

## BAB I. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang Penelitian

Dimasa sekarang ini, penggunaan material berbasis dasar karbon sebagai adsorben molekul telah banyak menarik perhatian. Hal ini karena sifat adsorpsinya yang cukup bagus dibanding material lainnya. Material berbasis dasar karbon tersebut diantaranya grafena, lapisan grafit, dan material karbon yang berstruktur nano seperti Carbon nanotube<sup>[1]</sup>.

Carbon nanotube pertama kali ditemukan oleh pada tahun 1991<sup>[2-5]</sup>, merupakan material yang berasal dari susunan atom karbon yang berhibridisasi  $sp^2$  yang berikatan satu sama lainnya membentuk struktur sarang lebah (*honeycomb*)<sup>[4,6]</sup>. Carbon nanotube dianggap sebagai lembaran grafena yang menggulung membentuk silinder berukuran nano. Carbon nanotube dapat digunakan sebagai adsorben dari berbagai macam unsur dan senyawa kimia. Proses penyerapan suatu adsorbat pada Carbon nanotube tentu tidak berbeda banyak dengan sikloheksena maupun grafena<sup>[7]</sup>.

Sejak ditemukannya Carbon nanotube, banyak penelitian yang dilakukan, terutama mengenai sifat elektronik, mekanik dan termalnya yang luar biasa<sup>[8]</sup>. Carbon Nanotube berdinding tunggal dapat bersifat baik sebagai logam ataupun semikonduktor tergantung pada arah penggulangan (kiralitas) dan diameternya<sup>[9-12]</sup>. Kiralitas dari Carbon nanotube ditunjukkan dengan indeks kiral ( $C_n$ ), yang di tunjukan dengan  $(n,m)$ . Untuk nanotube karbon dengan indeks kiral  $(n,0)$  disebut dengan *zigzag*, dan nanotube dengan indeks kiral  $(n,n)$  disebut *armchair*<sup>[13-17]</sup>.

Selain perbedaan arah penggulangan dan diameter, perubahan sifat elektronik dari Carbon nanotube, dapat disebabkan oleh beberapa hal salah satunya yaitu akibat adanya adsorpsi molekul. Penelitian mengenai pengaruh adsorpsi suatu molekul terhadap sifat elektronik Carbon nanotube telah banyak dilakukan, yang menunjukkan adanya adsorpsi molekul pada *Single Walled Carbon nanotube (SWCNT)* ternyata berpengaruh terhadap sifat elektroniknya<sup>[18]</sup>. Beberapa peneltian melaporkan, adanya adsorpsi gas seperti  $O_2$ ,  $NO_2$ ,  $NH_3$  ternyata mengubah sifat konduktivitas listrik Carbon nanotube

secara drastis<sup>[19]</sup>. Diantaranya investigasi pengaruh adsorpsi gas O<sub>2</sub> pada dinding SWCNT berukuran kecil yang ternyata mengubah sifat elektroniknya secara signifikan<sup>[20]</sup>, investigasi sifat elektronik dari SWCNT (*armchair* (5.5) (10,10) dan *zigzag* (10.0) (17.0) dengan adanya adsorpsi beberapa molekul gas ( NO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, Ar)<sup>[21]</sup> pada dinding SWCNT, selain itu juga telah dilakukan optimasi terhadap adsorpsi gas Nitrogen pada dinding Carbon nanotube (*armchair* (4.4) dan *zigzag* (5.0)<sup>[22]</sup>, dan adsorpsi H<sub>2</sub>O mempengaruhi sifat elektronik dari SWCNT ujung terbuka ( *armchair* (5.5))<sup>[2]</sup>.

Seperti terlihat pada penelitian - penelitian diatas, dan juga dari penelusuran yang telah dilakukan, studi mengenai adsorpsi gas pada SWCNT dan pengaruhnya terhadap sifat elektroniknya telah banyak dilakukan. Namun, studi yang dilakukan lebih berfokus pada fungsi dinding Carbon nanotube tersebut, dimana perubahan sifat elektronik disebabkan karena adsorpsi molekul pada dinding Carbon nanotube. Selain itu Carbon nanotube diketahui memiliki reaktivitas yang berbeda pada bagian dinding dan ujung terbukanya, dan penelitian menggunakan adsorbat NH<sub>3</sub> masih belum banyak dilakukan dengan jumlah molekul yang lebih dari satu molekul.

Berdasarkan uraian diatas, maka penulis tertarik untuk melakukan penelitian yang berjudul "Studi Interaksi Ujung Terbuka *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) dengan Molekul NH<sub>3</sub>".

## 1.2 Perumusan Masalah

Mengingat luasnya ruang lingkup penelitian tentang Carbon Nanotube dan  $\text{NH}_3$  maka permasalahan akan dibatasi demi terarahnya kegiatan penelitian. Dari latar belakang, maka yang menjadi permasalahan dari penelitian ini antara lain :

1. Bagaimana interaksi SWCNT ujung terbuka dengan molekul  $\text{NH}_3$
2. Bagaimana pengaruh interaksi molekul  $\text{NH}_3$  terhadap energi gap (  $E$ ), energi Ikatan (BE) dan energi adsorpsi SWCNT ujung terbuka.
3. Bagaimana pengaruh perbedaan kiralitas dari SWCNT ujung terbuka yang digunakan terhadap sifat daya hantar listrik dari SWCNT ujung terbuka
4. Bagaimana peran SWCNT ujung terbuka terhadap molekul  $\text{NH}_3$

## 1.3 Tujuan penelitian

Tujuan penelitian Ini adalah

1. Mempelajari bagaimana interaksi SWCNT ujung terbuka dengan molekul  $\text{NH}_3$
2. Mempelajari pengaruh interaksi molekul  $\text{NH}_3$  terhadap struktur, energi gap (  $E$ ) dan energi Ikatan (BE) dan energi adsorpsi SWCNT ujung terbuka.
3. Mempelajari pengaruh perbedaan kiralitas dari SWCNT ujung terbuka terhadap terhadap sifat daya hantar listrik SWCNT ujung terbuka.
4. Mempelajari peran SWCNT ujung terbuka terhadap molekul  $\text{NH}_3$

## 1.4 Manfaat penelitian

Adapun manfaat penelitian ini adalah :

1. Memberikan informasi pengaruh interaksi molekul  $\text{NH}_3$  pada struktur SWCNT ujung terbuka.
2. Memberikan informasi pengaruh adsorpsi gas  $\text{NH}_3$  pada energi gap (  $E$ ) dan energi Ikatan (BE) dan energi adsorpsi SWCNT ujung terbuka.
3. Memberikan informasi pengaruh perbedaan kiralitas dari SWCNT terhadap sifat daya hantar listrik SWCNT ujung terbuka.
4. Mengetahui peran SWCNT ujung terbuka terhadap molekul  $\text{NH}_3$