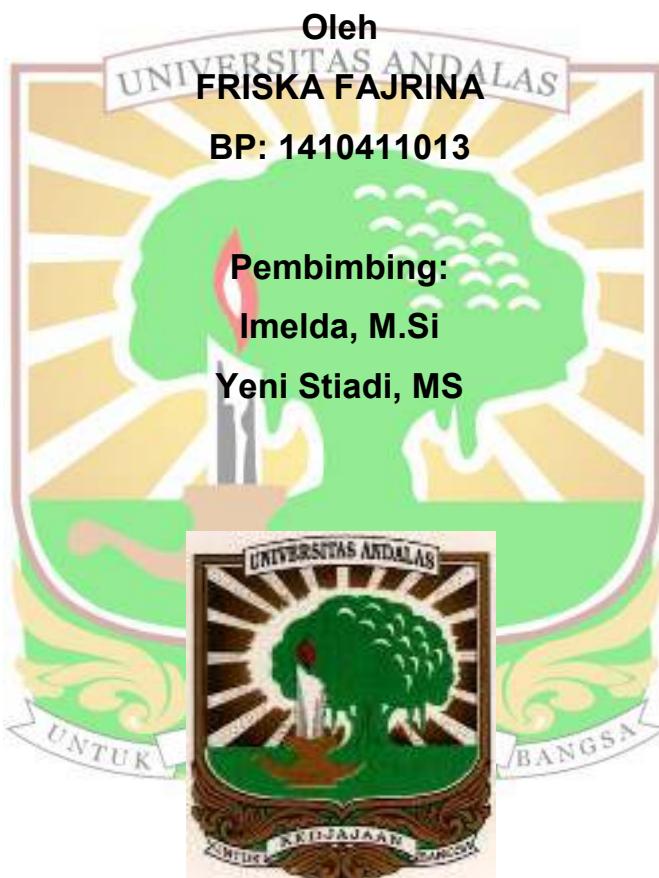


**ADSORPSI ATOM LITIUM PADA DINDING *SINGLE WALLED*
CARBON NANOTUBE (SWCNT) (8.0) MENGGUNAKAN METODE
SEMIEMPIRIS AM1**

SKRIPSI SARJANA KIMIA



**JURUSAN S1 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2018**

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

Oleh
FRISKA FAJRINA
BP: 1410411013



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

**JURUSAN S1 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2018**

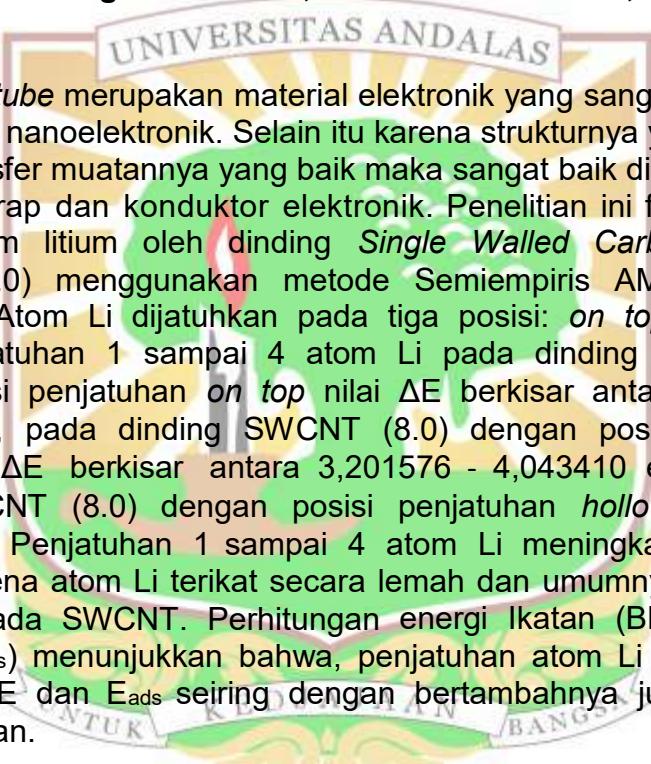
INTISARI

ADSORPSI ATOM LITIUM PADA DINDING *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) (8.0) MENGGUNAKAN METODE SEMIEMPIRIS

AM1

Oleh:

Friska Fajrina (BP: 1410411013)
Dibimbing oleh Imelda, M.Si dan Yeni Stiadi, MS

Carbon Nanotube merupakan material elektronik yang sangat menjanjikan untuk aplikasi nanoelektronik. Selain itu karena strukturnya yang berongga dan sifat transfer muatannya yang baik maka sangat baik digunakan untuk bahan penyerap dan konduktor elektronik. Penelitian ini fokus terhadap adsorpsi atom litium oleh dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0) menggunakan metode Semiempiris AM1 dari paket *Hyperchem*. Atom Li dijatuhkan pada tiga posisi: *on top*, *bridge*, dan *hollow*. Penjatuhan 1 sampai 4 atom Li pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *on top* nilai ΔE berkisar antara 2,279146 - 3,591840 eV, pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *bridge* nilai ΔE berkisar antara 3,201576 - 4,043410 eV dan pada dinding SWCNT (8.0) dengan posisi penjatuhan *hollow* 2,279148 - 3,827680 eV. Penjatuhan 1 sampai 4 atom Li meningkatkan nilai ΔE SWCNT, karena atom Li terikat secara lemah dan umumnya tidak terikat dengan C pada SWCNT. Perhitungan energi ikatan (BE) dan energi adsorbsi (E_{ads}) menunjukkan bahwa, penjatuhan atom Li menyebabkan penurunan BE dan E_{ads} seiring dengan bertambahnya jumlah atom Li yang dijatuhkan.

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

ABSTRACT

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

By:

**Friska Fajrina (BP: 1410411013)
Imelda, M.Si and Yeni Stiadi, MS**

Carbon nanotube is electronic material that is very promising for application of nano electronics. Furthermore, the hollow structure and nature of the transfer charge is very good to used for the adsorber material and electronic conductors. This research focus on lithium atoms by adsorption of Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT) (8.0) using semiempirical AM1 methods from hyperchem package. Li atoms were dropped on three positions: on top, bridge, and hollow. Adsorption 1-4 Li atoms on the walls of SWCNT (8.0), the value of ΔE (band gap) on top, bridge, and hollow are 2.279146 – 3.591840 eV, 3.201576 – 4.043410 eV, and 2.279148 – 3.827680 eV, respectively. The adsorption of 1-4 Li atoms increase the value of ΔE SWCNT, because of weak interaction and generally it is not interaction between Li atoms and SWCNT. The adsorption of Li atoms decrease BE and E_{ads} along with increasing the number of Li atoms were dropped.

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