai  $\Delta E$  rata-rata molekul SWCNT (8.0) posisi *hollow* = 3,847688 eV. Nilai BE rata-rata molekul SWCNT yang dijatuhkan 3 atom mengalami kenaikan dari penjatuhan sebelumnya. Semakin besar nilai BE rata-rata maka atom Ge makin terikat kuat pada SWCNT. Tetapi hal ini tidak mengalami kenaikan secara signifikan. Nilai energi ikatan (BE) rata-rata molekul yaitu -11327,52896 kkal/mol. Pada penelitian ini diperoleh hal yang sama dengan penjatuhan 2 atom Ge dimana  $E_{ads}$  semakin besar dengan bertambahnya jumlah atom Ge yang dijatuhkan. Dari perhitungan energi adsorpsi, didapatkan  $E_{ads}$  rata-rata SWCNT (8.0) = -1174,021632 KJ/mol. (Lampiran 2).

#### 4.5 Nilai celah energi ( $\Delta E$ ) penjatuhan atom Ge pada dinding SWCNT (8.0).



Gambar 4.16. Grafik  $\Delta E$  rata-rata posisi penjatuhan *on top*, *bridge* dan *hollow*

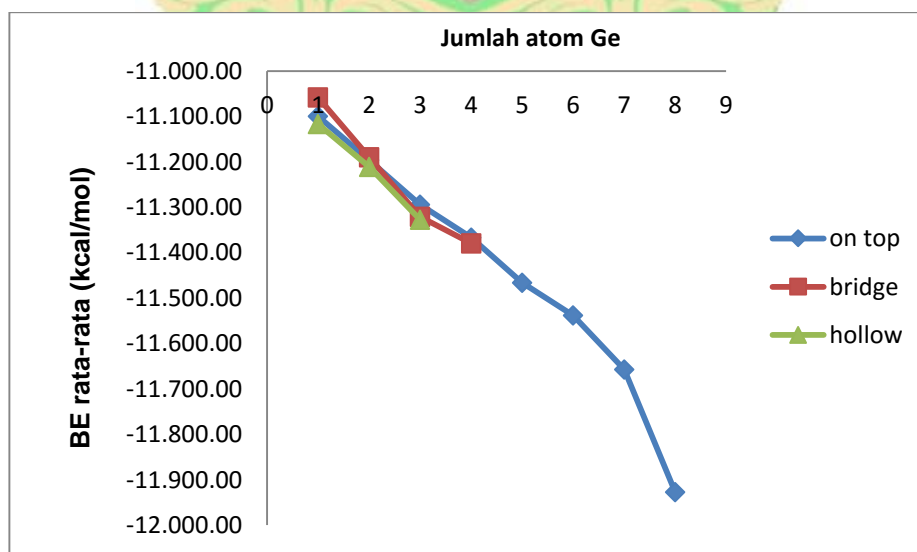
Berdasarkan Gambar 4.16 terlihat bahwa dengan adanya penambahan atom Ge ternyata menaikkan nilai  $\Delta E$  dari SWCNT, hal ini disebabkan karena penjatuhan atom Ge menyebabkan SWCNT mengalami perubahan struktur pada ujung tabungnya.



Gambar 4.17. Grafik  $\Delta E$  minimum posisi penjatuhan *on top*, *bridge*, dan *hollow*

Berdasarkan Gambar 4.17 terlihat bahwa penjatuhan atom Ge pada posisi tertentu dapat menurunkan  $\Delta E$  SWCNT. Nilai  $\Delta E$  minimum pada *posisi on top* diperoleh pada penjatuhan 2 atom Ge pada posisi  $C_3$  dan  $C_5$  dengan nilai  $\Delta E$  sebesar 1,687036 eV. Berbeda dengan penjatuhan pada *posisi bridge* dimana nilai  $\Delta E$  minimum diperoleh pada penjatuhan 1 atom Ge pada posisi antara  $C_4$  dan  $C_5$  dengan nilai  $\Delta E$  yang diperoleh yaitu 0,373056 eV. Dapat dilihat bahwa dengan penjatuhan atom Ge pada *posisi on top* dan *bridge* dapat menurunkan nilai  $\Delta E$  dibandingkan tanpa adanya penjatuhan atom Ge, sehingga sifat listrik dari adsorpsi atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) mengalami peningkatan. Sedangkan pada *posisi penjatuhan hollow* menyebabkan meningkatnya nilai  $\Delta E$ , karena penjatuhan pada *posisi hollow* menyebabkan berubahnya struktur SWCNT (Lampiran 1).

#### 4.6 Nilai *Binding Energy* (BE) penjatuhan atom Ge pada dinding SWCNT (8.0).

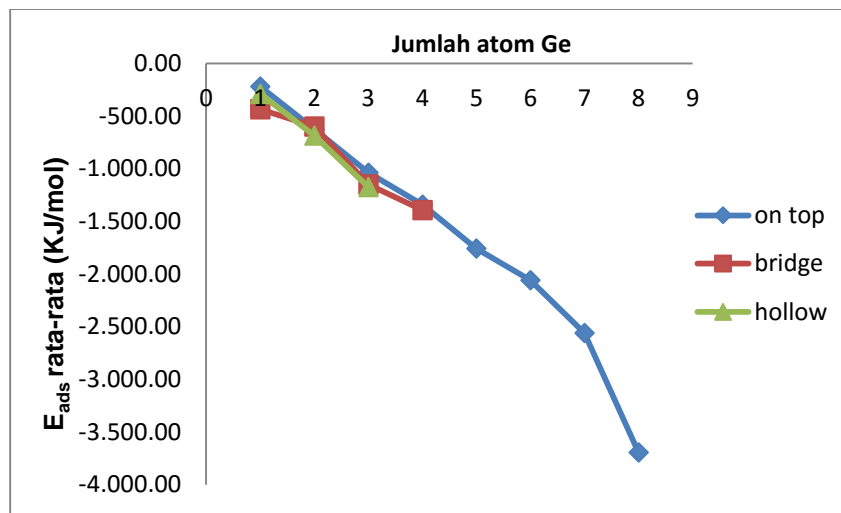


Gambar 4.18. Grafik BE rata-rata posisi penjatuhan *on top*, *bridge*, dan *hollow*  
Ket : tanda (-) menunjukkan ikatan terjadi secara eksoterm

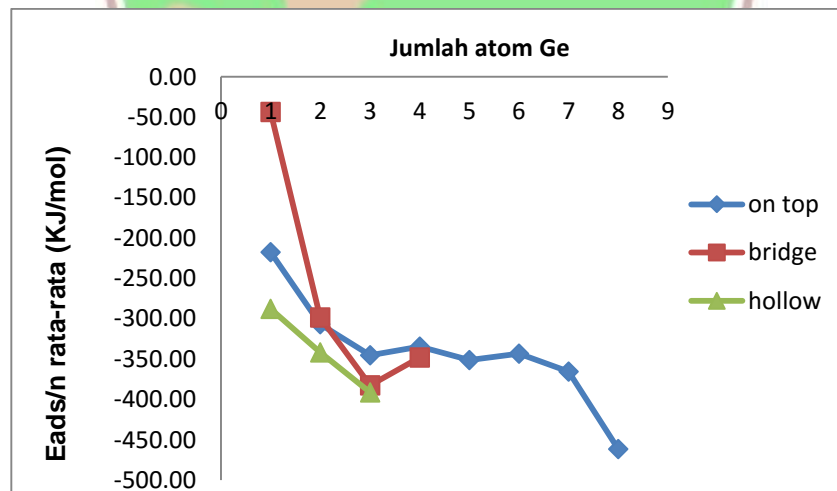


Berdasarkan gambar 4.18 terlihat nilai BE rata-rata mengalami kenaikan setiap penambahan jumlah atom yang dijatuhkan, ini menunjukkan semakin besar nilai BE rata-rata maka atom-atom Ge semakin terikat kuat pada permukaan dinding SWCNT (8.0). Akibat daya adsorpsi atom Ge terhadap permukaan dinding SWCNT semakin besar. Semakin banyak atom Ge yang dijatuhkan pada permukaan dinding SWCNT, maka atom-atom tersebut semakin terikat kuat dan sangat sulit lepas dari SWCNT (8.0).

#### 4.7 Nilai energi adsorpsi ( $E_{ads}$ ) penjatuhan atom Ge pada dinding SWCNT (8.0).



Gambar 4.19. Grafik  $E_{ads}$  rata-rata posisi penjatuhan *on top*, *bridge*, dan *hollow*



Gambar 4.20. Grafik  $E_{ads}/n$  rata-rata posisi penjatuhan *on top*, *bridge*, dan *hollow*  
Ket : tanda (-) menunjukkan ikatan terjadi secara eksoterm

Berdasarkan Gambar 4.19 terlihat nilai  $E_{ads}$  rata-rata umumnya mengalami peningkatan. Diperoleh hal yang sama dengan teori dimana  $E_{ads}$  semakin besar dengan peningkatan jumlah atom Ge yang dijatuhkan yaitu  $E_{ads}$  berbanding lurus dengan energi ikatan. Berdasarkan Gambar 4.20 dari hasil optimasi menunjukkan bahwa  $E_{ads}$  rata-rata tiap atom mengalami peningkatan seiring bertambahnya jumlah

atom Ge yang dijatuhkan (Lampiran 3). Ini menunjukkan semakin banyak atom Ge yang dijatuhkan pada SWCNT maka daya ikat SWCNT per atom Ge semakin kuat, kecuali penjatuhan empat atom Ge pada posisi *bridge*, hal ini karena atom Ge yang dijatuhkan hanya satu posisi penjatuhan yaitu pada atom C nomor 12, 34, 56, 78.



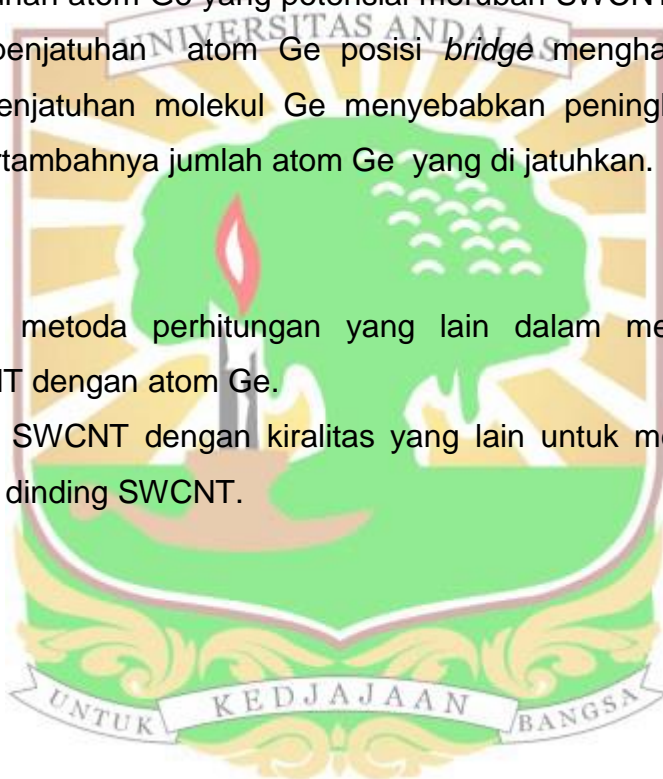
## V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang sudah dilakukan diketahui atom Ge yang di jatuhkan pada permukaan dinding SWCNT (8.0) mengalami interaksi secara kimia, fisika, dan terdesorpsi. Penjatuhan 1 - 8 atom Ge pada posisi tertentu dapat menurunkan celah energi ( $\Delta E$ ) SWCNT sehingga berpotensi mengubah SWCNT dari semikonduktor menjadi konduktor. Penjatuhan atom Ge pada SWCNT (8.0) posisi *on top*  $\Delta E$  berkisar antara 2,068201– 4,214164 eV, pada SWCNT (8.0) posisi *bridge* 0,373056 - 4,190527 eV, dan pada SWCNT (8.0) posisi *hollow* 2,374053 - 3,905996 eV . Posisi penjatuhan atom Ge yang potensial merubah SWCNT menjadi konduktor yaitu dengan 1 penjatuhan atom Ge posisi *bridge* menghasilkan  $\Delta E$  sebesar 0,373056 eV. Penjatuhan molekul Ge menyebabkan peningkatan BE dan  $E_{ads}$  seiring dengan bertambahnya jumlah atom Ge yang di jatuhkan.

### 5.2 Saran

1. Menggunakan metoda perhitungan yang lain dalam menentukan interaksi dinding SWCNT dengan atom Ge.
2. Menggunakan SWCNT dengan kiralitas yang lain untuk menentukan adsorpsi atom Ge pada dinding SWCNT.



## DAFTAR PUSTAKA

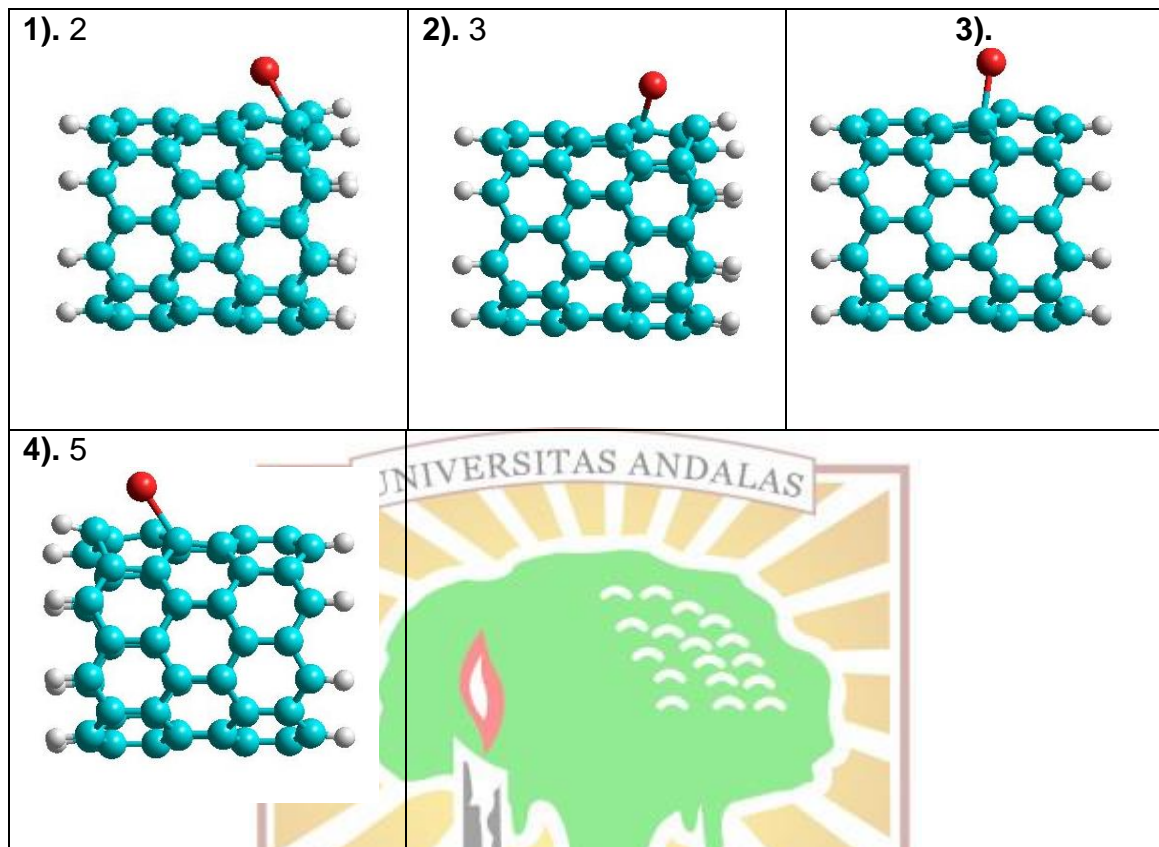
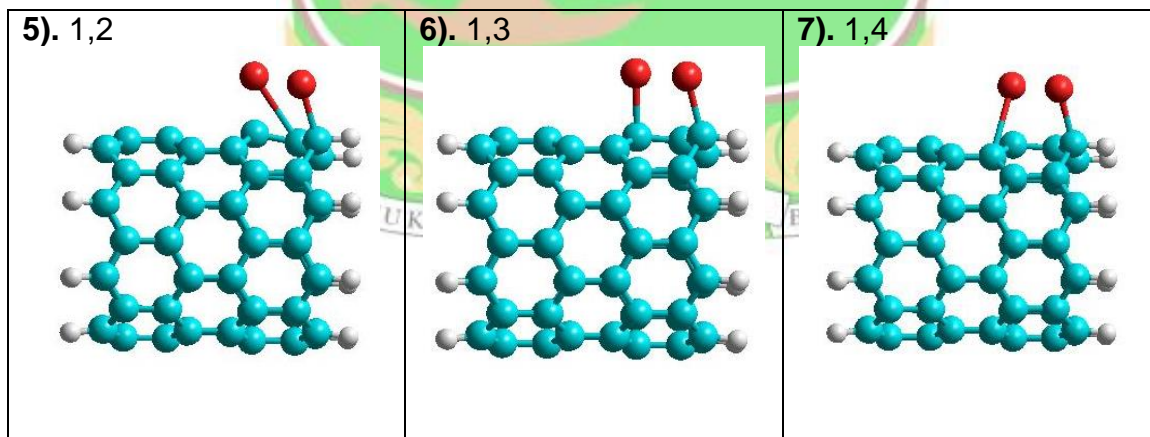
1. Rezvani, M.; Ganjib, D. M.; Bozorgi, J. S: Structural And Electronic Properties Of Metalloporphyrin (MP, M = Fe,Co And Zn) Adsorbed On Single Walled BNNT and SiCNT. *Applied Surface Science* 2015, 360, 69 – 76.
2. Feng, Xue.; Irie, S.; Witek, H.; Monokuma, K.; Vidic, R.; Borguet, E: Sensitivity of Ammonia Interaction with Single Walled Carbon Nanotube Bundles to the Presence Of defect Sites and functionalities. *Journal American Chemical Society* 2005, 127,10533 – 10536.
3. Latununuwe, A.; Setiawan, A.; Winata, T.; Sukirno: Efek Aharonov – Bohm Terhadap Sifat Elektronik Carbon Nanotube. *Indonesian Journal Of Chemical Science* 2008.
4. Li, D.; Luo, H.; Cai, J.; Chang, Y.; Shao, X.; ,Dong, C: First-principles Study of H, O, and N Adsorption on Metal Embedded Carbon Nanotubes. *Applied Surface Science* 2017, 403, 645 – 651.
5. Shahzad; Khan, M.D.; Shahid; Khan; Mohd: Computational Study of Hydrogen Adsorption on Potassium-Decorated Boron Nitride Nanotubes. *Department of Physics* 2012, 2 - 5.
6. Ashrafi, F.; Ghasemi, A. S.: Optimation Of Carbon Nanotube For Nitrogen Gas Adsorption. *Journal of applied science* 2010, 2, 6, 547- 551
7. Joselevich, E: Elektronik Structure and Chemical Reactivity of Carbon Nanotube. *Chem Phys Chem* 2004, 5, 619 – 624.
8. Pranowo, H.D: *Pengantar Kimia Komputasi*; Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria: Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gajah Mada, Yogyakarta, 2003.
9. Nur, A: Pertumbuhan Carbon Nanotube Metoda Chemical Vapor Deposition Sebagai Fungsi Waktu. *Jurusan Teknik Kimia Universitas Sebelas Maret Surakarta* 2007, 6, 75-80.
10. Fan, X.; Wang, C.; Wang, P.; Hou, J.; Qian, J: Effects of Carbon Nanotubes on Physicochemical Properties and Sulfamethoxazole Adsorption of Sediments With or Without Aging Processes. *Chemical Engineering Journal* 2016, 310, 317 – 327.
11. Andrews, R.; Jacques, D.; Rao, A.M.; Derbyshire, F.; Qian, D.; Fan, X.; Dickey, E.C.; and Chen, J: Continuous Production of Aligned Carbon Nanotubes A step Closer to Commercial Realization. *Chemical Physsics Letters* 1999, 303, 467 – 474.
12. Mittala, M.; Kumar, A: Carbon Nanotube (CNT) Gas Sensors for Emissions from Fossil Fuel Burning. *Sensors and Actuators B: Chemical* 2014, 203, 349 – 362.
13. Saito, R.; Dresselhaus, G.; Dresselhaus, M.S: *Physical Properties of Carbon Nanotube*; Imperial College Press; London, 1999.
14. Holinter, P: *Nanotubes*, University of Montreal, Canada: CMP Scientiifica, 2003.
15. Marliere, C.; Poncharal, P.; Vaccarini, L: Effect of Gas Adsorption on The Electrical Properties Single Walled Carbon Nanotube Mats. *Material Research Society Symposium Proceedings* 2000, 593, 1-5.
16. Barghi, S.H.; Tsotsis, T.T.; Sahimi, M: Chemisorption, Physisorption and Hysteresis During Hydrogen Storage in Carbon Nanotubes. *Science Direct* 2013, 39, 1390 – 1397.
17. Harker, C.J: Numerically Solving the Klein-Gordon Equation, *Thesis*, Marlboro College: USA, 2002.
18. Adams, J.H: *Germanium and Germanium Compound*; in Metals handbook (10th ed) : Metals Park, Ohio, ASM Internasional, 1990, 2, 733-738.

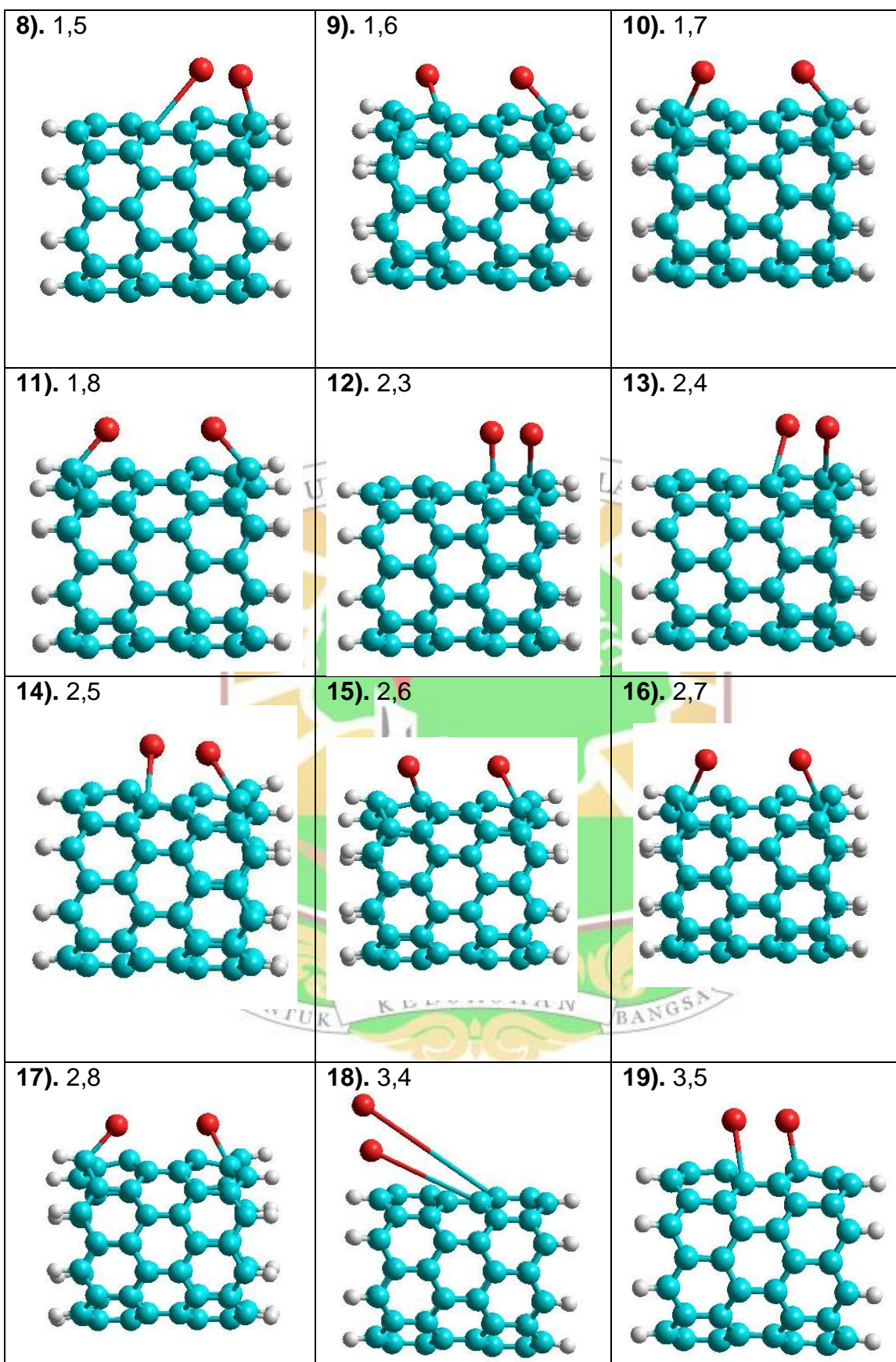
19. Brown, R.D.; Jr: *Germanium*: US, Geological Survey Mineral Commodity Summaries 2002, P, 70-71.
20. Barbagiovanni, E.E.; Lockwood, D.J.; Rowell, N.L.; Filho, C.; R.N: Role of Quantum Confinement In Luminescence Efficiency of Group IV Nanostructures. *Journal of Applied Physics* 2014, 155.
21. Zhang, J.J.; and Ni. J: *Germanium*, Nankai University: Tianjin China, 2015.
22. Legesse, M.; Giorgos, F.; Nolan, M: Modifying the Band Gap and Optical Properties of Germanium Nanowires By Surface Termination. *Applied Surface Science* 2016, 396, 1155–1163.
23. Kim, S.; Walker, B.; Yi, P. S.; Choi, H.; Seo-Jin, K.; Jeong, J.; Yun, M. H; Lee, J. C.; Kim, D. S.; Kim, J. Y: Germanium. *Nanoscale*, 2014, 6, 10156-10160.
24. Yunus; Asyari, D: *Sifat Listrik*, Universitas Darma Persada 2010, 72-73.
25. Prianto, B: *Pemodelan Kimia Komputasi*, Bidang Material Dirgantara Lapan, 2013.
26. Kasmui: *Terjemahan Hyperchem rilis 7*, Universitas Negeri Semarang, 2013.

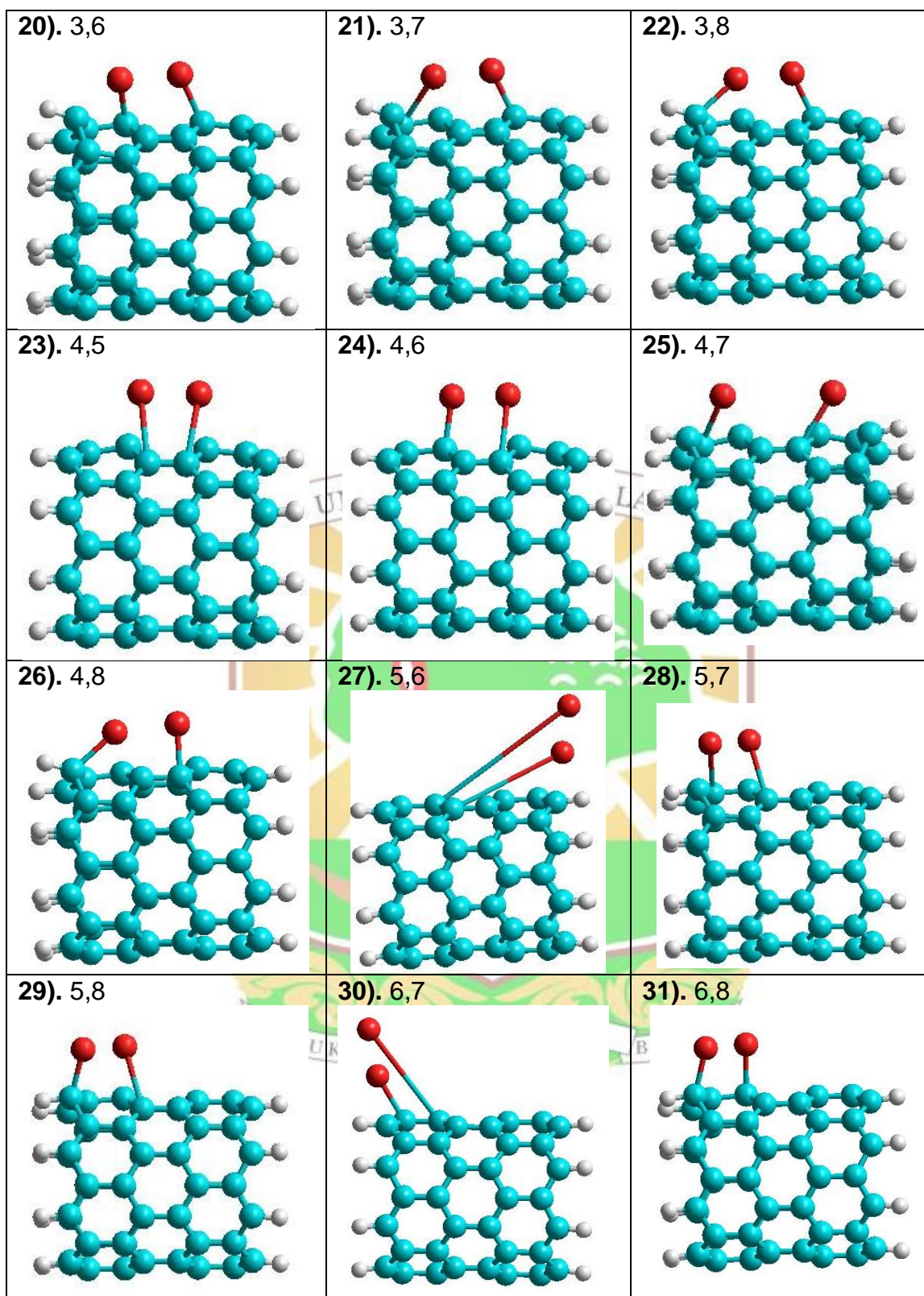


**Lampiran 1. Struktur optimasi penjatuhan 1-8 atom Ge**

1. Gambar penjatuhan 1,2,3,4,5,6,7,8 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) *on top*  
**A. 1 Atom**

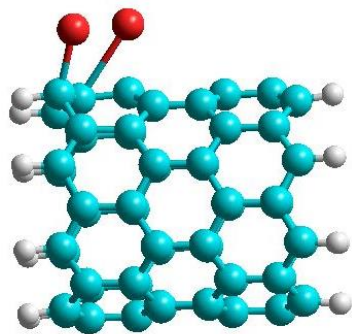
**B. 2 Atom**





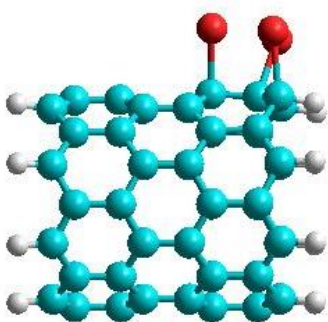


32). 7,8

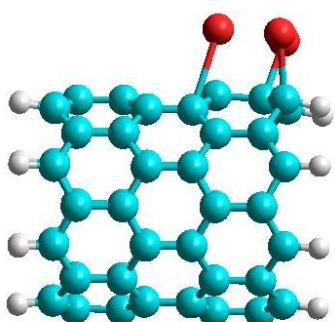


## C. 3 Atom

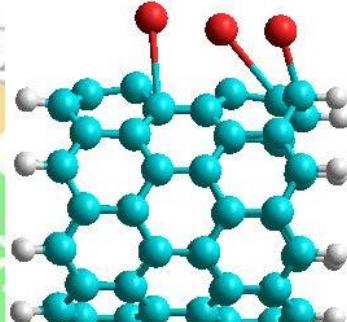
33). 1,2,3



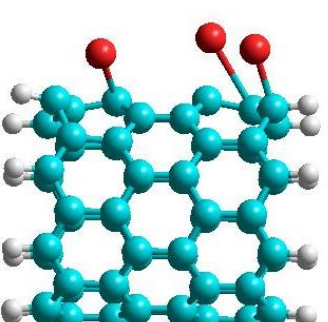
34). 1,2,4



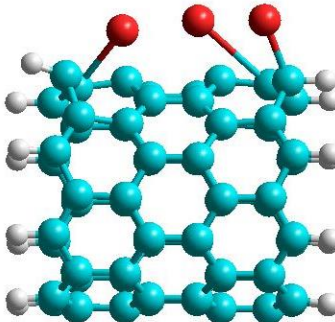
35). 1,2,5



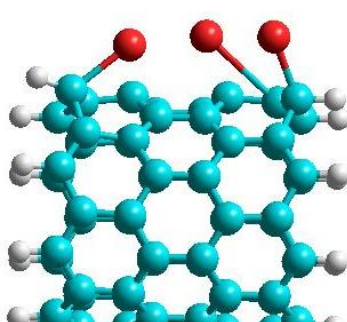
36). 1,2,6

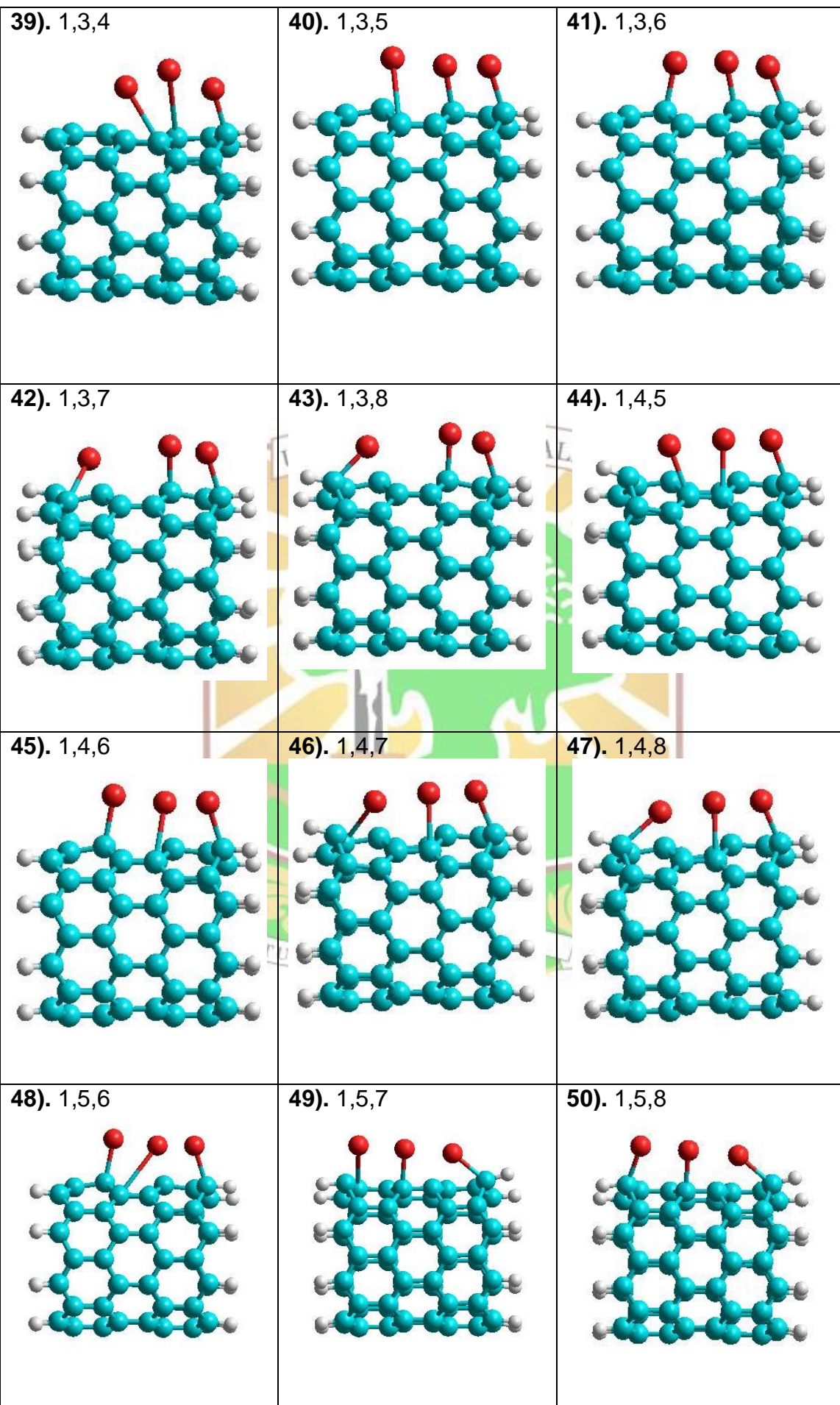


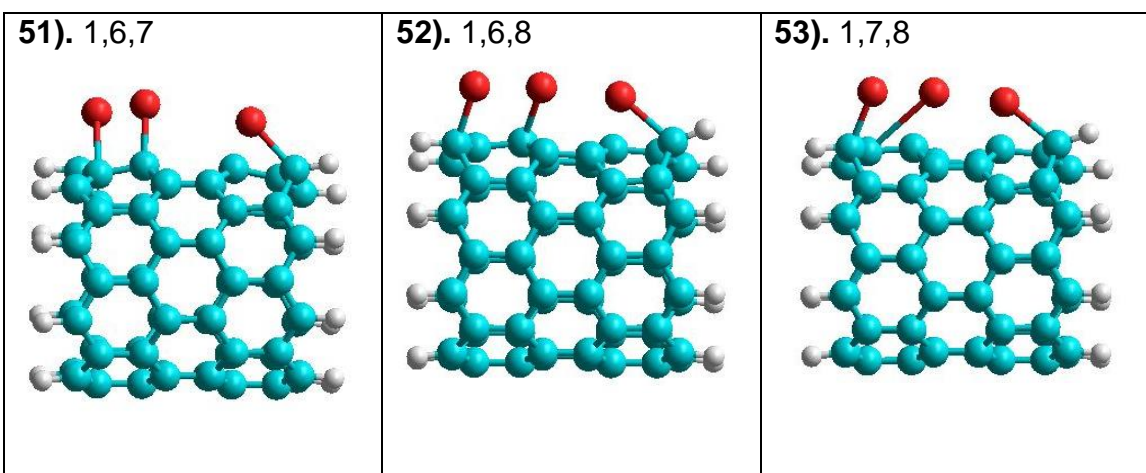
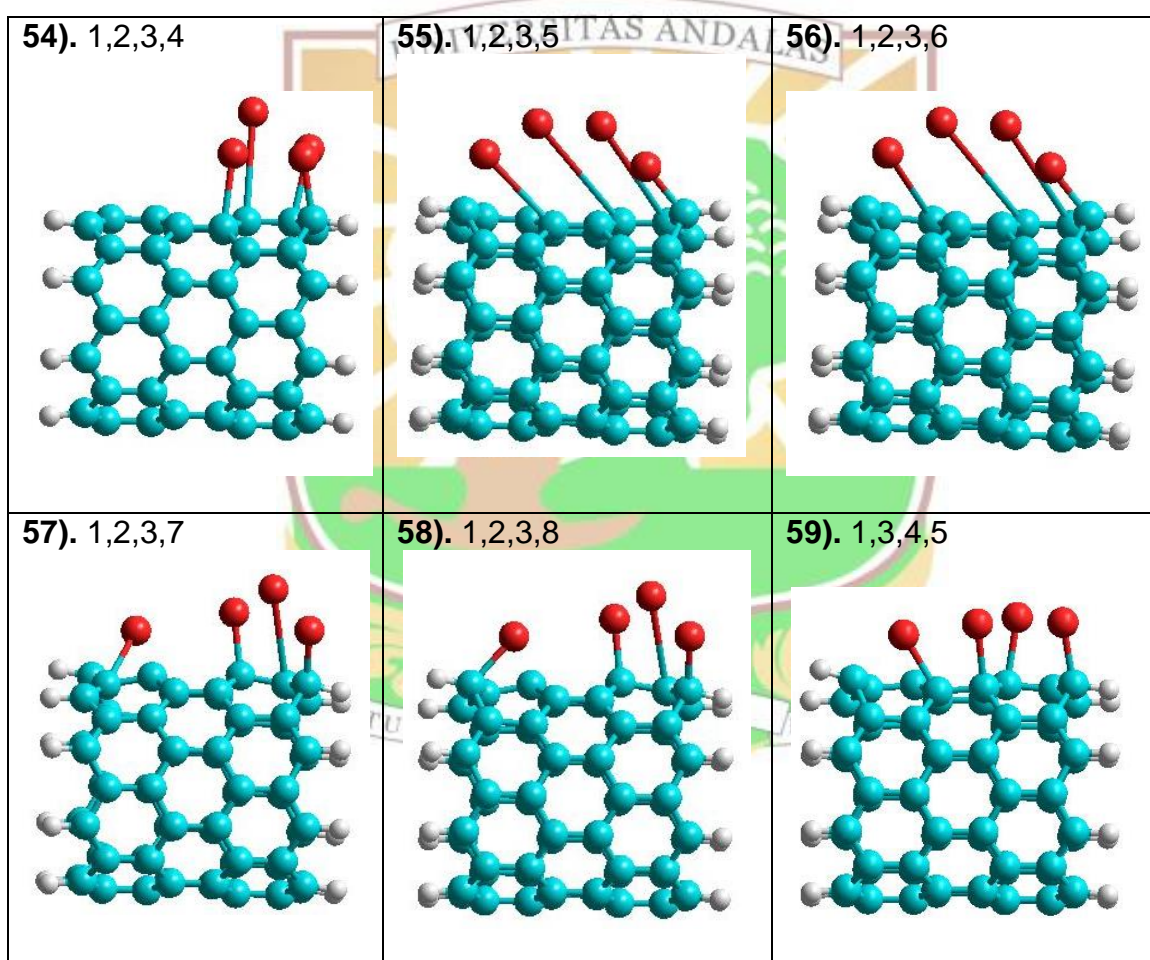
37). 1,2,7

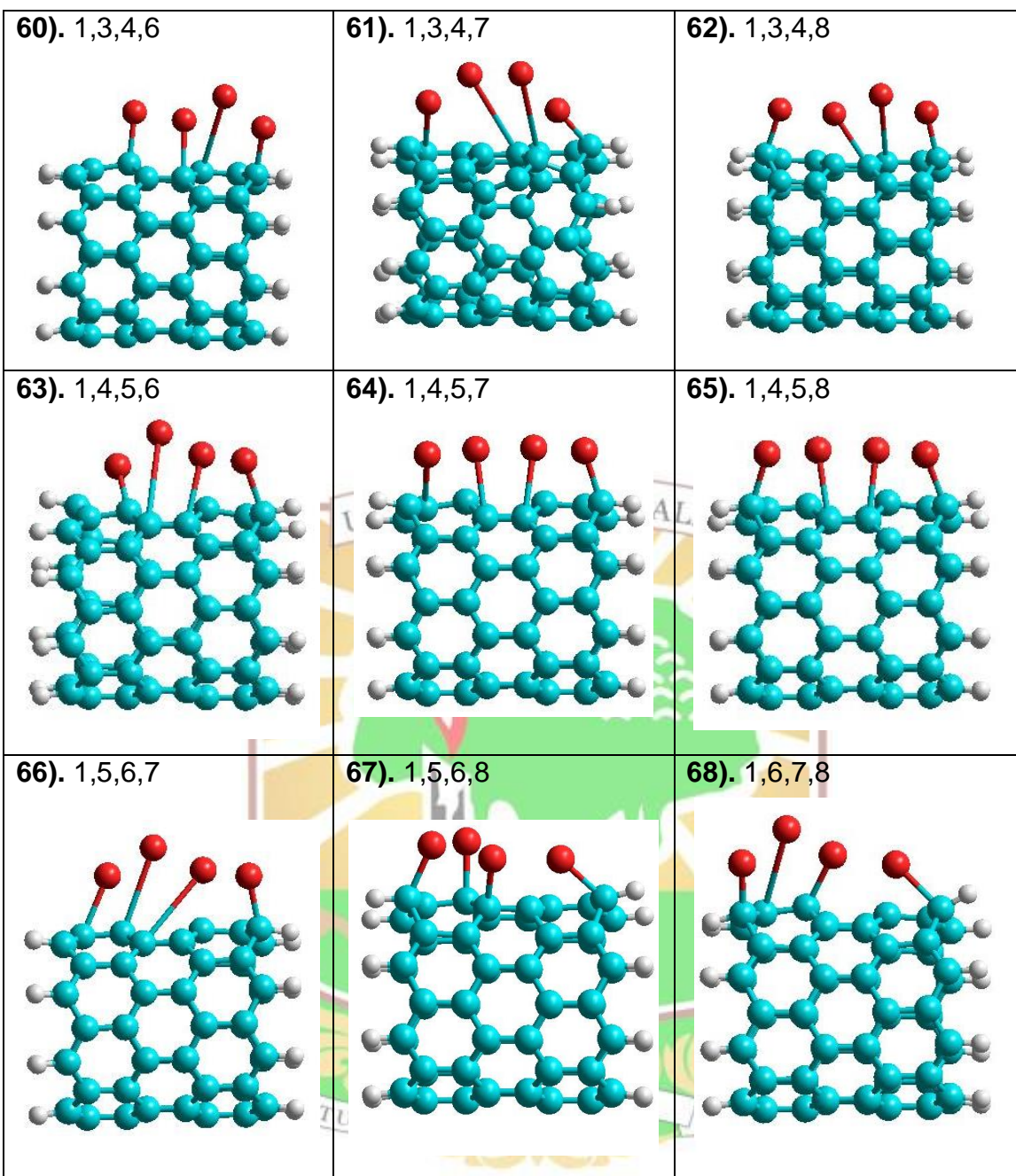


38). 1,2,8

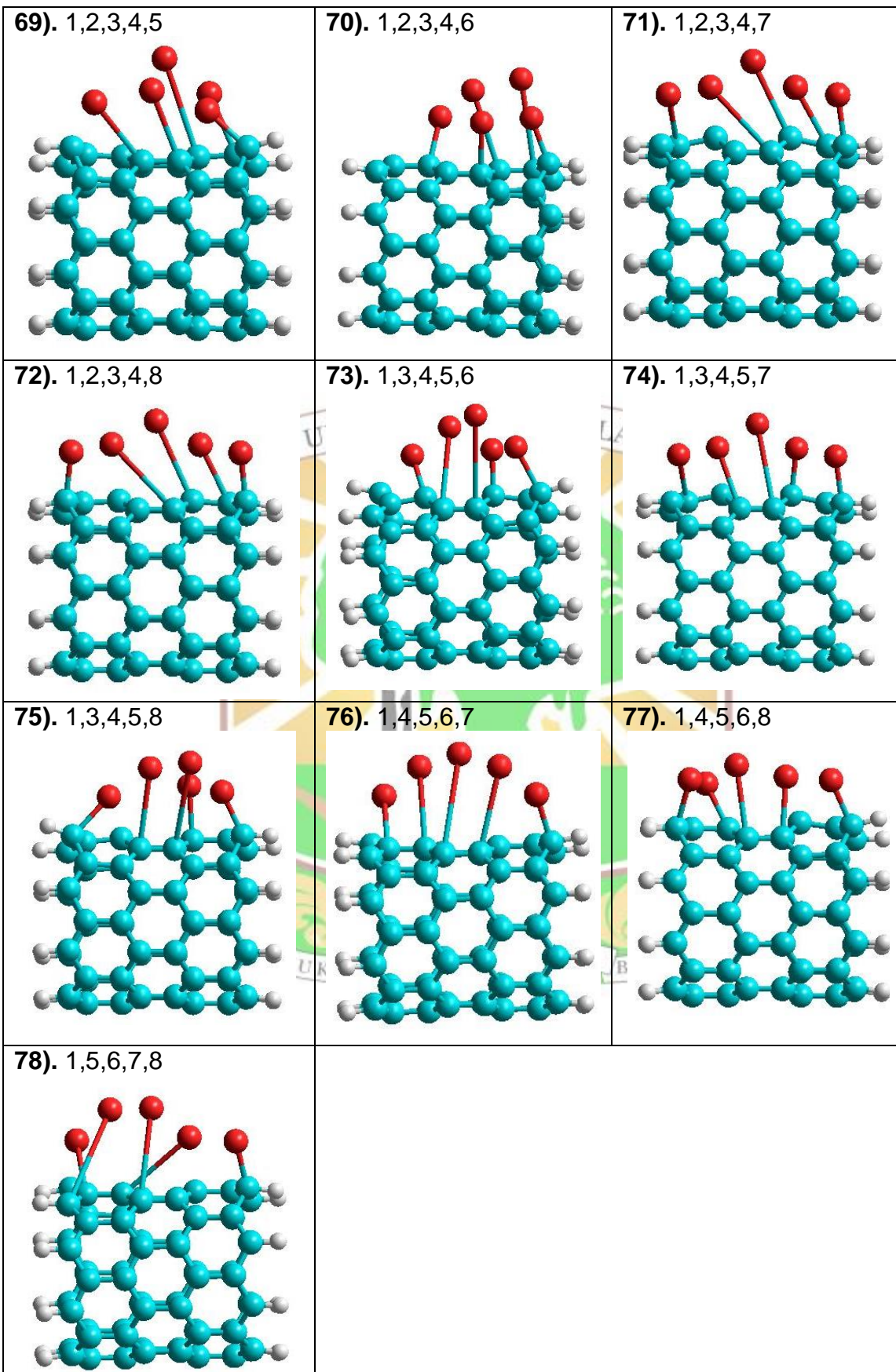




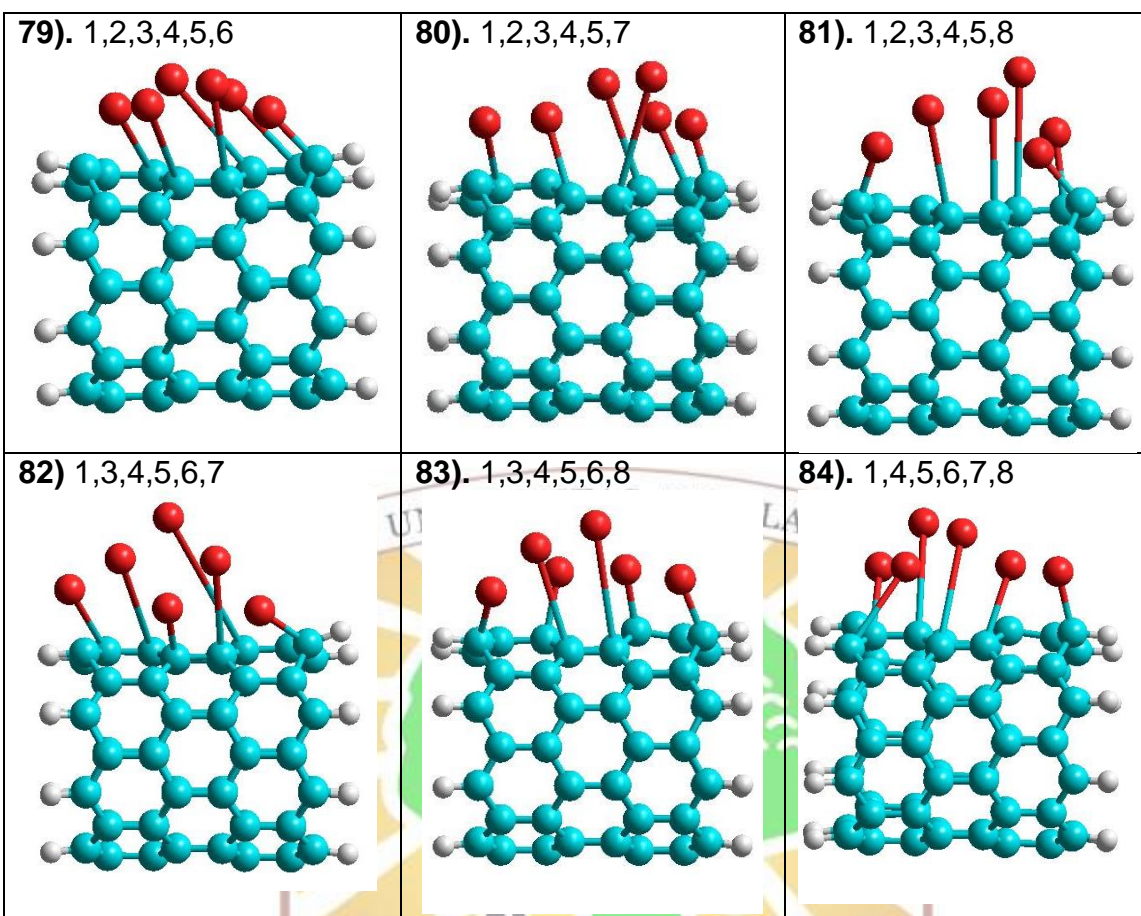
**D. 4 Atom**



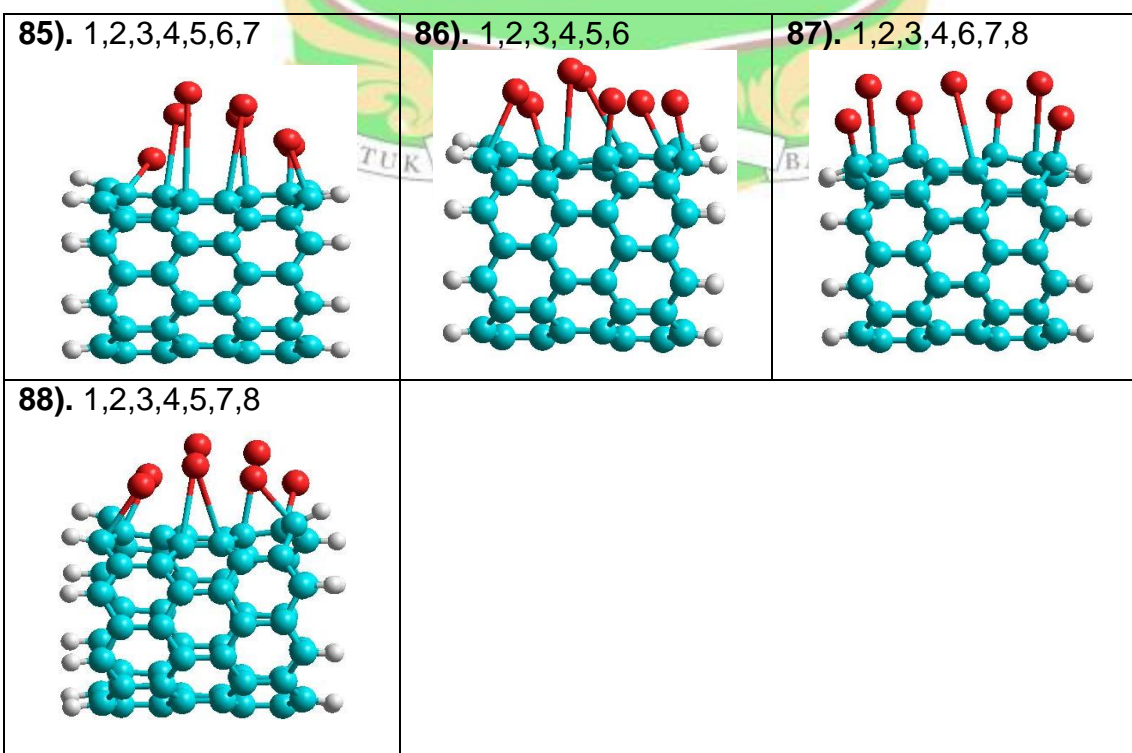
## E. 5 Atom



## F. 6 Atom

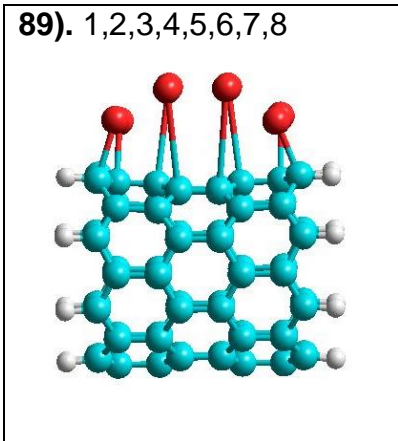


## G. 7 Atom



### G. 8 Atom

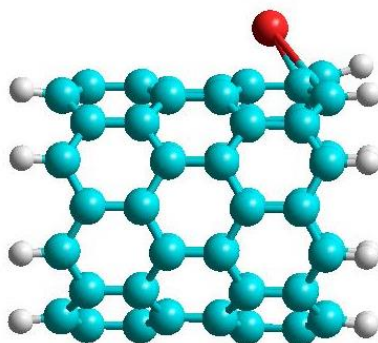
89). 1,2,3,4,5,6,7,8



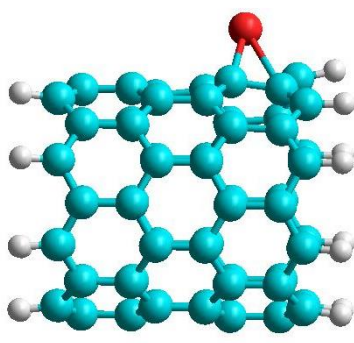
### 2. Gambar penjatuhan Ge pada dinding SWCNT (8.0) Bridge

#### A. 1 Atom

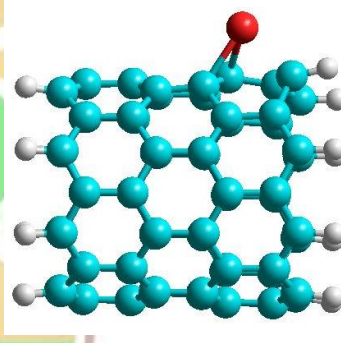
1). 12



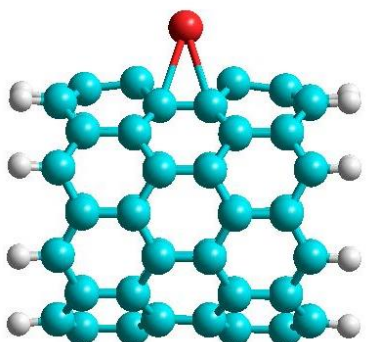
2). 23



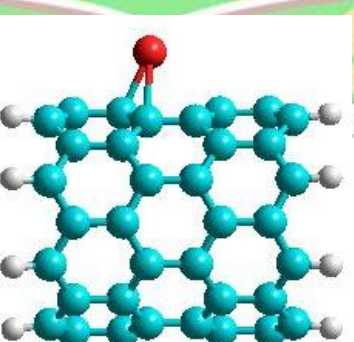
3). 34



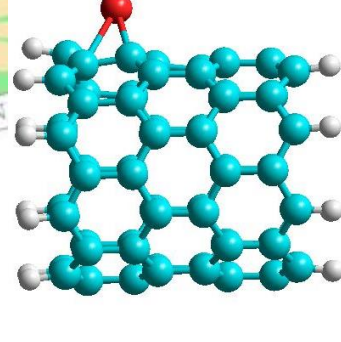
4). 45



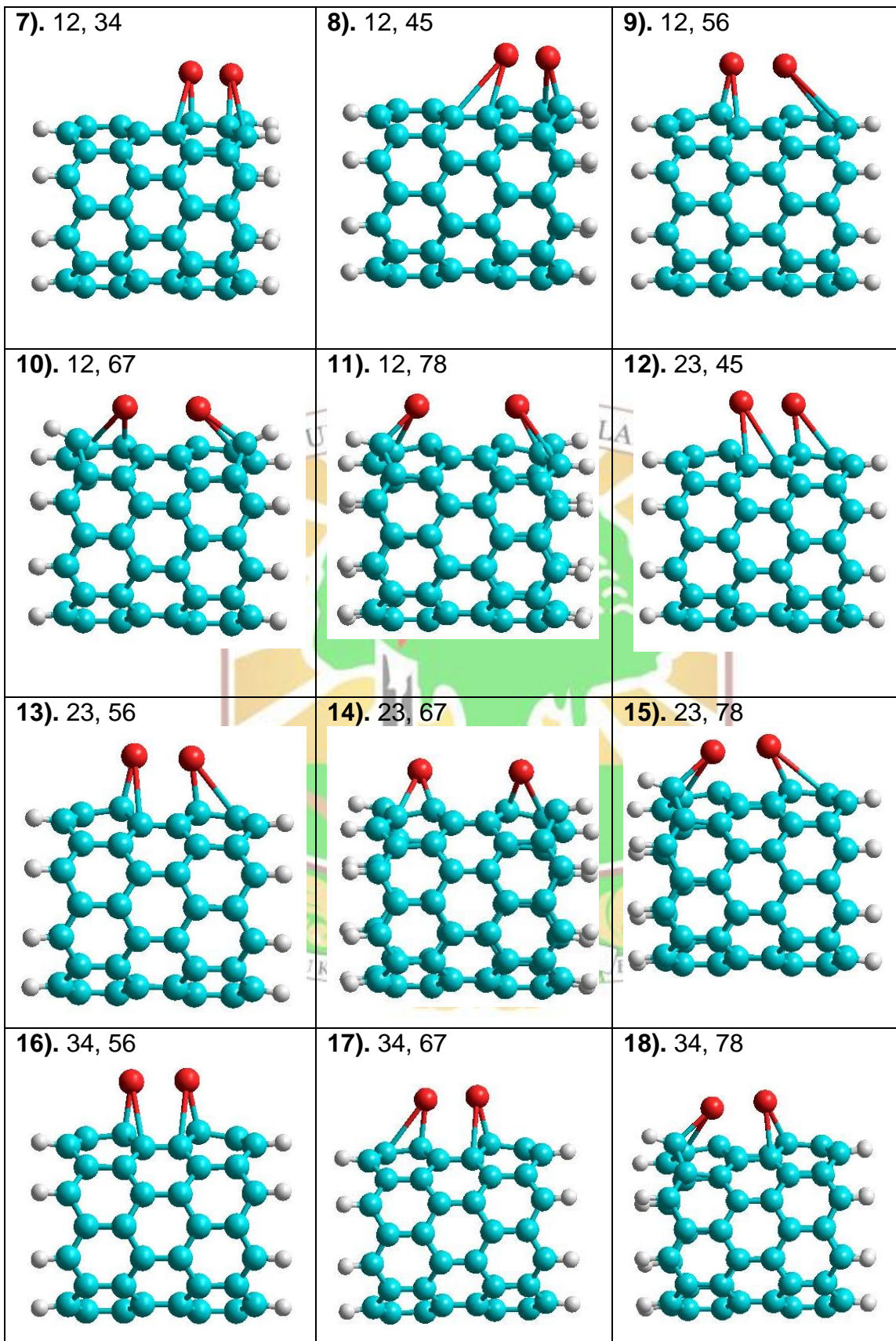
5). 56



6). 67

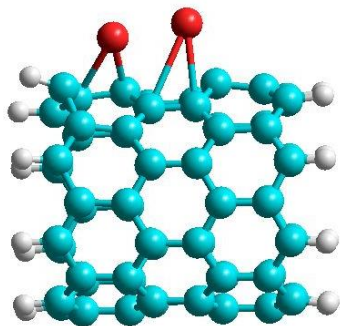


## B. 2 Atom

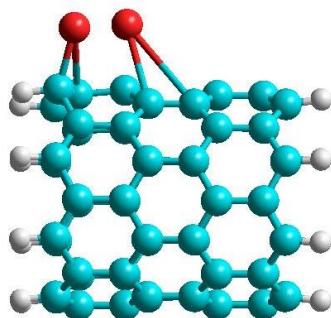




19). 45, 67

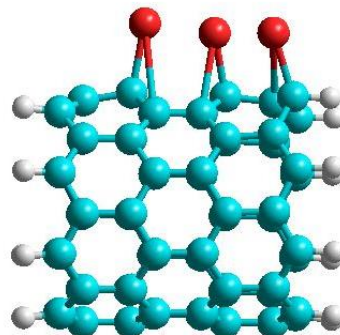


20). 45, 78

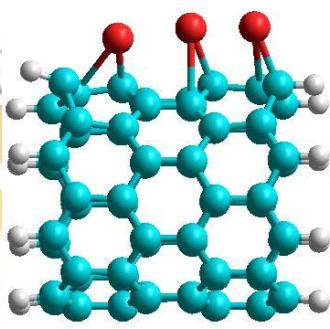


## C. 3 Atom

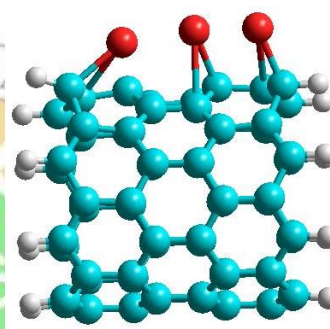
21). 12, 34, 56



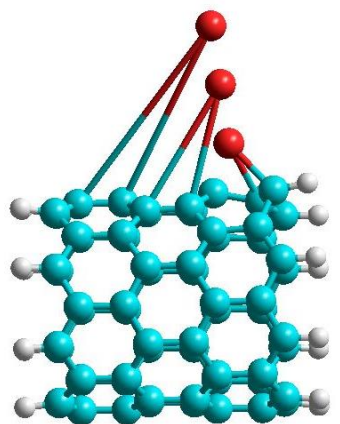
22). 12, 34, 67



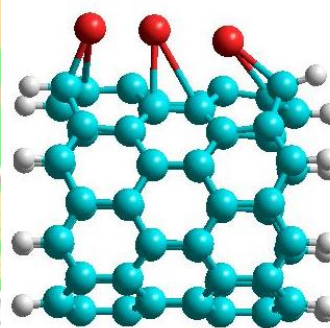
23). 12, 34, 78



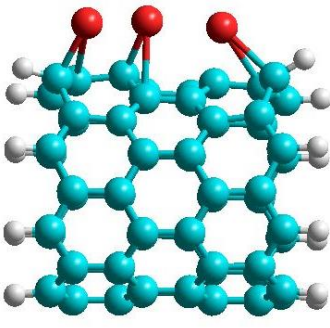
24). 12, 45, 67



25). 12, 45, 78

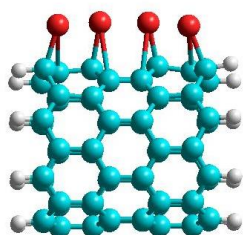


26). 12, 56, 78



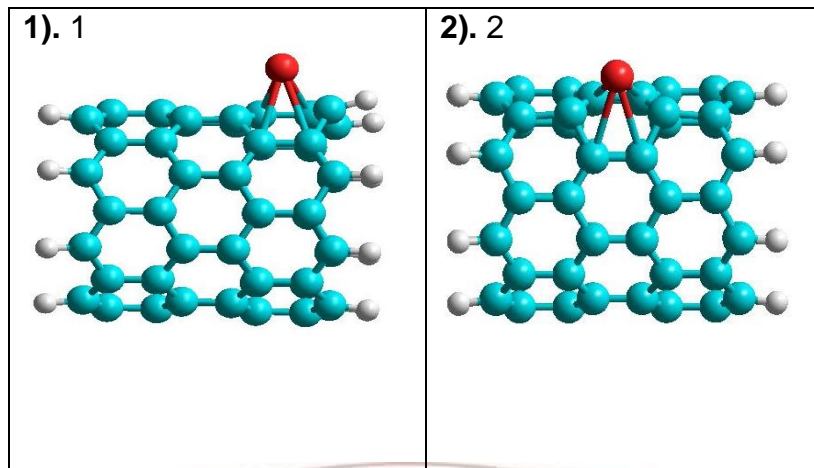
## D. 4 Atom

27). 12, 34, 56, 78

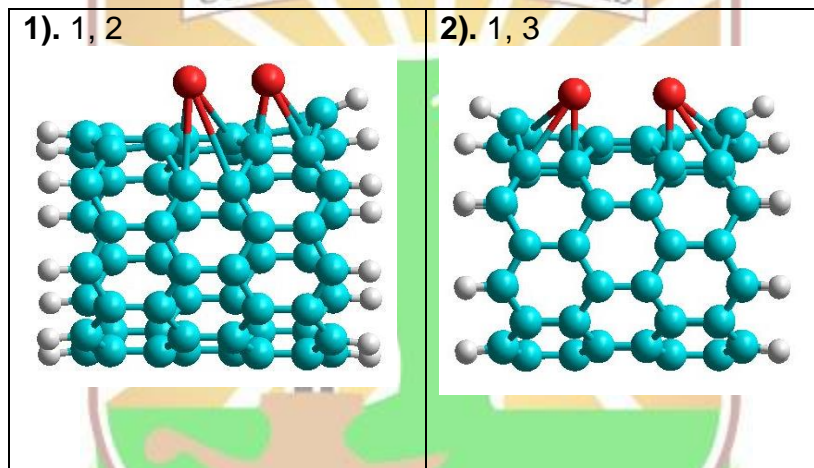


3. Gambar penjatuhan 1,2,3 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) *Hollow*

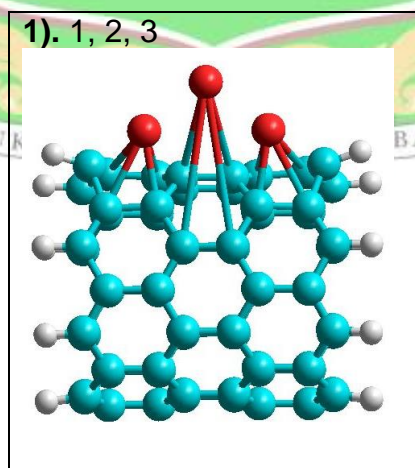
## A. 1 Atom



## B. 2 Atom



## C. 3 Atom



## Lampiran 2. Nilai $\Delta E$ , BE dan $E_{ads}$ hasil optimasi

1. Hasil optimasi penjatuhan 1,2,3,4,5,6,7,8 atom Ge pada dinding SWCNT 8.0 on top

### 1 Atom

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	2	2,263789	-11102,48744	-11102,48744	-228,84725	-228,84725
2.	3	2,593816	-11101,34192	-11101,34192	-224,03606	-224,03606
3.	4	2,068201	-11093,75154	-11093,75154	-192,15647	-192,15647
4.	5	2,173824	-11101,56078	-11101,56078	-224,95528	-224,95528
	$\Sigma$	<b>9,099630</b>	<b>-44399,141680</b>	<b>-44399,141680</b>	<b>-869,995060</b>	<b>-869,995060</b>
	Rata-rata	<b>2,274908</b>	<b>-11099,785420</b>	<b>-11099,785420</b>	<b>-217,498765</b>	<b>-217,498765</b>

### 2 Atom

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2	3,19402	-11188,36153	-5594,180765	-589,518426	-294,759213
2.	1,3	3,094906	-11186,75996	-5593,37998	-582,791832	-291,395916
3.	1,4	2,983951	-11190,27740	-5595,1387	-597,56508	-298,78254
4.	1,5	3,196148	-11188,30175	-5594,150875	-589,26735	-294,633675
5.	1,6	4,114513	-11223,22577	-5611,612885	-735,948234	-367,974117
6.	1,7	4,197965	-11218,10859	-5609,054295	-714,456078	-357,228039
7.	1,8	4,198636	-11218,11826	-5609,05913	-714,496692	-357,248346
8.	2,3	3,090454	-11190,36071	-5595,180355	-597,914982	-298,957491
9.	2,4	3,089268	-11190,27136	-5595,13568	-597,539712	-298,769856
10.	2,5	3,20148	-11198,83870	-5599,41935	-633,52254	-316,76127
11.	2,6	4,112908	-11223,21301	-5611,606505	-735,894642	-367,947321
12.	2,7	4,197954	-11218,11029	-5609,055145	-714,463218	-357,231609
13.	2,8	4,114516	-11223,22574	-5611,61287	-735,948108	-367,974054

14.	3,4	1,980361	-11196,84762	-5598,42381	-625,160004	-312,580002
15.	3,5	1,687036	-11161,99335	-5580,996675	-478,77207	-239,386035
16.	3,6	3,201338	-11198,83965	-5599,419825	-633,52653	-316,763265
17.	3,7	2,986107	-11186,18018	-5593,09009	-580,356756	-290,178378
18.	3,8	2,995415	-11186,32675	-5593,163375	-580,97235	-290,486175
19.	4,5	1,849356	-11163,72544	-5581,86272	-486,046848	-243,023424
20.	4,6	1.899495	-11158,79567	-5579,397835	-465,341814	-232,670907
21.	4,7	4,198083	-11218,11783	-5609,058915	-714,494886	-357,247443
22.	4,8	3,275198	-11208,64541	-5604,322705	-674,710722	-337,355361
23.	5,6	2,17159	-11196,59863	-5598,299315	-624,114246	-312,057123
24.	5,7	3,113855	-11189,36596	-5594,68298	-593,737032	-296,868516
25.	5,8	2,987957	-11186,83592	-5593,41796	-583,110864	-291,555432
26.	6,7	2,11921	-11202,25631	-5601,128155	-647,876502	-323,938251
27.	6,8	2,970354	-11186,45035	-5593,225175	-581,49147	-290,745735
28.	7,8	3,041619	-11188,19804	-5594,09902	-588,831768	-294,415884
<b>Σ</b>		<b>87,263693</b>	<b>-313486,35018</b>	<b>-156743,1751</b>	<b>-17397,87076</b>	<b>-8698,935378</b>
<b>Rata-rata</b>		<b>3,116560</b>	<b>-11195,94108</b>	<b>-5597,970539</b>	<b>-621,35253</b>	<b>-306,8013842</b>

### 3 Atom

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2,3	2,673622	-11266,73599	-3755,578663	-918,691158	-306,230386
2.	1,2,4	3,139972	-11274,30295	-3758,100983	-950,47239	-316,82413
3.	1,2,5	3,276369	-11278,73237	-3759,577457	-969,075954	-323,025318
4.	1,2,6	3.345104	-11260,07007	-3753,356690	-890,694294	-296,898098
5.	1,2,7	4,190646	-11332,61614	-3777,538713	-1195,387788	-398,462596

6.	1,2,8	4,190903	-11332,71702	-3777,572340	-1195,811484	-398,603828
7.	1,3,4	2,865536	-11242,25957	-3747,419857	-815,890194	-271,963398
8.	1,3,5	3,304651	-11288,45026	-3762,816753	-1009,891092	-336,630364
9.	1,3,6	3,126288	-11275,19307	-3758,397690	-954,210894	-318,070298
10.	1,3,7	3,802738	-11281,65060	-3760,550200	-981,33252	-327,11084
11.	1,3,8	3,50883	-11262,34270	-3754,114233	-900,23934	-300,07978
12.	1,4,5	4,194563	-11333,24268	-3777,747560	-1198,019256	-399,339752
13.	1,4,6	3,276017	-11280,43257	-3760,144190	-976,216794	-325,405598
14.	1,4,7	4,194132	-11333,19528	-3777,731760	-1197,820176	-399,273392
15.	1,4,8	4,199058	-11333,57287	-3777,857623	-1199,406054	-399,802018
16.	1,5,6	3,27744	-11279,02663	-3759,675543	-970,311846	-323,437282
17.	1,5,7	3,155846	-11304,32396	-3768,107987	-1076,560632	-358,853544
18.	1,5,8	3,155773	-11304,31413	-3768,104710	-1076,519346	-358,839782
19.	1,6,7	3,514574	-11260,98464	-3753,661547	-894,535488	-298,178496
20.	1,6,8	3,876262	-11326,42814	-3775,476047	-1169,398188	-389,799396
21.	1,7,8	4,209991	-11333,83905	-3777,946350	-1200,52401	-400,17467
	<b>Σ</b>	<b>74,78315</b>	<b>-237184,43069</b>	<b>-79061,47689</b>	<b>-21741,00890</b>	<b>-7247,002967</b>
	<b>Rata-rata</b>	<b>3,546586</b>	<b>-11294,49670</b>	<b>-3764,83223</b>	<b>-1035,28614</b>	<b>-345,09538</b>



## 4 Atom

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2,3,4	2,562159	-11417,26115	-2854,315288	-1550,89683	-387,724208
2.	1,2,3,5	3,697834	-11363,66486	-2840,916215	-1325,792412	-331,448103
3.	1,2,3,6	3,702784	-11363,74522	-2840,936305	-1326,129924	-331,532481
4.	1,2,3,7	3,754801	-11394,34041	-2848,585103	-1454,629722	-363,657431
5.	1,2,3,8	3,694581	-11340,32198	-2835,080495	-1227,752316	-306,938079
6.	1,3,4,5	3,359237	-11384,74729	-2846,186823	-1414,338618	-353,584655
7.	1,3,4,6	3,13721	-11313,61890	-2828,404725	-1115,59938	-278,899845
8.	1,3,4,7	3,830241	-11160,20012	-2790,050030	-471,240504	-117,810126
9.	1,3,4,8	3,23672	-11443,10636	-2860,776590	-1659,446712	-414,861678
10.	1,4,5,6	3,715446	-11452,92178	-2863,230445	-1700,671476	-425,167869
11.	1,4,5,7	3,517183	-11377,59388	-2844,398470	-1384,294296	-346,073574
12.	1,4,5,8	3,455441	-11377,44539	-2844,361348	-1383,670638	-345,91766
13.	1,5,6,7	3,56247	-11391,95933	-2847,989833	-1444,629186	-361,157297
14.	1,5,6,8	3,401625	-1136146314	-2840,365785	-1316,545188	-329,136297
15.	1,6,7,8	3,738217	-11358,62719	-2839,656798	-1304,634198	-326,15855
$\Sigma$		<b>52,36595</b>	<b>-170501,01700</b>	<b>-42625,25425</b>	<b>-20080,27140</b>	<b>-5020,06785</b>
Rata-rata		<b>3,491063</b>	<b>-11366,73447</b>	<b>-2841,68361</b>	<b>-1338,68476</b>	<b>-334,67119</b>

## 5 Atom

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2,3,4,5	3,66369	-11525,66278	-2305,132556	-2006,183676	-401,2367352
2.	1,2,3,4,6	3,356791	-11554,84487	-2310,968974	-2128,748454	-425,7496908
3.	1,2,3,4,7	3,565884	-11409,88204	-2281,976408	-1519,904568	-303,9809136

4.	1,2,3,4,8	2,37451	-11373,85764	-2274,771528	-1368,602088	-273,7204176
5.	1,3,4,5,6	3,505051	-11496,61642	-2299,323284	-1884,188964	-376,8377928
6.	1,3,4,5,7	3,463355	-11547,19465	-2309,43893	-2096,61753	-419,323506
7.	1,3,4,5,8	3,956788	-11441,90656	-2288,381312	-1654,407552	-330,8815104
8.	1,4,5,6,7	3,270326	-11405,62472	-2281,124944	-1502,023824	-300,4047648
9.	1,4,5,6,8	3,602619	-11488,30087	-2297,660174	-1849,263654	-369,8527308
10.	1,5,6,7,8	3,795859	-11418,68572	-2283,737144	-1556,880024	-311,3760048
	<b>Σ</b>	<b>34,55487</b>	<b>-114662,57627</b>	<b>-22932,51525</b>	<b>-17566,82033</b>	<b>-3513,364066</b>
	<b>Rata-rata</b>	<b>3,455487</b>	<b>-11466,25763</b>	<b>-2293,25153</b>	<b>-1756,68203</b>	<b>-351,336406</b>

### 6 Atom

No	Posisi Penjatuhan	ΔE (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2,3,4,5,6	3,715638	-11504,79609	-1917,466015	-1918,543578	-319,757263
2.	1,2,3,4,5,7	3,63838	-11492,95235	-1915,492058	-1868,79987	-311,466645
3.	1,2,3,4,5,8	3,65636	-11674,46708	-1945,744513	-2631,161736	-438,526956
4.	1,3,4,5,6,7	3,748554	-11496,71545	-1916,119242	-1884,60489	-314,100815
5.	1,3,4,5,6,8	3,404803	-11495,62454	-1915,937423	-1880,023068	-313,337178
6.	1,4,5,6,7,8	2,59447	-11564,97432	-1927,49572	-2171,292144	-361,882024
	<b>Σ</b>	<b>20,75821</b>	<b>-69229,52983</b>	<b>-11538,25497</b>	<b>-12354,42529</b>	<b>-2059,070882</b>
	<b>Rata-rata</b>	<b>3,459701</b>	<b>-11538,25497</b>	<b>-1923,042495</b>	<b>-2059,07088</b>	<b>-343,17848</b>

### 7 Atom

No	Posisi Penjatuhan	ΔE (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2,3,4,5,6,7	3,59631	-11723,36832	-1674,766903	-2836,546944	-405,220992
2.	1,2,3,4,5,6,8	3,797257	-11584,60487	-1654,943553	-2253,740454	-321,962922
3.	1,2,3,4,5,7,8	3,827022	-11630,97040	-1661,5672	-2448,47568	-349,78224

4.	1,2,3,4,6,7,8	3,542559	-11689,54961	-1669,935659	-2694,508362	-384,929766
	$\Sigma$	14,76315	-46628,49320	-6661,21331	-10233,27144	-1461,89592
	Rata-rata	3,690787	-11657,1233	-1665,303328	-2558,31786	-365,47398

### 8 Atom

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1,2,3,4,5,6,7,8	4,214164	-11927,46290	-1490.932863	-3693,74418	-461,7180225
	$\Sigma$	4,214164	-11927,46290	-1490.932863	-3693,74418	-461,7180225
	Rata-rata	4,214164	-11927,46290	-1490.932863	-3693,74418	-461,7180225





2. Hasil optimasi penjatuhan 1,2,3,4 atom Ge pada dinding SWCNT 8.0 *Bridge***1 ATOM**

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	12	2,647847	-11123,53240	-11123,53240	-317,23608	-317,23608
2.	23	2,054196	-11099,85548	-11099,85548	-217,793016	-217,793016
3.	34	2,580831	-11101,49920	-11101,49920	-224,6966673	-224,6966673
4.	45	0,373056	-10812,05419	-10812,05419	990,9723764	990,9723764
5.	56	2,376627	-11109,47841	-11109,47841	-258,2093543	-258,2093543
6.	67	2,286265	-11103,75975	-11103,75975	-234,1909597	-234,1909597
	$\Sigma$	<b>12,318822</b>	<b>-66350,17945</b>	<b>-66350,1794526</b>	<b>-261,1537009</b>	<b>-261,1537009</b>
	Rata-rata	<b>2,053137</b>	<b>-11058,36324</b>	<b>-11058,3632421</b>	<b>-43,5256168</b>	<b>-43,5256168</b>

**2 Atom**

No	Posisi Penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	12, 34	3,030221	-11191,57765	-5595,78883	-603,0261686	-301,5130843
2.	12, 45	3,036970	-11189,90426	-5594,952132	-595,9979075	-297,9989538
3.	12, 56	1,860778	-11159,73568	-5579,867844	-469,2898904	-234,6449452
4.	12, 67	3,906043	-11217,56660	-5608,7833	-712,17972	-356,08986
5.	12, 78	4,114473	-11223,22585	-5611,612925	-735,94857	-367,974285
6.	23, 45	1,828484	-11163,12162	-5581,56081	-483,510804	-241,755402
7.	23, 56	1,842613	-11159,84799	-5579,923995	-469,761558	-234,880779
8.	23, 67	4,114437	-11223,22565	-5611,612825	-735,94773	-367,973865
9.	23, 78	3,201103	-11198,83735	-5599,418675	-633,51687	-316,758435
10.	34, 56	1,944168	-11157,89311	-5578,946555	-461,551062	-230,775531
11.	34, 67	1,8774751	-11156,53447	-5578,267235	-455,844774	-227,922387
12.	34, 78	3,318881	-11195,60317	-5597,801585	-619,933314	-309,966657

13.	45, 67	3,20384	-11203,95139	-5601,975695	-654,995838	-327,497919
14.	45, 78	3,088416	-11220,51663	-5610,258315	-724,569846	-362,284923
	$\Sigma$	<b>40,36790</b>	<b>-156661,54144</b>	<b>-78330,77072</b>	<b>-8356,0740526</b>	<b>-4178,037026</b>
	Rata-rata	<b>2,88342</b>	<b>-11190,11010</b>	<b>-5595,055051</b>	<b>-596,8624323</b>	<b>-298,4312162</b>

### 3 Atom

No	Posisi penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	12, 34, 56	3,274752	-11279,07118	-3759,690393	-970,498956	-323,499652
2.	12, 34, 67	4,209844	-11334,27043	-3778,090143	-1202,335806	-400,778602
3.	12, 34, 78	4,190527	-11332,69695	-3777,56565	-1195,72719	-398,57573
4.	12, 45, 67	3,092392	-11329,73473	-3776,578243	-1183,285866	-394,428622
5.	12, 45, 78	4,186727	-11331,97795	-3777,325983	-1192,70739	-397,56913
6.	12, 56, 78	4,144543	-11319,48397	-3773,161323	-1140,232674	-380,077558
	$\Sigma$	<b>23,098785</b>	<b>-67927,23521</b>	<b>-22642,41174</b>	<b>-6884,787882</b>	<b>-2294,929294</b>
	Rata-rata	<b>3,849798</b>	<b>-11321,20587</b>	<b>-3773,735289</b>	<b>-1147,464647</b>	<b>-382,4882157</b>

### 4 Atom

No	Posisi penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	12, 34, 56, 78	3,396731	-11379,46843	-2844,867108	-1392,167406	-348,0418515
	$\Sigma$	<b>3,396731</b>	<b>-11379,46843</b>	<b>-2844,867108</b>	<b>-1392,167406</b>	<b>-348,0418515</b>
	Rata-rata	<b>3,396731</b>	<b>-11379,46843</b>	<b>-2844,867108</b>	<b>-1392,167406</b>	<b>-348,0418515</b>

3. Hasil optimasi penjatuhan 1,2,3 atom Ge pada dinding SWCNT 8.0 *Hollow***1 Atom**

No	Posisi penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1	2,648332	-11123,5322	-11123,5322	-317,235366	-317,235366
2.	2	2,374053	-11109,4692	-11109,4692	-258,17064	-258,17064
	$\Sigma$	<b>5,022385</b>	<b>-22233,0014</b>	<b>-22233,0014</b>	<b>-575,406006</b>	<b>-575,406006</b>
	Rata-rata	2,5111925	-11116,5007	-11116,5007	-287,703003	-287,703003

**2 Atom**

No	Posisi penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1, 2	3,204166	-11203,95422	-5601,97711	-655,007724	-327,503862
2.	1, 3	3,905996	-11217,56659	-5608,783295	-712,179678	-356,089839
	$\Sigma$	<b>7,110162</b>	<b>-22421,52081</b>	<b>-11210,76041</b>	<b>-1367,187402</b>	<b>-683,593701</b>
	Rata-rata	3,555081	-11210,76041	-5605,380203	-683,593701	-341,7968505

**3 Atom**

No	Posisi penjatuhan	$\Delta E$ (eV)	BE (kkal/mol)	BE/n (kkal/mol)	Eads (KJ/mol)	Eads/n (KJ/mol)
1.	1, 2, 3	3,847688	-11327,52896	-3775,842987	-1174,021632	-391,340544
	$\Sigma$	<b>3,847688</b>	<b>-11327,52896</b>	<b>-3775,842987</b>	<b>-1174,021632</b>	<b>-391,340544</b>
	Rata-rata	3,847688	-11327,52896	-3775,842987	-1174,021632	-391,340544

**Lampiran 3.** Tabel data nilai hasil  $\Delta E$  rata-rata,  $\Delta E$  minimum, BE rata-rata,  $E_{ads}$  rata-rata dan  $E_{ads}/n$  rata-rata atom Ge

Tabel data hasil Celah energi ( $\Delta E$ ) rata-rata

Jumlah Atom	Energi gap ( $\Delta E$ ) rata-rata (eV)		
	SWCNT 8,0 On Top	SWCNT 8,0 Bridge	SWCNT 8,0 Hollow
1	2,274908	2,053137	2,5111925
2	3,116560	2,88342	3,555081
3	3,546586	3,849798	3,847688
4	3,491063	3,396731	
5	3,455487		
6	3,459701		
7	3,690787		
8	4,214164		

Tabel data hasil Celah energi ( $\Delta E$ ) minimum

Jumlah Atom	Celah energi ( $\Delta E$ ) minimum (eV)		
	SWCNT 8,0 On Top	SWCNT 8,0 Bridge	SWCNT 8,0 Hollow
1	2,068201	0,373056	2,374053
2	1,687036	1,828484	3,204166
3	2,673622	3,092392	3,847688
4	2,562159	3,396731	
5	2,37451		
6	2,59447		
7	3,542559		
8	4,214164		

Tabel data hasil BE rata-rata

Jumlah Atom	Energi Ikatan (BE) rata-rata (Kkal/mol)		
	SWCNT 8,0 On Top	SWCNT 8,0 Bridge	SWCNT 8,0 Hollow
1	-11099,785420	-11058,36324	-11116,50072
2	-11195,94108	-11190,11010	-11210,76041
3	-11294,49670	-11321,20587	-11327,52896
4	-11366,73447	-11379,46843	
5	-11466,25763		
6	-11538,25497		
7	-11657,1233		
8	-11927,46290		

Tabel data hasil  $E_{ads}$  rata-rata (KJ/mol)

Jumlah Atom	Energi Adsorpsi ( $E_{ads}$ ) rata-rata (KJ/mol)		
	SWCNT 8,0 On Top	SWCNT 8,0 Bridge	SWCNT 8,0 Hollow
1	-217,498765	-43,5256168	-287,703003
2	-621,35253	-596,8624323	-683,593701
3	-1035,28614	-1147,464647	-1174,021632
4	-1338,68476	-1392,167406	
5	-1756,68203		
6	-2059,07088		
7	-2558,31786		
8	-3693,74418		

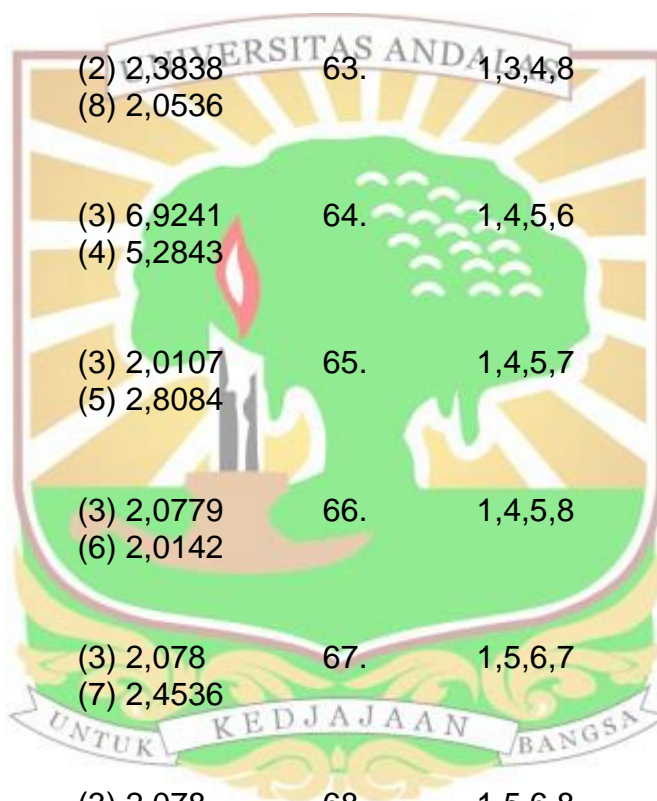
Tabel data hasil  $E_{ads}/n$  rata-rata (KJ/mol)

Jumlah Atom	Energi Adsorpsi ( $E_{ads}/n$ ) (KJ/mol)		
	SWCNT 8,0 On Top	SWCNT 8,0 Bridge	SWCNT 8,0 Hollow
1	-217,498765	-43,5256168	-287,703003
2	-306,8013842	-298,4312162	-341,7968505
3	-345,09538	-382,4882157	-391,340544
4	-334,67119	-348,0418515	
5	-351,336406		
6	-343,17848		
7	-365,47398		
8	-461,7180225		

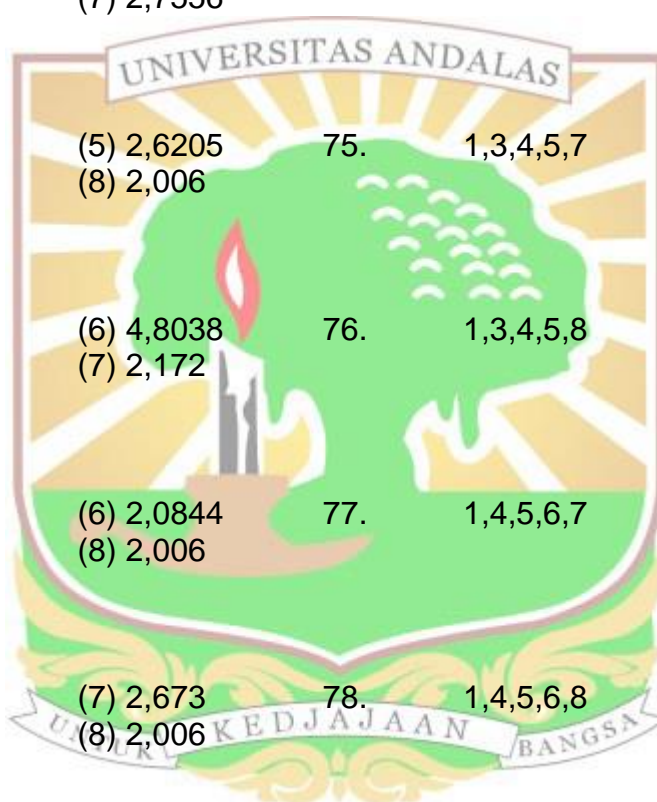
**Lampiran 4.** Data panjang ikatan ( r ) hasil optimasi penjatuhan atom Ge  
 1. Hasil optimasi penjatuhan 1,2,3,4,5,6,7,8 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0)  
 posisi *on top*

No	Posisi penjatuhan	$r_{c-Ge}$ (Å)	No	Posisi penjatuhan	$r_{c-Ge}$ (Å)
1.	1	(1)2,0777	46.	1,4,6	(1) 2,0525 (4) 2,5285 (6) 2,1248
2.	2	(2)2,4231	47.	1,4,7	(1) 2,0285 (4) 2,4113 (7) 2,4749
3.	3	(3)2,0965	48.	1,4,8	(1) 2,0285 (4) 2,4113 (8) 2,1719
4.	4	(4)1,9986	49.	1,5,6	(1) 2,0525 (5) 3,0758 (6) 2,1248
5.	5	(5)2,1137	50.	1,5,7	(1) 2,1098 (5) 2,0527 (7) 2,9442
6.	1,2	(1) 2,0351 (2) 2,7107	51.	1,5,8	(1) 2,1098 (5) 2,0527 (8) 2,0492
7.	1,3	(1) 2,006 (3) 2,0844	52.	1,6,7	(1) 2,0536 (6) 2,0086 (7) 2,7522
8.	1,4	(1) 2,006 (4) 2,6205	53.	1,6,8	(1) 2,1701 (6) 2,1443 (8) 2,0336
9.	1,5	(1) 2,0352 (5) 3,3233	54.	1,7,8	(1) 2,1719 (7) 2,9901 (8) 2,0285
10.	1,6	(1) 2,0536 (6) 2,0589	55.	1,2,3,4	(1) 2,0128 (2) 2,4239 (3) 3,4996 (4) 2,3801
11.	1,7	(1) 2,0552 (7) 2,3512	56.	1,2,3,5	(1) 1,969 (2) 4,3595 (3) 4,7002 (5) 3,1793
12.	1,8	(1) 2,0552 (8) 2,0552	57.	1,2,3,6	(1) 1,969 (2) 4,3594 (3) 4,7 (6) 3,2261
13.	2,3	(2) 2,7556 (3) 2,0844	58.	1,2,3,7	(1) 1,9857 (2) 3,3352 (3) 2,031 (7) 2,3754

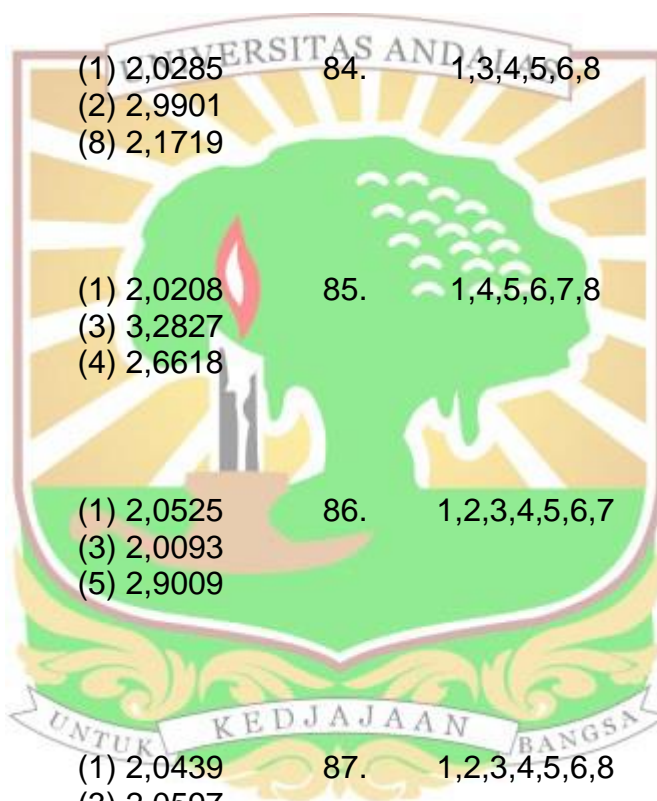
14.	2,4	(2) 2,7556 (4) 2,6205	59.	1,2,3,8	(1) 1,9867 (2) 3,3046 (3) 2,0276 (8) 2,0515
15.	2,5	(2) 2,4536 (5) 2,9658	60.	1,3,4,5	(1) 2,013 (3) 2,1373 (4) 2,1123 (5) 2,0682
16.	2,6	(2) 2,3838 (6) 2,0589	61.	1,3,4,6	(1) 2,0471 (3) 3,6056 (4) 2,3059 (6) 2,048
17.	2,7	(2) 2,3512 (7) 2,3512	62.	1,3,4,7	(1) 2,0544 (3) 4,0423 (4) 3,7318 (7) 2,7967
18.	2,8	(2) 2,3838 (8) 2,0536	63.	1,3,4,8	(1) 2,0528 (3) 3,5951 (4) 2,652 (8) 2,0093
19.	3,4	(3) 6,9241 (4) 5,2843	64.	1,4,5,6	(1) 2,0894 (4) 2,7276 (5) 3,8159 (6) 1,9988
20.	3,5	(3) 2,0107 (5) 2,8084	65.	1,4,5,7	(1) 2,0184 (4) 2,5896 (5) 2,5326 (7) 2,7514
21.	3,6	(3) 2,0779 (6) 2,0142	66.	1,4,5,8	(1) 2,074 (4) 2,5326 (5) 2,5896 (8) 2,0184
22.	3,7	(3) 2,078 (7) 2,4536	67.	1,5,6,7	(1) 2,0086 (5) 3,4895 (6) 3,2782 (7) 2,3614
23.	3,8	(3) 2,078 (8) 2,1634	68.	1,5,6,8	(1) 2,1003 (5) 2,0758 (6) 2,0262 (8) 2,0545
24.	4,5	(4) 2,8084 (5) 2,8169	69.	1,6,7,8	(1) 2,2293 (6) 2,1407 (7) 3,4214 (8) 1,9471
25.	4,6	(4) 2,8169 (6) 2,0274	70.	1,2,3,4,5	(1) 2,0845 (2) 2,5307 (3) 3,9227 (4) 2,9232 (5) 3,0214
26.	4,7	(4) 2,4607 (7) 2,3512	71.	1,2,3,4,6	(1) 2,0075 (2) 3,7933



					(3) 3,4504 (4) 2,2734 (6) 2,1636
27.	4,8	(4) 2,0263 (8) 2,1491	72.	1,2,3,4,7	(1) 2,0626 (2) 2,6359 (3) 3,3003 (4) 3,5165 (7) 2,7175
28.	5,6	(5) 5,2842 (6) 6,9238	73.	1,2,3,4,8	(1) 1,9883 (2) 2,6144 (3) 3,4373 (4) 3,6063 (8) 1,9883
29.	5,7	(5) 2,6205 (7) 2,7556	74.	1,3,4,5,6	(1) 2,19 (3) 1,9153 (4) 4,083 (5) 3,59 (6) 1,9932
30.	5,8	(5) 2,6205 (8) 2,006	75.	1,3,4,5,7	(1) 2,0626 (3) 2,029 (4) 3,7142 (5) 2,7796 (7) 2,7174
31.	6,7	(6) 4,8038 (7) 2,172	76.	1,3,4,5,8	(1) 2,0019 (3) 2,2215 (4) 3,9501 (5) 3,327 (8) 2,148
32.	6,8	(6) 2,0844 (8) 2,006	77.	1,4,5,6,7	(1) 2,0639 (4) 3,4664 (5) 4,1332 (6) 3,3558 (7) 2,8248
33.	7,8	(7) 2,673 (8) 2,006	78.	1,4,5,6,8	(1) 2,0795 (4) 2,4598 (5) 2,951 (6) 2,2008 (8) 2,0976
34.	1,2,3	(1) 2,0473 (2) 2,1015 (3) 2,089	79.	1,5,6,7,8	(1) 1,9972 (5) 3,8269 (6) 3,5512 (7) 2,8836 (8) 4,5295
35.	1,2,4	(1) 2,0473 (2) 2,1015 (4) 2,7038	80.	1,2,3,4,5,6	(1) 2,0258 (2) 2,9784 (3) 3,38 (4) 3,7607 (5) 3,8687 (6) 3,1014
36.	1,2,5	(1) 2,0525 (2) 2,7892	81.	1,2,3,4,5,7	(1) 1,9857 (2) 2,4858



		(5) 2,9009			(3) 3,5912 (4) 4,0434 (5) 2,5419 (7) 2,8201
37.	1,2,6	(1) 2,0401 (2) 2,6643 (6) 2,0503	82.	1,2,3,4,5,8	(1) 2,0052 (2) 2,3841 (3) 4,2642 (4) 3,4828 (5) 3,4863 (8) 2,0225
38.	1,2,7	(1) 2,0285 (2) 2,9901 (7) 2,4749	83.	1,3,4,5,6,7	(1) 2,1019 (3) 5,712 (4) 3,4888 (5) 2,2353 (6) 4,1007 (7) 2,8606
39.	1,2,8	(1) 2,0285 (2) 2,9901 (8) 2,1719	84.	1,3,4,5,6,8	(1) 2,0321 (3) 2,0883 (4) 4,0514 (5) 3,4848 (6) 2,1375 (8) 2,0665
40.	1,3,4	(1) 2,0208 (3) 3,2827 (4) 2,6618	85.	1,4,5,6,7,8	(1) 2,0244 (4) 2,8278 (5) 4,0373 (6) 4,1112 (7) 2,7081 (8) 3,2075
41.	1,3,5	(1) 2,0525 (3) 2,0093 (5) 2,9009	86.	1,2,3,4,5,6,7	(1) 2,593 (2) 2,6676 (3) 3,7105 (4) 4,0725 (5) 4,5658 (6) 3,6566 (7) 2,7994
42.	1,3,6	(1) 2,0439 (3) 2,0597 (6) 2,0145	87.	1,2,3,4,5,6,8	(1) 2,1531 (2) 2,3347 (3) 3,3723 (4) 2,0948 (5) 3,2844 (6) 2,5266 (8) 2,7257
43.	1,3,7	(1) 2,0353 (3) 2,0086 (7) 2,3786	88.	1,2,3,4,5,7,8	(1) 2,2236 (2) 2,1997 (3) 3,0973 (4) 3,0727 (5) 3,9725 (7) 2,4335 (8) 2,5189
44.	1,3,8	(1) 2,0401 (3) 2,0149	89.	1,2,3,4,6,7,8	(1) 1,944 (2) 3,1383





		(8) 2,0573			(3) 2,0641 (4) 4,0315 (6) 2,064 (7) 3,1384 (8) 1,944
45.	1,4,5	(1) 2,0285 (4) 2,4113 (5) 2,2618	90.	1,2,3,4,5,6,7,8	(1) 2,0354 (2) 2,440 (3) 3,5131 (4) 3,5301 (5) 3,5156 (6) 3,5191 (7) 2,3402 (8) 2,1637

**Keterangan tabel untuk posisi on top:**

- 1, 2 : penjatuhan atom Ge pada atom C nomor 1 dan 2  
(1) 2,0777 : panjang ikatan atom Ge pada atom C nomor 1

2. Hasil optimasi penjatuhan 1,2,3,4 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) posisi *bridge*

No	Posisi penjatuhan	$r_{C-Ge}$ (Å)	No	Posisi Penjatuhan	$r_{C-Ge}$ (Å)
1.	12	(1) 3,8928 (2) 2,5989	15.	23, 67	(2) 2,3838 (3) 2,0589 (6) 2,0589 (7) 2,3838
2.	23	(2) 2,4231 (3) 2,0965	16.	23, 78	(2) 3,0619 (3) 2,078 (7) 2,4536 (8) 2,1634
3.	34	(3) 2,0965 (4) 2,1137	17.	34, 56	(3) 2,0107 (4) 2,8169 (5) 2,8084 (6) 2,0274
4.	45	(4) 2,592 (5) 2,592	18.	34, 67	(3) 2,0107 (4) 2,8169 (6) 2,0274 (7) 2,7686
5.	56	(5) 2,592 (6) 2,592	19.	34, 78	(3) 2,078 (4) 2,4187 (7) 2,4536 (8) 2,1634
6.	67	(6) 2,0965 (7) 2,4231	20.	45, 67	(4) 2,2619 (5) 2,9014 (6) 2,0286 (7) 2,3889
7.	78	(7) 2,4231 (8) 2,0777	21.	45, 78	(4) 3,2949 (5) 2,6206 (7) 2,7556 (8) 2,006
8.	12, 34	(1) 3,8663 (2) 2,7556 (3) 2,0844	22.	12, 34, 56	(1) 2,0525 (2) 2,779 (3) 2,0093

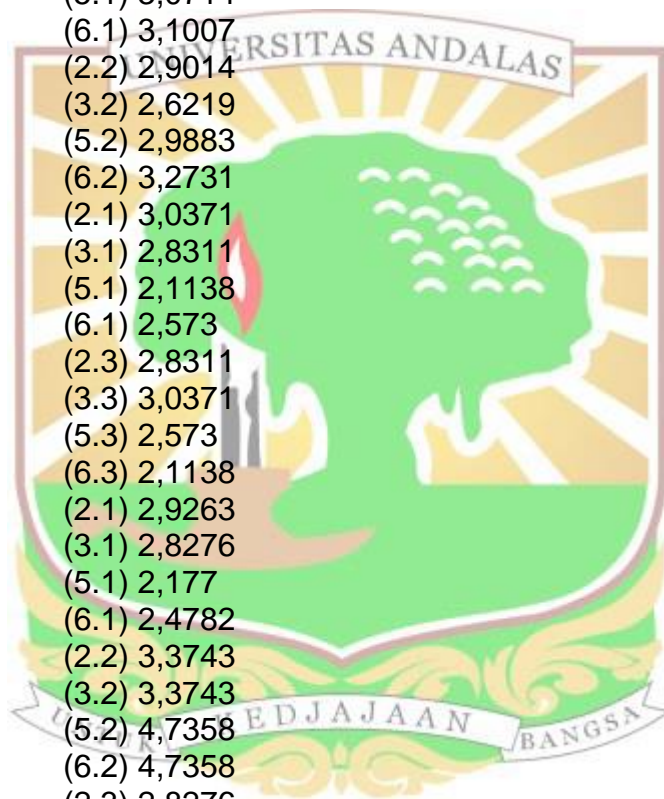
		(4) 3,0413			(4) 2,5285 (5) 2,9009 (6) 2,1248
9.	12, 45	(1) 2,006 (2) 2,7556 (4) 2,6206 (5) 3,2949	23.	12, 34, 67	(1) 2,0285 (2) 2,7699 (3) 2,1253 (4) 2,4113 (6) 1,9914 (7) 2,4749
10.	12, 56	(1) 3,6394 (2) 2,7686 (5) 2,8169 (6) 2,0107	24.	12, 34, 78	(1) 2,0285 (2) 2,7699 (3) 2,1253 (4) 2,4113 (7) 2,4749 (8) 2,1719
11.	12, 67	(1) 2,2339 (2) 2,573 (6) 2,1138 (7) 2,5732	25.	12, 45, 67	(1) 2,0524 (2) 2,3843 (4) 4,0215 (5) 4,6615 (6) 6,5994 (7) 7,3528
12.	12, 78	(1) 3,6163 (2) 2,3838 (7) 2,3838 (8) 2,0536	26.	12, 45, 78	(1) 2,1719 (2) 2,4749 (4) 2,7879 (5) 2,4113 (7) 2,7699 (8) 2,0285
13.	23, 45	(2) 2,7686 (3) 2,0274 (4) 3,2807 (5) 2,8169	27.	12, 56, 78	(1) 2,2344 (2) 2,4502 (5) 2,363 (6) 2,0732 (7) 2,8079 (8) 2,0782
14.	23, 56	(2) 2,7685 (3) 2,0274 (5) 2,8169 (6) 2,0107	28.	12, 34, 56, 78	(1) 2,074 (2) 2,7514 (3) 2,04 (4) 2,5326 (5) 2,5896 (6) 2,1278 (7) 2,7665 (8) 2,0184

**Keterangan tabel untuk posisi *bridge*:**

- 12, 34 : penjatuhan atom Ge diantara atom C nomo 1 dan 2 serta diantara atom C nomo 3 dan 4  
 (1) 3,8928 : panjang ikatan atom Ge dengan atom C nomor 1

3. Hasil optimasi penjatuhan 1,2,3,4 atom Ge pada dinding SWCNT (8.0) posisi *hollow*

No	Posisi penjatuhan	$r_{C-Ge}$ (Å)
1.	1	(2) 2,599 (3) 2,5558 (5) 2,5539 (6) 2,5974
2.	2	(2) 2,5921 (3) 2,5921 (5) 2,5922 (6) 2,5922
3.	1, 2	(2.1) 2,3889 (3.1) 2,0282 (5.1) 3,0714 (6.1) 3,1007 (2.2) 2,9014 (3.2) 2,6219 (5.2) 2,9883 (6.2) 3,2731
4.	1, 3	(2.1) 3,0371 (3.1) 2,8311 (5.1) 2,1138 (6.1) 2,573 (2.3) 2,8311 (3.3) 3,0371 (5.3) 2,573 (6.3) 2,1138
5.	1, 2, 3	(2.1) 2,9263 (3.1) 2,8276 (5.1) 2,177 (6.1) 2,4782 (2.2) 3,3743 (3.2) 3,3743 (5.2) 4,7358 (6.2) 4,7358 (2.3) 2,8276 (3.3) 2,9263 (5.3) 2,4782 (6.3) 2,177



**Keterangan tabel untuk posisi *hollow*:**

(2) 2,599 : atom Ge berikatan dengan atom C nomor 2 dengan panjang ikatan 2,599

**Lampiran 5.** Note pad hasil optimasi SWCNT (8.0)

HyperChem log start -- Fri Feb 17 22:53:58 2017.

Single Point, SemiEmpirical, molecule = C:\Users\NOLA\Documents\bridge\45.hin.

AM1

Convergence limit = 0,0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

RHF Calculation:

Singlet state calculation

Number of electrons = 276

Number of Double Occupied Levels = 138

Charge on the System = 0

Total Orbitals = 276

**ENERGIES AND GRADIENT**

Total Energy = -195144.8075441 (kcal/mol)

Total Energy = -310.983007436 (a.u.)

Binding Energy = -10812.0541961 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy = -184332.7533480 (kcal/mol)

Electronic Energy = -2769273.4911995 (kcal/mol)

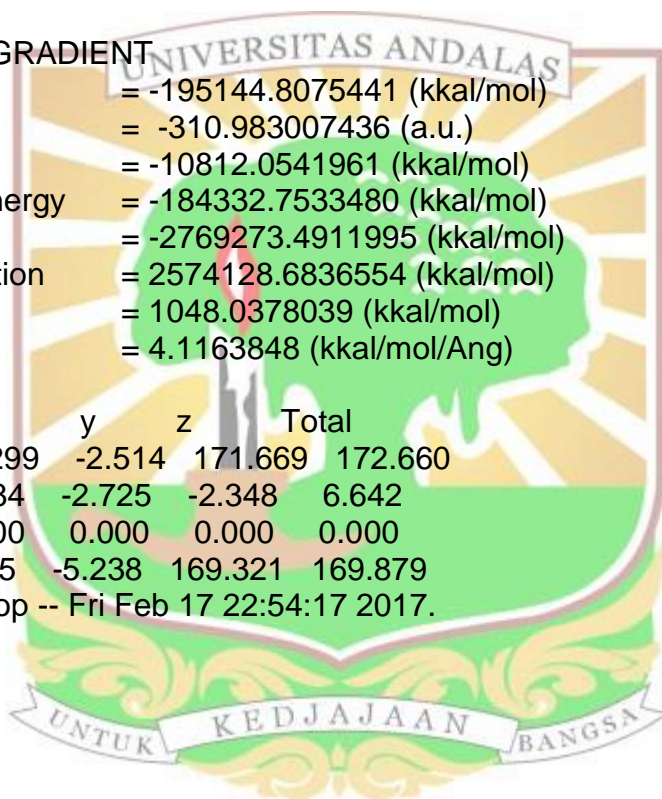
Core-Core Interaction = 2574128.6836554 (kcal/mol)

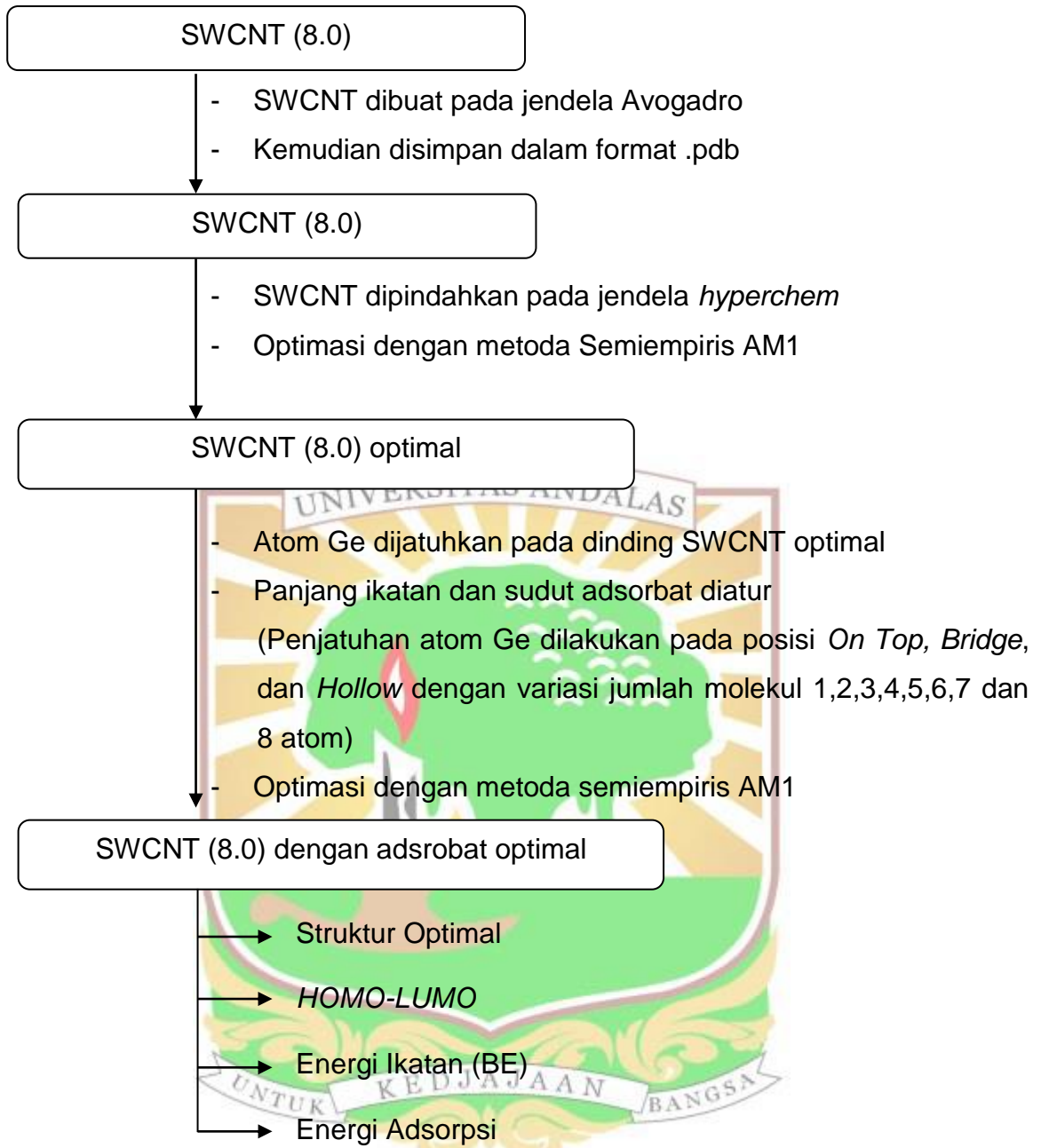
Heat of Formation = 1048.0378039 (kcal/mol)

Gradient = 4.1163848 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	18.299	-2.514	171.669	172.660
sp Hybrid	-5.584	-2.725	-2.348	6.642
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	12.715	-5.238	169.321	169.879

HyperChem log stop -- Fri Feb 17 22:54:17 2017.



**Lampiran 6. Prosedur Kerja**

## Biodata Penulis



## Data Pribadi

Nama lengkap : Sri Nola Vebiola  
 Tempat dan tanggal lahir : Padang, 28 Januari 1995  
 Jenis kelamin : Perempuan  
 No. Telp/HP : 081378056454  
 Asal SMA : SMAS Pertiwi 1 Padang  
 Orang tua  
     Nama ayah : Syafril  
     Pekerjaan : Nelayan  
     Nama ibu : Lisma  
     Pekerjaan : -  
 Anak ke : 5 dari 5 bersaudara  
 Alamat rumah : Katanahan Rt 01 RW 09 Kayu Kalek  
     Kota : Padang  
     Kode pos : 25171  
     Telepon :  
     Email : Vebiolasi@gmail.com  
 Pengalaman organisasi : HIMKA, KCI  
 Visi Hidup : Jadilah diri sendiri yang dapat membanggakan bagi orang lain

