

ADSORPSI ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR
DENGAN METODA CALZAFERRI

Skripsi Sarjana Kimia

Oleh :

GATOT SUSENO

01 132 020



JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2006

ABSTRAK

ADSORPSI ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR $C_{24}H_{12}$ DENGAN METODA CALZAFERRI

Oleh:

GATOT SUSENO

Pembimbing Prof.Dr. Theresia Sita Kusuma, MSc dan Emdeniz, MS

Telah dilakukan penelitian tentang adsorpsi atom H yang mendatangi permukaan grafit planar $C_{24}H_{12}$ dengan jumlah atom 36. Penelitian ini dilakukan menggunakan metoda Calzaferri dengan bantuan komputer Pentium 4 2800 MHz 256 Mb. Atom H diadsorpsi pada permukaan grafit dengan berbagai posisi jatuh yaitu enam posisi untuk sebuah atom H mendatangi permukaan, empat posisi untuk dua buah atom H yang mendatangi permukaan dan satu posisi untuk tiga buah atom H mendatangi permukaan. Hasil penelitian memperlihatkan bahwa atom H yang mendatangi permukaan grafit teradsorpsi dengan baik oleh permukaan grafit tersebut. Binding energi / BE(H) pada permukaan grafit yaitu -13,11993 s/d -13,86850eV yang berarti grafit memberikan daya adsorpsi yang besar terhadap atom H. Model adsorpsi yang dihasilkan dari adsorpsi atom H / atom-atom H pada permukaan grafit memperlihatkan bahwa grafit ternyata menyerap / menyimpan atom H. Dan untuk nilai ΔE yang merupakan selisih dari E_{HOMO} dan E_{LUMO} , dengan adanya atom H yang diadsorpsi sifat grafit meningkat dari semi konduktor menjadi konduktor.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Sebagai sumber daya alam tidak dapat diperbaharui maka cadangan minyak bumi kian menyusut. Sementara itu kebutuhan dunia akan minyak bumi terus meningkat setiap tahunnya. Salah satu faktanya adalah semakin banyaknya negara yang terjun dalam industri mobil. Untuk mencari bahan bakar alternatif beragam penelitianpun dilakukan. Pilihan terbaik tampaknya jatuh kepada hidrogen sebagai bahan bakar pengganti. Penggantian ini memiliki manfaat yang besar yaitu dapat mengurangi polusi, karena gas hidrogen dapat dibakar (dikombinasi dengan oksigen) untuk mengeluarkan energi dan menghasilkan air tanpa bahan pengotor. Tapi ada satu hambatan, yaitu tidak ada sarana untuk pengendara agar bisa mendapatkan hidrogen yang disimpan dengan aman.⁽¹⁾

Menurut Tachikawa (2005), grafit merupakan senyawa karbon yang mempunyai struktur lapisan. Berbagai macam spesies kimia dapat diserap/dimasukkan ke dalam lapisan ini. Karakter ini telah diaplikasikan pada material yang mempunyai kutub positif seperti baterai sekunder litium. Baterai ini mempunyai gaya elektromotoris yang tinggi dan rapat energinya tinggi.⁽²⁾

Penyerapan hidrogen pada material karbon sangat banyak dipelajari dalam penelitian, seperti dalam teknologi semikonduktor dan material penyimpanan hidrogen. Secara umum, atom H diserap oleh permukaan grafit yang planar membentuk ikatan jembatan satu, dua, dan tiga dengan atom C. Sifat karbon yang dapat menyerap logam alkali memberikan sumbangan yang besar pada material karbon dengan struktur nano. Adanya logam-logam alkali pada permukaan grafit tersebut dapat memperbesar penyimpanan gas H₂ oleh material grafit. Tetapi pada penelitian berikutnya dibuktikan kesimpulan diatas salah, sebab logam-logam alkali tersebut menyerap uap air dari udara, sehingga jumlah H₂ yang diserap menjadi lebih banyak.⁽³⁾

Zhu (2005), mempelajari perbedaan penyerapan atom H dan atom-atom dari logam Alkali pada permukaan grafit yang planar. Zhu mendapatkan atom-atom logam alkali diserap dengan ikatan jembatan tiga, dan atom H jembatan satu pada grafit. Karena atom H lebih elektronegatif daripada karbon, H cenderung membentuk ikatan

kovalen dengan C. Logam alkali yang mempunyai keelektronegatifan lebih rendah dari C cenderung di adsorpsi pada daerah yang mempunyai potensial elektronegatif yang tinggi.⁽⁴⁾

Dalam penelitian ini peneliti berasumsi, karbon nanotube dibentuk dari penggabungan lapisan-lapisan grafit. Akibatnya sifat kimia grafit diperkirakan tidak berbeda banyak dari karbon nanotube. Song (2005), mempelajari penyerapan hidrogen pada dinding karbon nanotube tunggal dari berbagai macam diameter. Song mendapatkan, adanya ketergantungan yang kuat antara energi penyerapan H₂ dengan diameter nanotube. Dari hasil spektrum IR diindikasikan adanya interaksi kuat antara H₂ dan nanotube.⁽⁵⁾

Penulis tertarik melakukan penelitian adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar yang terdiri dari 24 atom C dan 12 atom H (C₂₄H₁₂ satu lapisan). Dalam penelitian ini yang akan diamati adalah model adsorpsi atom H / atom-atom H pada permukaan grafit pada berbagai posisi jatuh dengan optimasi 3D. Optimasi dilakukan dengan menggunakan program Calzaferri yang dijalankan dengan bantuan komputer. Dalam penelitian ini akan diamati 11 posisi jatuh atom H, yaitu :

1. Enam posisi untuk sebuah atom H mendarangi permukaan
2. Empat posisi untuk dua buah atom H mendarangi permukaan
3. Satu posisi untuk tiga buah atom H mendarangi permukaan

1.2. Perumusan Masalah

Pada penelitian ini dirumuskan bagaimana adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar satu lapisan yang terdiri dari 24 atom C dan 12 atom H dan pada ruang antar lapis.

1.3. Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan meramalkan model adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar satu lapisan yang terdiri dari 24 atom C dan 12 atom H dan pada ruang antar lapisnya.

DAFTAR V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Dari data yang didapat, setelah dianalisa seperti yang diuraikan pada diskusi maka dapat disimpulkan :

1. Ikatan antara atom H_{2d} dengan atom pada permukaan grafit yaitu ikatan van der Waals dengan panjang ikatan antara 1,2190 – 2,0415 Å.
2. Atom H / Atom-Atom H yang mendatangi permukaan grafit planar $C_{24}H_{12}$ satu lapisan akan teradsorpsi dengan baik dengan nilai BE(H) sekitar -13,11993 s/d -13,86850 eV.
3. Ada beberapa model adsorpsi atom H / atom-atom H pada permukaan grafit planar $C_{24}H_{12}$, dimana memperlihatkan bahwa grafit tersebut lebih efektif dalam menyerap / menyimpan atom H.
4. Dengan adanya adsorpsi atom H / atom-atom H pada permukaan grafit planar $C_{24}H_{12}$ umumnya akan meningkatkan sifat grafit dari semi konduktor menjadi konduktor.

5.2. Saran

Dari hasil yang diperoleh maka dapat disarankan :

1. Disarankan pada penelitian selanjutnya untuk meneliti adsorpsi atom lain pada permukaan grafit planar seperti logam alkali, apakah grafit juga bisa menyimpan logam alkali?
2. Disarankan untuk mencoba metoda lain dalam menentukan adsorpsi atom H / atom-atom H pada grafit planar satu lapisan

DAFTAR PUSTAKA

1. <http://www.yahoo.com/Hidrogen> Bahan Bakar Masa Depan.html
2. Tachikawa, Hiroto. *Diffusion Dynamics of The Li⁺ Ion on a Model Surface of Amorphous Carbon : A Direct Molecular Orbital Dynamics Study*. J.Phys. Chem B. 109. No.27. 2005 Hal 6789 -6805.
3. Park, Kyung A. *Adsorption of Atomic Hydrogen on Single-Walled Carbon Nanotubes*. J.Phys.Chem.B 109. No.18. 2005. Hal : 8967-8972.
4. Zhu, Zhong Hua. *Why H atom Prefers The On-Top Site Alkali Metal For The Middle Hollow Site on The Basal Planar of Graphite*. J.Phys.Chem B.106. No.5. 2005. Hal 7923 – 7927
5. Cheng, Hansong. *Molecular Dynamics Simulation on The Effect of Diameter and Chirality on Hydrogen adsorption in Single Walled Carbin Nanotubes*. J.Phys.Chem B,109. NO.8. 2005. Hal 3780 – 3786
6. <http://wikipedia.encyclopedia.the freedictionary. com /graphite>.
7. <http://wikipedia.encyclopedia,the freedictionary. com /hydrogen>
8. Bowser, J.R. *Inorganic Chemistry*, Cole Publishing Company, Pasific Grove, California. 1993. Hal 204 - 210
9. Kusuma, T.S. *Kimia Kuantum dan Statistik*. FMIPA. Universitas Andalas. Padang. 1989. Hal : 30-32.
10. Kusuma, T.S. *Modifikasi Pembelajaran Mata Ajaran Pengantar Kimia Fisik Teori*. FMIPA. Universitas Andalas. Padang. 2004.
11. M.Noer, Mansdjoeriah. *Ikatan dan Struktur Molekul*. Depdikbud. Bandung.
12. P.G. Steerer and Martha .W. *The Merck Index*, 8th ed, Published By: Merck & Co.,Inc Rahway,N.J.,USA.1968. Hal : 4810.

MILIK
UPT PERPUSTAKAAN
UNIVERSITAS ANDALAS