

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

**Skripsi Sarjana Kimia**

**Oleh**

**MIRA DESMAWATI**  
**No. BP 02 132 005**



**JURUSAN KIMIA**  
**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2006**

## ABSTRAK

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

Oleh

Mira Desmawati

Sarjana Sain (SSi) dalam bidang Kimia Fakultas MIPA Universitas Andalas

Dibimbing oleh Prof. Dr. Theresia Sita Kusuma, MSc dan Emdeniz, MS

Adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar satu lapisan ( $C_{24}Li_{12}$ ) dipelajari dengan program Calzaferri. Program ini dijalankan dengan komputer Pentium IV yang memorinya 512 MB. Hasil perhitungan memperlihatkan : setiap atom H yang mendatangi lapisan grafit diserap oleh atom karbon membentuk kompleks permukaan-H dengan posisi C-H sedikit condong terhadap lapisan. Energi ikatan per atom H (BE/H) dan panjang ikatan C-H dari kompleks ini berkisar dari (-8,67186) ke (-12,47238) eV dan dari 1,1987 ke 1,2410 Å. Nilai BE/H yang negatif mencerminkan bahwa adsorpsi kimia ini bersifat endoterm. Atom H yang diadsorpsi oleh permukaan grafit menurunkan energi celah permukaan tersebut : dari 0,37965 menjadi 0,12192 – 0,27334 eV.

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Menurut Tachikawa (2005), grafit merupakan senyawa karbon yang mempunyai struktur lapisan. Berbagai macam spesies kimia dapat diserap oleh lapisan ini. Karakter ini telah diaplikasikan pada material berkutub positif, seperti baterai sekunder litium. Baterai ini mempunyai gaya elektromotoris yang tinggi dan rapat energi tinggi.<sup>[1]</sup>

Di dunia ini permasalahan bahan bakar minyak pada kendaraan menjadi perhatian pemerintah dan peneliti. Buktinya para peneliti berusaha mengganti bahan bakar kendaraan dengan hidrogen. Penggantian ini memiliki manfaat yang besar yaitu dapat mengurangi polusi, karena gas hidrogen dapat dibakar atau dikombinasi dengan oksigen dalam bahan bakar untuk mengeluarkan energi dan menghasilkan air tanpa bahan pengotor. Hambatan yang muncul adalah tidak ada sarana yang tersedia bagi pengendara agar dapat memperoleh hidrogen yang cocok dan aman. Serta prosedur yang tidak seragam untuk penyimpanan bahan bakar dalam tangki gas mobil (kendaraan).<sup>[2]</sup>

Penyerapan hidrogen pada material karbon sangat banyak diteliti, 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. Adanya logam-logam alkali pada permukaan grafit tersebut dapat memperbesar penyimpanan gas H<sub>2</sub> oleh material grafit. Akan tetapi pada penelitian berikutnya dibuktikan kesimpulan di atas salah, sebab logam-logam alkali tersebut yang menyerap uap air dari udara, diduga menyerap lebih banyak gas H<sub>2</sub>.<sup>[3]</sup>

Zhu (2005), mempelajari penyerapan atom H dan logam alkali pada permukaan grafit yang planar. Zhu mendapatkan atom logam alkali diserap dengan ikatan jembatan tiga, dan atom H jembatan satu pada grafit. Karena atom H lebih elektronegatif daripada logam alkali (Li), 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 yang dikenal dengan lokasi "middle hollow site" (lokasi adsorpsi di atas suatu heksagonal) pada permukaan grafit.<sup>[4]</sup>

Banyak peneliti berasumsi, karbon nanotubes dibentuk dari penggulungan lapisan-lapisan grafit, jadi sifat kimia grafit diperkirakan tidak berbeda banyak dari karbon nanotubes. Song (2005), mempelajari penyerapan hidrogen pada dinding karbon nanotubes tunggal dari berbagai macam diameter. Peneliti mendapatkan, adanya ketergantungan yang kuat antara energi penyerapan  $H_2$  dengan diameter nanotube. Umumnya energi penyerapan bertambah dengan adanya pengecilan diameter nanotube. Dari hasil spektrum IR diindikasikan adanya interaksi kuat antara  $H_2$  dan nanotube.<sup>[5]</sup>

Penelitian ini tentang adsorpsi atom H pada permukaan grafit  $C_{24}H_{12}$  satu lapisan, yang semua atom H nya diganti dengan atom Li yaitu  $C_{24}Li_{12}$  (Gambar 7). Disini satu, dua, sampai tiga buah atom H dijatuhkan tegak lurus ke permukaan grafit satu lapisan tersebut. Model adsorpsi atom H pada permukaan diamati dengan optimasi 3D yang dilakukan secara manual. Optimasi dilakukan dengan menggunakan program Calzaferri, yang dijalankan dengan bantuan komputer. Dalam penelitian ini diamati 15 posisi jatuh atom H, yaitu :

- Tujuh posisi untuk sebuah atom H mendatangi permukaan
- Tujuh posisi untuk dua buah atom H mendatangi permukaan
- Satu posisi untuk tiga buah atom H mendatangi permukaan.

Yang akan diamati dalam perhitungan adalah model adsorpsi atom H pada permukaan  $C_{24}Li_{12}$  planar, kemudian ditentukan energi ikatan atom H pada permukaan (BE(H)), serta sifat penghantar listrik sistem (AF).

## 1.2. Perumusan Masalah

Penelitian dapat dirumuskan beberapa masalah sebagai berikut :

1. Bagaimana adsorpsi atom H pada permukaan grafit satu lapis.
2. Bagaimana pengaruh atom Li pada permukaan grafit terhadap adsorpsi hidrogen.

### 1.3. Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini yaitu :

1. Meramalkan model adsorpsi atom H pada permukaan grafit  $C_{24}Li_{12}$  yang terdiri dari 24 atom C dan 12 atom Li satu lapisan.
2. Mencari korrelasi antara model adsorpsi atom H pada permukaan  $C_{24}H_{12}$  dengan jumlah atom H yang disubstitusi oleh Li.

## BAB V

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 5.1 Kesimpulan

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

1. Atom H yang mendatangi permukaan grafit  $C_{24}Li_{12}$  akan teradsorpsi kuat dengan BE sekitar  $-12,24638$  eV s/d  $-12,47238$  eV.
2. Pada umumnya ikatan antara atom  $H_{ad}$  dengan atom pada permukaan grafit cukup kuat dengan panjang ikatan antara  $1,1987 \text{ \AA} - 2,0754 \text{ \AA}$ .
3. Daya adsorpsi untuk tiga atom H yang mendatangi permukaan grafit  $C_{24}Li_{12}$  lebih lemah dibandingkan dua atom H yang mendatangi permukaan grafit dan lebih lemah lagi dari pada satu atom H yang mendatangi permukaan grafit.
4. Dengan adanya adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar  $C_{24}Li_{12}$  satu lapisan akan meningkatkan sifat daya hantar listrik grafit.
5. Grafit planar  $C_{24}Li_{12}$  memiliki daya adsorpsi atom H lebih lemah dibandingkan dengan grafit  $C_{24}H_{12}$ . Karena semakin banyak jumlah atom H dari grafit planar  $C_{24}H_{12}$  yang disubstitusi dengan atom Li maka nilai BE(H) akan semakin kecil, sehingga daya adsorpsi atom H oleh permukaan grafit akan semakin lemah.

#### 5.2 Saran

Dari hasil yang diperoleh maka dapat disarankan :

1. Disarankan pada penelitian selanjutnya untuk mempelajari adsorpsi molekul lain pada permukaan grafit planar, apakah grafit juga bisa menyimpan molekul lain.
2. Disarankan untuk mencoba metoda lain dalam menentukan adsorpsi atom H pada grafit planar satu lapisan atau dua lapisan.

## DAFTAR KEPUSTAKAAN

1. Tachikawa, H. *Diffusion Dynamics of the Li<sup>+</sup> Ion on a Model Surface of Amorphous Carbon : A Direct Molecular Orbital Dynamics Study*, J.Phys. Chem. B,109. No.27. 2005. pp 13255 – 13362.
2. [www.cen.-online.org](http://www.cen.-online.org). Agustus 22,2005. *Filling Up Hydrogen*. p 42 - 47.
3. Park, K.A. *Adsorption of Atomic Hydrogen on Single-Walled Carbon Nanotubes*, J.Phys Chem. B, 109. No. 18. 2005. pp 8967 – 8972.
4. Zhu, et al. *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. p7923 – 7927.
5. Cheng, H.S. *Molecular Dynamics Simulations on the Effect Metal of Diameter and Chirality on Hydrogen Adsorption in Single Walled Carbon Nanotubes*, J.Phys. Chem. B,109.No.8. 2005.
6. Bowser, J.R. *Inorganic Chemistry*, Cole Publishing Company, Pasific Grove, California. 1993.
7. <http://id.wikipedia.org/wiki/Graphite.02/05/06.20:17:03>. p 1-3.
8. <http://mineral.galleries.com/minerals/elements/Graphite.21/05/06.20:18:56>.
9. <http://id.wikipedia.org/wiki/Hidrogen.21/05/06.21:31:14>. p1-2.
10. Steerer, et al. *The Merck Index*, 8<sup>th</sup> ed. Published by : Merck and Co. Inc. Rahway, N. J, USA. 1968.
11. <http://id.wikipedia.org/wiki/Litium.21/05/06.21:36:00>. p1-2.
12. <http://id.wikipedia.org/wiki/Karbon.21/05/06.22:13:59>. p1-2.
13. Kusuma, T.S. *Modifikasi Pembelajaran Mata Ajaran Pengantar Kimia Fisik Teori*. FMIPA, Universitas Andalas Padang. 2004.
14. Mansjoeriah M.N. *Ikatan dan Struktur Molekul*. Depdikbud. Bandung. 1993.
15. Kusuma. T.S. *Kimia Kuantum Dan Statistik*. FMIPA, Universitas Andalas Padang. 1989. Hal: 30-32.
16. Suseno, G. *Adsorpsi Atom H pada Permukaan Grafit Planar C<sub>24</sub>H<sub>12</sub> dengan Metoda Calzaferri*, Skripsi Sarjana Kimia, FMIPA, Universitas Andalas Padang. 2006.