I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang Penelitian

Nanotube adalah material berbentuk silinder dengan ketebalan kulit silinder kurang dari 100 nm. Salah satu yang terkenal adalah *carbon nanotube* dengan kulit silinder berupa satu atau beberapa lapis atom carbon. Para ilmuwan tertarik kepada *carbon nanotube* dikarenakan sifat-sifat elektronik, mekanik, termal dan sifat adsorpsinya. Sejak ditemukannya *carbon nanotube*, telah banyak penelitian dilakukan terutama mengenali sifat adsorpsi, sifat elektronik, mekanik dan termal.

Kiralitas *carbon nanotube* ditunjukkan dengan (n,m) . *Carbon nanotube* dengan indeks kiral $(n, 0)$ disebut dengan *zigzag*, dan nanotube dengan indeks kiral (n,n) disebut *armchair*¹. *Carbon nanotube* berdinding tunggal dapat bersifat konduktor atau semikonduktor tergantung pada arah penggulangan dan jari-jarinya². *Carbon nanotube* (CNT) adalah material nanostruktur dengan sifat fisika yang unik. Salah satu sifat tersebut adalah sifat elektronik, yang mana CNT dapat bersifat logam atau semikonduktor bergantung pada diameter dan kiralitasnya. Material ini sangat diminati untuk diteliti secara teoritis maupun eksperimen karena CNT merupakan material elektronik yang sangat menjanjikan untuk aplikasi non elektronik³.

Berdasarkan jumlah dindingnya, CNT secara umum dapat dikelompokkan menjadi dua macam, yaitu CNT berdinding tunggal (SWCNT) dan CNT berdinding banyak (MWCNT)³. Selain itu CNT banyak diteliti karena sifat adsorpsinya yang bagus³. Penelitian dengan menggunakan carbon nanotube telah banyak dilakukan oleh peneliti-peneliti sebelumnya seperti *Joselevich* yang telah meneliti mengenai struktur elektronik dan reaktivitas kimia pada carbon nanotube⁴. Carbon nanotube juga dapat melakukan adsorpsi terhadap molekul gas atau polutan, Zhao telah meneliti mengenai adsorpsi molekul gas SO₂ pada carbon nanotube sebelumnya dengan menggunakan metoda DFT (Density Functional Theory)⁵.

Gas alam telah banyak digunakan sebagai bahan bakar maupun bahan baku industri, oleh karena itu distribusi gas alam merupakan bagian yang penting dalam menunjang kegiatan industri saat ini. Hasil pembakaran gas alam akan menghasilkan polutan seperti, NO_x, SO_x, CO, CO₂. Dengan permukaan spesifik yang besar dan dimensi rendah, CNT memiliki keunggulan yang unik dalam aspek mendeteksi

polutan lingkungan dan telah banyak digunakan di sensor gas kimia, seperti NH_3 dan NO_2 ⁶. Nanotube dengan ukuran kecil, stabilitas fisik dan sensitivitas sifat listrik digunakan untuk adsorpsi seperti N_2 dan O_2 untuk digunakan dalam sensor gas⁷. Penelitian gas alam menghasilkan polutan seperti H_2S , CO , CO_2 , SO_2 . Salah satu cara untuk menghilangkan polusi tersebut adalah melakukan adsorpsi gas dengan molekul SWCNT, dan bagaimana adsorpsi gas oleh SWCNT bisa diketahui secara komputasi. Selain itu penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa adsorpsi atom-atom molekul dapat meningkatkan sifat elektronik dari SWCNT. Berdasarkan uraian maka dilakukan penelitian yang berjudul “**Studi Adsorpsi Molekul CO Pada Ujung Terbuka *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8,0) Menggunakan Metoda Semiempiris AM1**”

1.2. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang, maka permasalahan yang menjadi fokus penelitian ini adalah studi adsorpsi molekul CO pada SWCNT (8,0) menggunakan metoda AM1. Sehingga dapat mengetahui bagaimana interaksi, perubahan struktur molekul elektronik dari *Single Wall Carbon nanotube* (SWCNT) (8.0), selain itu juga mengetahui peran SWCNT terhadap molekul CO.

1.3. Tujuan penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan :

1. Mempelajari interaksi adsorpsi SWCNT ujung terbuka terhadap molekul CO (adsorpsi kimia, adsorpsi fisika dan desorpsi).
2. Mempelajari pengaruh adsorpsi molekul CO terhadap band gap (ΔE), energi ikatan (BE) dan energi adsorpsi SWCNT yang terbuka.
3. Mempelajari daya adsorpsi ujung terbuka SWCNT terhadap molekul CO.

1.4. Manfaat penelitian

Manfaat penelitian ini adalah :

1. Dapat mengetahui interaksi adsorpsi molekul CO dengan *Single Wall Carbon nanotube* (SWCNT).
2. Dapat memberikan informasi energi elektronik dan kekuatan energi adsorpsi SWCNT terhadap molekul CO
3. Memberikan informasi daya adsorpsi SWCNT terhadap molekul CO.