

**ADSORPSI ATOM HIDROGEN PADA GRAFENA YANG DIJENUHKAN
DENGAN HIDROGEN MENGGUNAKAN PROGRAM AM1 DARI
PAKET HYPERCHEM**

Skripsi Sarjana Kimia

Oleh

Evi Desriana
No. BP 03 132 078



**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2007**

ABSTRAK

ADSORPSI ATOM HIDROGEN PADA GRAFENA YANG DIJENUHKAN DENGAN HIDROGEN MENGGUNAKAN PROGRAM AMI DARI PAKET HYPERCHEM

Oleh

Evi Desriana

Sarjana Sains (S.Si) dalam bidang Kimia Fakultas MIPA
Universitas Andalas

Dibimbing oleh Prof. Dr. Theresia Sita Kusuma, M.Sc dan Yeni Stiadi, MS

Adsorpsi atom-atom hidrogen pada grafena yang dijenuhkan dengan hidrogen ($C_{24}H_{12}$) dipelajari dengan menggunakan program AMI dari paket Hyperchem. Program ini dijalankan komputer Intel Celeron IV Processor 2.13 GHz, 112 MB of RAM. Hasil kalkulasi dan pengamatan model struktur optimal menunjukkan bahwa setiap atom hidrogen (H_{ads}) yang dijatuhkan pada permukaan grafena akan diserap dan membentuk struktur jembatan satu dengan posisi $C-H_{ads}$ *tilted* terhadap lapisan. H_{ads} ini diadsorpsi secara kimia dan eksotermal, yang mengubah hibridisasi atom karbon dari sp^2 menjadi sp^3 . Posisi penjatuhan H_{ads} sangat mempengaruhi nilai ΔE sistem dan panjang ikatan yang terbentuk antara $C-H_{ads}$. Penjatuhan 2 atom H_{ads} secara serentak pada permukaan grafena dengan jarak kedua atom H_{ads} merupakan kelipatan genap jumlah cincin C-C, akan memberikan nilai ΔE yang kecil. Dan nilai ΔE ini akan semakin kecil dengan bertambahnya jumlah cincin. Sedangkan penjatuhan 2 atom H_{ads} secara serentak pada permukaan grafena berjarak kelipatan ganjil jumlah cincin C-C maka panjang ikatan yang terbentuk antara atom C dengan atom H_{ads} yang diadsorpsi akan sama.

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Beberapa tahun ini, perkembangan nanoteknologi melaju sangat cepat. Teknologi ini diprediksikan oleh futuris Toffler dalam sebuah makalahnya sebagai "Teknologi 50 Tahun Mendatang". Kenyataan ini makin diperkuat oleh sikap dari berbagai negara maju yang memberikan perhatian lebih terhadap nanoteknologi¹.

Di bidang ilmu material, para ahli secara aktif menggali dan mengembangkan material baru dalam rangka menunjang perkembangan nanoteknologi di bidang lain. Dalam kurun waktu 10 tahun ini saja, telah dikenal beberapa material baru, seperti *carbon nanotube*, *fullerene*, dan lain-lain, yang ketika pertama ditemukan sempat menghebohkan para ahli karena karakteristiknya yang unik dan fantastis².

Seiring dengan perkembangan nanoteknologi ini, grafena (grafena adalah nama yang diberikan pada lapisan atom karbon tunggal yang memenuhi struktur *benzene-ring*, dan secara luas digunakan untuk menggambarkan banyak material *carbon-based*) dianggap sebagai material yang sedang bersinar dalam ilmu pengetahuan material dan ilmu fisika. Grafena merupakan pembentuk *carbon nanotube* dan *fullerene*. *Carbon nanotube* dianggap sebagai lembaran grafena yang menggulung membentuk silinder berukuran nano, sedangkan *fullerene* dianggap sebagai lembaran grafena yang menggulung membentuk seperti bola berukuran nano³.

Grafena ini dapat diatur sifat daya hantar listriknya. Grafena dapat dibuat menjadi bahan isolator, semikonduktor, dan konduktor dengan cara memasukkan atom ke dalam struktur grafena tersebut, dimana grafena ini memiliki daya adsorpsi terhadap beberapa unsur kimia. Grafena mampu mengabsorpsi hidrogen dalam jumlah banyak³. Adsorpsi kimia hidrogen oleh grafena ini dapat dijelaskan dengan metode semiempiris standar dan DFT⁴. Hal inilah yang mendorong penulis untuk mengetengahkan judul "*Adsorpsi Hidrogen pada Grafena yang Dijenuhkan dengan Hidrogen Menggunakan Program AM1 dari Paket Hyperchem*". Pemodelan grafena dan perhitungan energinya dilakukan secara komputasional.

1.2 Tujuan

Penelitian ini bertujuan untuk :

1. Mengetahui interaksi yang terjadi pada lapisan grafena tunggal, planar yang dijenuhkan dengan hidrogen bila dijatuhi beberapa atom hidrogen.
2. Mengetahui hubungan posisi penjatuhan atom hidrogen pada grafena dengan ΔE sistem dan panjang ikatan C-H

1.3 Perumusan Masalah

Demi terarahnya kegiatan penelitian ini, maka permasalahan yang akan dibahas dibatasi, mengingat luasnya ruang lingkup penelitian tentang grafena dan hidrogen. Adapun masalah yang dibahas adalah :

1. Penelitian hanya dilakukan pada lapisan grafena tunggal, planar yang dijenuhkan dengan hidrogen ($C_{24}H_{12}$).
2. Variasi jumlah atom hidrogen yang dijatuhkan 2, 4, 6 atom hidrogen dengan posisi penjatuhan masing-masing *on top*, *bridge* (jembatan dua), dan *hollow*.
3. Pemodelan dan kalkulasi menggunakan *Hyperchem*, metode *AMI*.

V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari penelitian yang telah dilakukan terhadap lapisan grafena jenuh hidrogen dengan kalkulasi *Hyperchem*, metode AM1 dapat disimpulkan bahwa :

1. Penyerapan hidrogen oleh grafena yang dijenuhkan hidrogen berstruktur jembatan satu, tilted, bersifat adsorpsi kimia, dan reaksinya eksoterm.
2. Penjatuhan atom hidrogen pada C kelompok 1 dan 2 akan menyebabkan lapisan grafena terangkat, sedangkan penjatuhan atom hidrogen pada C kelompok, lapisan grafena tetap planar.
3. Bila 2 atom H secara serentak dijatuhkan pada permukaan grafena dengan jarak kedua atom H merupakan kelipatan genap jumlah cincin C-C, akan memberikan nilai ΔE yang kecil. Dan nilai ΔE ini akan semakin kecil dengan bertambahnya jumlah cincin.
4. Bila 2 atom H yang dijatuhkan pada permukaan grafena berjarak kelipatan ganjil jumlah cincin C-C maka panjang ikatan yang terbentuk antara atom C dengan atom hidrogen yang diadsorpsi akan sama.

4.2 Saran

Agar hasil penelitian yang diperoleh lebih akurat lagi, maka disarankan pada peneliti selanjutnya untuk :

1. Teliti dalam mengamati struktur sistem dan keadaan optimal untuk menghindari hilangnya data dari kompleks permukaan yang mungkin,
2. Sebaiknya menggunakan paket *Hyperchem 7*, sehingga sistem yang besar pun dapat dioptimasi.

DAFTAR PUSTAKA

1. E. Sukur, Warta Sains dan Teknologi ISTECS-Japan, dalam *Fullerene "Dari Teknologi Ruang Angkasa Hingga Antivirus HIV"*, Dimensi, Vol. 6, no. 2, 2005.
2. R. Nuryadi, *Carbon Nanotube dan Teknologi Nano*, Sinar Harapan, 2004.
3. A.K. Geim and K. S. Novoselov, The Rise of Graphene, *Nature Materials*, 6 : 183-190 (2007).
4. D. Stojkovic, et al., Collective Stabilization of Hydrogen Chemisorption on Graphenic Surfaces, *Physical Review B*, 2003.
5. <http://id.wikipedia.org/wiki/Graphene>, 08 Mei 2007, 14:28:32.
6. Y. Mohsin, *Kategori Tabel Periodik "Hidrogen"*, diterjemahkan dan disadur dari situs <http://periodic.lanl.gov/elements/1.html>, 31 Mei 2007, 8:12:58
7. Emriadi, *Kimia Koloid dan Permukaan*, Andalas University Press, Padang, 2006, hal 67-69.
8. <http://id.wikipedia.org/wiki/MO-diagram>, 27 Januari 2007, 12:28:42.
9. N. Allinger, *Hyperchem Release 6.0 For Windows Reference Manual*, Hypercube, Inc. Canada, 1996, pp. 204-211
10. M. J. S. Dewar, et al., AM1 : A New General Purpose Quantum Mechanical Molecular Model, *J. Am. Chem Soc. American Chemical Society*, 3902-3909 (1984).
11. J.S. Arellano, et al., *Density Functional Study of Adsorption of Molecular Hydrogen on Graphene Layers*, Universidad de Valladolid, Spain, 2006.
12. M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe, Cluster Expansion Method for Adsorption : Application to Hydrogen Chemisorption on Graphene, *Physical Review B*, 2003.
13. Y. Zempo, *Ab initio Tight-Binding Molecular Dynamics Calculation of Hydrogen Adsorption on Graphite Surface*.