

**ADSORPSI ATOM H / ATOM-ATOM H PADA PERMUKAAN
GRAFIT PLANAR $C_{48}H_{24}$ DUA LAPISAN DENGAN METODA
CALZAFERRI**

SKRIPSI

Oleh

NOVAFITRIA ANGRENI
NO BP. 02 132 075 ✓



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

ABSTRAK

ADSORPSI ATOM H / ATOM-ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR $C_{48}H_{24}$ DUA LAPISAN DENGAN METODA CALZAFERRI

Oleh

Novafitria Angreni

Sarjana Sains (SSi) dalam bidang Kimia Fakultas MIPA Universitas Andalas
Dibimbing oleh Prof. Dr. Theresia Sita Kusuma, MSc dan Emdeniz, MS

Adsorpsi atom H atau atom-atom H pada permukaan grafit dua lapisan dengan orientasi staggered ($C_{48}H_{24}$) dipelajari dengan program Calzaferri. Program ini dijalankan dengan Pentium 4 yang memorinya 256 MB. Hasil perhitungan memperlihatkan: setiap atom H yang mendatangi lapisan atas atau antar lapisan diserap oleh atom-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 (-11,8434) ke (-14,0776) eV dan dari 1,1800 ke 1,2544 Å. Nilai BE/H yang negatif mencerminkan bahwa adsorpsi kimia ini bersifat endoterm. Atom-atom H yang diadsorpsi oleh permukaan grafit menurunkan energi celah permukaan tersebut: dari 2,9047 menjadi 0,3246 -0,9928 eV. Di samping itu, atom-atom H yang mendatangi antar lapisan dapat juga membentuk kompleks permukaan-H-H-permukaan, dengan sumbu H-H sedikit paralel dengan lapisan dan jarak antar atom H lebih pendek daripada molekul H_2 bebas.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Didunia 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 dan dikombinasi dengan oksigen dalam bahan bakar untuk mengeluarkan energi dan menghasilkan air tanpa bahan pengotor. Tapi ada satu alasan yang merupakan satu hambatan, yaitu tidak ada sarana untuk pengendara agar bisa mendapatkan hidrogen yang cocok dan aman. Serta prosedur yang tidak seragam untuk penyimpanan bahan bakar dalam tangki gas mobil (kendaraan).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 semi konduktor dan material penyimpanan hidrogen.³ 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.⁴

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 terhadap 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 48 atom C dan 24 atom H (C₄₈H₂₄ staggered 2 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 dilakukan secara optimal. Optimasi dilakukan dengan menggunakan program Calzaferri yang dijalankan dengan bantuan komputer. Dalam penelitian ini akan diamati 17 posisi jatuh atom H, yaitu:

1. Sembilan posisi untuk sebuah atom H mendatangi permukaan
2. Tujuh posisi untuk dua buah atom H mendatangi permukaan
3. Satu posisi untuk tiga buah atom H mendatangi permukaan

1.2. Perumusan Masalah

Pada penelitian ini dirumuskan bagaimana adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar dua lapisan yang terdiri dari 48 atom C dan 24 atom H (C₄₈H₂₄ staggered dua lapisan) dan pada ruang antar lapis.

1.3. Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan sebagai berikut:

1. Meramalkan model adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar dua lapisan yang terdiri dari 48 atom C dan 24 atom H (C₄₈H₂₄ staggered dua lapisan) dan pada ruang antar lapisnya.

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

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

1. Adsorpsi antara atom Had dengan atom pada permukaan grafit yaitu adsorpsi kimia.
2. Ikatan antara atom Had dengan atom pada permukaan grafit yaitu ikatan kovalen lemah dengan panjang ikatan antara 1,1800 – 2,0870 Å, sedangkan permukaan grafit itu sendiri tidak berubah karena grafitnya sangat stabil.
3. Atom H / Atom-Atom H yang mendatangi permukaan grafit planar $C_{48}H_{24}$ dua lapisan akan teradsorpsi dengan baik dengan nilai BE(H) sekitar -11,84336 s/d -14,07758 eV.
4. Ada beberapa model adsorpsi atom H / atom-atom H pada permukaan grafit planar $C_{48}H_{24}$ dua lapisan, dimana memperlihatkan bahwa grafit tersebut lebih efektif dalam menyerap / menyimpan atom H dibandingkan molekul H_2 .
5. Dengan adanya adsorpsi atom H / atom-atom H pada permukaan grafit planar $C_{48}H_{24}$ dua lapisan 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 mempelajari 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 atau dua lapisan.

DAFTAR PUSTAKA

1. www.CEN-ONLINE.ORG. Hal : 43 – 47.
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).
3. Park, Kyung A. Adsorption of Atomic Hydrogen on Single-Walled Carbon Nanotubes. *J.Phys.Chem.B* 109. No.18 : 8967-8972 (2005).
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).
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).
6. <http://wikipedia.encyclopedia.the.freedictionary.com/graphite>.14/06/2006. 11:06:54.1-2.
7. <http://wikipedia.encyclopedia.the.freedictionary.com/hydrogen>.14/06/2006.13:27:09.1-3.
8. <http://wikipedia.encyclopedia.the.freedictionary.com/carbon>.14/06/2006.15:04:37.5-6.
9. <http://wikipedia.encyclopedia.the.freedictionary.com/diamonds>.14/06/200614:01:18.6-7.
10. Bowser, J.R. *Inorganic Chemistry*, Cole Publishing Company, Pasific Grove, California. 1993.
11. Kusuma, T.S. *Modifikasi Pembelajaran Mata Ajaran Pengantar Kimia Fisik Teori*. FMIPA. Universitas Andalas. Padang, 2004.
12. Kusuma, T.S. *Kimia Kuantum dan Statistik*. FMIPA. Universitas Andalas. Padang. 1989, Hal : 30-32.
13. M.Noer, Mansdjoeriah. *Ikatan dan Struktur Molekul*. Depdikbud, Bandung.