

INTISARI

STUDI INTERAKSI UJUNG TERBUKA *SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE* (SWCNT) DENGAN MOLEKUL NH_3

Oleh

Putri Amanda (1010412041)

Dibimbing oleh Imelda, M.Si dan Emdeniz, MS

Adsorpsi molekul pada *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) diketahui dapat merubah sifat elektronik dari SWCNT. Pada Penelitian ini di pelajari interaksi SWCNT ujung terbuka dengan molekul NH_3 . Penelitian mengenai interaksi SWCNT ujung terbuka (8.0) dan (5.5) dengan molekul NH_3 menggunakan metoda Semiempiris AM1 dari paket *Hyperchem* telah dilakukan. Molekul NH_3 mengalami interaksi secara fisika dan kimia pada SWCNT ujung terbuka. Sebagian molekul NH_3 di serap dan dilepaskan (desorpsi), selain itu juga terjadi disosiasi NH_3 . Bahkan penjatuhan pada posisi tertentu merubah struktur SWCNT ujung terbuka. Hasil penelitian menunjukkan bahwa penjatuhan molekul NH_3 tidak dapat merubah daya hantar listrik dari SWCNT ujung terbuka. Penjatuhan molekul NH_3 pada SWCNT ujung terbuka (8.0) didapatkan energi gap (E) pada range 2,409 – 3,2319 eV, sedangkan pada SWCNT ujung terbuka (5.5) energi gap (E) berada pada range 2,884 – 5,7519 eV. Perhitungan Energi Ikatan (BE) dan energi adsorpsi (E_{ads}) menunjukkan bahwa untuk kedua jenis SWCNT ujung terbuka, penjatuhan molekul NH_3 menyebabkan peningkatan BE dan E_{ads} seiring dengan bertambahnya jumlah NH_3 yang di jatuhkan. Penjatuhan NH_3 pada SWCNT ujung terbuka juga menyebabkan terbentuknya H_2 dan N_2H_4 . Hal ini menunjukkan bahwa SWCNT ujung terbuka yang dijatuhkan molekul NH_3 selain sebagai penyimpan NH_3 juga dapat berperan sebagai katalis dalam pembentukan H_2 dan N_2H_4 .

Kata kunci: Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT), NH_3 , AM1.

ABSTRACT

Interaction Studies Of An Open-Ended Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT) With NH₃ Molecules

By

Putri Amanda

Advised by Imelda, M.Si and Emdeniz, MS

Adsorption molecules of the open ended single walled Carbon nanotube (SWCNT) known can change the electronic properties of SWCNT. In this experiment, the interaction of open ended SWCNT with NH₃ molecules was studied. The experiment of the interaction of an open ended SWCNT (8.0) and (5.5) with NH₃ molecule by Semiempiris AM1 of HyperChem package has been done. NH₃ molecules experiencing physical and chemical interaction on open ended SWCNT. Most of molecules NH₃ was adsorbed and desorption, it also occurred dissociate of NH₃ and adsorbed at certain position changed the structures of an open ended SWCNT. The results showed that the adsorbed of NH₃ molecules can not modify the electrical conductivity of the open ended SWCNT. The range of energy gap for an open ended SWCNT (8.0) is 2,409 eV-3,2319 eV, and on the open ended SWCNT (5.5) is 2,884 eV -5,7519 eV. The calculation of bonding energy (BE) and energy adsorbs (E_{ads}) showed that for both types of an open ended SWCNT, adsorbed of NH₃ molecules caused BE and E_{ads} increase with increasing amounts of NH₃ in the drop. The adsorbed of NH₃ on open ended SWCNT also caused the formation of H₂, and N₂H₄. That results indicates an open ended of SWCNT being dropped as the keeper of the NH₃ molecules can also act as a catalyst in the formation of H₂, and N₂H₄.

Keyword: *Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT), NH₃, AM1.*