

**ADSORPSI ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR $C_{24}Li_6H_6$
DENGAN METODA CALZAFERRI**

Oleh

Riska Aprilia
No. BP 02 132 011



**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2006**

ABSTRAK
ADSORPSI ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR $C_{24}Li_6H_6$
DENGAN METODA CALZAFERRI

Oleh
Riska Aprilia

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 ($C_{24}Li_6H_6$) dipelajari dengan program Calzaferri. Program ini dijalankan dengan bantuan 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 (-12,17285) ke (-13,06802) eV dan dari 1,1873 ke 1,2249 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 1,66231 menjadi 0,26386 – 1,113772 eV.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Menurut Tachikawa (2005), grafit merupakan senyawa karbon yang mempunyai struktur lapisan. Berbagai macam spesies kimia dapat dimasukkan/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 tinggi¹.

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, oleh karena gas hidrogen dapat dibakar/dikombinasi dengan oksigen dalam bahan bakar untuk mengeluarkan energi dan menghasilkan air tanpa bahan pengotor. Akan tetapi ada beberapa hambatan, yaitu tidak ada sarana yang tersedia bagi pengendara untuk mendapatkan hidrogen yang cocok dan aman. Di samping itu alat penyimpanan bahan bakar dalam tangki gas mobil (kendaraan) perlu dipikirkan².

Adsorpsi hidrogen pada material karbon sangat banyak dipelajari dalam penelitian, seperti dalam teknologi semi konduktor, materi penyimpanan hidrogen. Adanya logam-logam alkali pada permukaan grafit dapat memperbesar penyimpanan gas H₂ oleh material grafit. Adsorpsi logam alkali pada material karbon memberikan peranan penting dalam karbon katalis. Contoh adsorpsi litium pada material karbon dengan struktur nano, salah satu kunci pada baterai litium^{3,4}.

Zhu (2005), mempelajari adsorpsi atom H dan logam alkali pada permukaan grafit planar. Peneliti mendapatkan atom logam alkali diadsorpsi dengan ikatan jembatan tiga, atom H dengan jembatan satu pada grafit. Oleh karena atom H lebih elektronegatif daripada karbon, H cenderung membentuk ikatan kovalen dengan C. Logam alkali yang mempunyai keelektronegatifan lebih rendah dari C cenderung

diadsorpsi pada daerah yang mempunyai potensial elektron negatif yang tinggi yang dikenal dengan lokasi "middle hollow site" (lokasi adsorpsi di atas suatu heksagonal) pada permukaan grafit⁴.

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. Song mendapatkan, adanya ketergantungan yang kuat antara energi penyerapan H₂ dengan diameter nanotube. Umumnya energi penyerapan bertambah dengan adanya pengecilan diameter nanotube. Dari hasil spektrum IR diindikasikan adanya interaksi kuat antara H₂ dan nanotube⁵.

Penelitian ini tentang adsorpsi atom H pada permukaan grafit C₂₄Li₆H₆ yang satu lapisan. Di sini enam atom H dari permukaan grafit planar C₂₄H₁₂ diganti dengan Li (Gambar 3). 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 akan diamati 14 posisi jatuh atom H, yaitu :

- Tujuh posisi untuk sebuah atom H mendatangi permukaan
- Lima posisi untuk dua buah atom H mendatangi permukaan
- Dua posisi untuk tiga buah atom H mendatangi permukaan

Selanjutnya, hasil penelitian akan dibandingkan dengan model adsorpsi atom H pada:

- Permukaan grafit C₂₄H₁₂
- Permukaan grafit C₂₄Li₁₂ (semua atom H diganti Li)
- Permukaan grafit C₂₄Li₃H₉ (3 atom H diganti Li)

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Dari data yang di dapat, setelah analisa seperti yang diuraikan pada diskusi maka dapat disimpulkan :

- 1) Ada beberapa model adsorpsi satu, dua, tiga atom H pada permukaan grafit planar $C_{24}Li_6H_6$ satu lapisan, dimana memperlihatkan bahwa grafit tersebut dapat menyimpan dalam bentuk atom H
- 2) Atom H/atom-atom H yang mendatangi permukaan grafit planar $C_{24}Li_6H_6$ satu lapisan akan teradsorpsi dengan baik dengan nilai BE(H) sekitar -12,17285 - (-13,06802) eV.
- 3) Dengan adanya adsorpsi satu, dua atau tiga atom H pada permukaan grafit planar $C_{24}Li_6H_6$ akan meningkatkan sifat grafit dari semi konduktor menjadi konduktor.
- 4) Pada umumnya ikatan antara atom H dengan atom C pada permukaan grafit adalah cukup kuat dengan panjang ikatan antara 1,1873-1,2249 Å.
- 5) Semakin banyak atom H yang disubstitusi dengan Li maka akan semakin banyak atom-atom H dapat diserap oleh permukaan grafit akan semakin kecil

5.2. Saran

Dari hasil yang diperoleh, maka dapat disarankan :

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

DAFTAR PUSTAKA

1. Tachikawa, H. 2005, *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.
2. www.cen-online.org, Agustus 22,2005. *Filling Up Hydrogen*. pp : 42-47.
3. Park, K. 2005. *Adsorption of Atomic Hydrogen on Single-Walled Carbon Nanotubes*. J. Phys. Chem. B. 109. 8967-8972.
4. Zhu, Z. 2005, *Why H Atom Prefers the On-Top Site Alkali Metal For the Middle Hollow Site on The Basal Planal of Graphite*, J. Phys. Chem B, 106. No. 5.
5. Cheng, H. 2005. *Molecular Dynamics Simulations on The Effect of Diameter and Chirality on Hydrogen adsorption in Single Walled Carbon Nanotubes*. J.Phys. Chem B.109. No. 8.
6. http://groups.yahoo.com/group/kimia_indonesia. 21/05/06. 20 : 18 : 56.
7. Bowser, J.R. *Inorganik Chemistry*, Cole Publishing Company, Pasific Grove, California, 1993.
8. Steerer, P.G. *The Merck Index*, 8th ed, Published by : Merk & Co. Inc. Rahway, USA 1968. pp : 4810.
9. [Http://id.wikipedia.org/wiki/Litium](http://id.wikipedia.org/wiki/Litium). 21/05/06 21: 36 : 00. pp : 1-2.
10. Agus, S. *Kekristalan Zat Padat*. ADB9798. 1998.
11. Kusuma, T.S. *Modifikasi Pembelajaran Mata Ajaran Pengantar Kimia Fisik Teori*. FMIPA, Universitas Andalas Padang.2004.
12. Mansdjoeriah M, N. 1993. *Ikatan Dan Struktur Molekul*. Depdikbud. Bandung.
13. Kusuma, T.S. *Kimia Kuantum Dan Statistik*. FMIPA, Universitas Andalas Padang. 1989, pp 30-32.
14. Suseno, G. *Adsorpsi Atom H Pada Permukaan Grafit Planar C₂₄H₁₂ Dengan Metoda Calzaferri*. Skripsi Sarjana Kimia. Universitas Andalas. 2006.