

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

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh :

NURAZIZAH

Bp : 1410412057



PEMBIMBING :

IMELDA, M.Si

REFINEL, M.S

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

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

Oleh :
NURAZIZAH
Bp : 1410412057



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
2018

INTISARI

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

Oleh:

Nurazizah (1410412057)
Imelda, M.Si*, Refinel, M.S*
*Pembimbing

Teknologi nano saat ini merupakan bidang penelitian yang sangat diminati untuk dikaji secara lebih mendalam karena aplikasi teknologi nano yang mampu merambah ke berbagai aspek, seperti bidang elektronika, material, biologi, kimia, dan kedokteran. 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 *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) ujung terbuka menggunakan metode Semiempiris AM1 dari paket *Hyperchem*. Atom Li dijatuhkan 1 sampai 8 atom pada dua posisi: *on top* dan *bridge*. Atom Li berinteraksi secara kimia, fisika dan tidak berinteraksi dengan C pada SWCNT. Penjatuhan atom Li pada SWCNT ujung terbuka (8.0) dengan posisi penjatuhan *on top* nilai ΔE berkisar antara 3,32593 – 4,61221 eV, SWCNT ujung terbuka (4.4) dengan posisi penjatuhan *bridge* nilai ΔE berkisar antara 3,90642 - 4,54380 eV. Penjatuhan atom Li mampu meningkatkan daya hantar listrik dari SWCNT. Penjatuhan atom Li menyebabkan penurunan BE dan Eads seiring dengan bertambahnya jumlah atom Li yang dijatuhkan, menunjukkan daya ikat SWCNT per atom Li menurun dengan semakin banyaknya atom Li yang dijatuhkan.

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

ABSTRACT

LITHIUM ATOM ADSORPTION ON THE OPEN ENDED SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE (SWCNT) USING SEMIEMPIRICAL AM1 METHOD

By:

Nurazizah (1410412057)
Imelda, M.Si*, Refinel, M.S*
*Supervisor

Nanotechnology is a highly desirable field of research that is in great demand for more in depth study because of the application of nanotechnology that is able to penetrate to various aspects, such as electronics, materials, biology, chemistry, and medicine. In addition, because of its hollow structure and good charge transfer properties SWCNT, very well used for absorbent and electronic conductors materials. This research focus on lithium atoms were adsorbed by open end Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT) using semiempirical AM1 method from hyperchem package. Li atoms were dropped on two positions: *on top and bridge*. Li atoms were interacted chemically, physically and does not interact with C on SWCNT. Band gap (ΔE) value of a atoms were dropped on top position are 3,32593 – 4,61221 eV, SWCNT (4.4) with bridge dropping positions ΔE ranges from 3,90642 – 4,54380 eV. The dropping of Li atoms is able to increase the electrical conductivity of SWCNT. Li atoms decrease BE and Eads of SWCNT as the number of Li atoms dropped, indicating the SWCNT binding power per Li atom decreases as more Li atoms were dropped.

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