

ADSORPSI ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR
 $C_{24}H_9Li_3$ DENGAN METODA CALZAFERRI

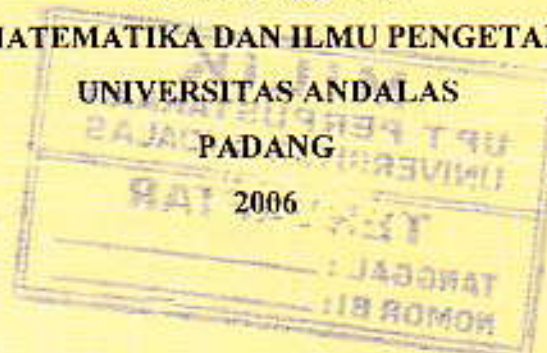
Skripsi Sarjana Kimia

Oleh :

YULANDARI PANGGABEAN
02 132 004



JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM



ABSTRAK

ADSORPSI ATOM H PADA PERMUKAAN GRAFIT PLANAR $C_{24}H_9Li_3$ DENGAN METODA CALZAFERRI

Oleh

YULANDARI PANGGABEAN

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

Adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar satu lapisan ($C_{24}H_9Li_3$) dipelajari dengan program Calzaferri. Program ini dijalankan dengan komputer Intel Pentium III yang memorinya 128 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 (-12,33522) ke (-13,43531) eV dan dari 1,2118 ke 2,0779 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 2,27719 eV menjadi 0,14903 – 1,42498 eV.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Menurut Tachikawa (2005), grafit merupakan senyawa karbon yang mempunyai struktur lapisan dimana berbagai macam spesies kimia dapat diserap ke dalam lapisan itu. Karakter ini telah diaplikasikan bagi material yang mempunyai kutub positif seperti baterai sekunder litium, dimana baterai ini mempunyai gaya elektromotoris yang tinggi dan rapat energinya tinggi¹.

Di dunia ini permasalahan bahan bakar minyak pada kendaraan menjadi perhatian pemerintah dan peneliti. Buktinya peneliti berusaha mengganti bahan bakar pada kendaraan sekarang ini dengan hidrogen. Penggantian ini mempunyai manfaat besar yang dapat mengurangi polusi karena gas hidrogen dapat dibakar atau dikombinasi dengan oksigen untuk mengeluarkan energi dan menghasilkan air tanpa bahan pengotor. Akan tetapi ada beberapa hambatan, yaitu tidak adanya sarana yang tersedia bagi pengendara untuk mendapatkan tempat penyimpanan hidrogen yang cocok dan aman. Di samping itu alat penyimpanan bahan bakar dalam tangki gas mobil (kendaraan) perlu dipikirkan².

Penyerapan hidrogen pada material-material dari karbon sangat banyak dipelajari dalam penelitian, seperti dalam teknologi semikonduktor dan material penyimpanan hidrogen. Secara umum didapat atom H diserap permukaan grafit yang planar membentuk ikatan jembatan satu, dua, dan tiga dengan atom C. *Atom karbon yang dapat menyerap logam alkali memberikan sumbangan yang besar dalam katalis karbon pada material karbon dengan struktur nano.* Adanya logam-logam alkali pada permukaan grafit tersebut dapat memperbesar penyimpanan gas H₂ oleh material grafit. Akan tetapi pada penelitian berikutnya *dimainkan kesimpulan di atas salah, sebab logam-logam alkali tersebut menyerap air dari udara, diduga menyerap lebih banyak gas H₂*^{3,4}.

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 dengan jembatan satu pada grafit. Karena atom H lebih elektronegatif daripada atom litium, H cenderung membentuk ikatan kovalen dengan C. Logam alkali yang mempunyai keelektronegatifan lebih rendah dari C cenderung diadsorpsi pada daerah yang mempunyai potensial elektronegatif yang tinggi yang dikenal dengan lokasi "middle hollowsite"(lokasi adsorpsi di atas suatu heksagonal) pada permukaan grafit⁴.

Banyak peneliti berasumsi, karbon nanotube dibentuk dari penggabungan lapisan-lapisan grafit, jadi 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 nanotube⁵.

Penelitian yang telah dilakukan ini adalah tentang adsorpsi atom H pada permukaan grafit C₂₄H₉Li₃ yang satu lapisan. Disini tiga atom H dari permukaan grafit planar C₂₄H₁₂ diganti dengan atom Li (Gambar 3). Satu, dua dan 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 Calzaferrri yang dijalankan dengan bantuan komputer. Dalam penelitian ini akan diamati 13 posisi jatuh atom H, yaitu :

- a. Tujuh posisi untuk sebuah atom H mendatangi permukaan
- b. Lima posisi untuk dua buah atom H mendatangi permukaan
- c. Satu posisi untuk tiga buah atom H mendatangi permukaan

Dari penelitian ini akan diamati model adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar C₂₄H₉Li₃. Dari hasil perhitungan akan ditentukan nilai Bending Energi (BE) dari atom H pada permukaan grafit dan sifat daya hantar listrik grafit (ΔE).

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Dari hasil analisa data yang telah diuraikan pada pembahasan dapat dibuat suatu kesimpulan antara lain :

1. Ada dua buah pola adsorpsi atom H pada permukaan grafit planar satu lapisan $C_{24}H_9Li_3$ yaitu model umum dan model khusus, dimana memperlihatkan bahwa grafit tersebut dapat menyimpan hidrogen dalam bentuk atom H.
2. Pada umumnya ikatan yang terbentuk antara atom H_{ad} dengan atom-atom yang terdapat pada permukaan grafit $C_{24}H_9Li_3$ kuat dengan panjang ikatan sekitar $1,2118 - 2,0779 \text{ \AA}$ dan nilai $BE(H)$ yang telah dihasilkan dengan nilai $(-12,33522 \text{ eV})$ sampai $(-13,43531 \text{ eV})$ yang menunjukkan bahwa grafit dapat mengadsorpsi atom H dengan kuat dan nilai (-) menyatakan bahwa reaksi yang terjadi adalah reaksi endoterm.
3. Nilai ΔE permukaan grafit + H lebih kecil dari pada ΔE permukaan sehingga dari nilai ini menunjukkan bahwa dengan adanya atom H yang teradsorpsi maka sifat grafit berubah dari semi konduktor menjadi konduktor.

5.2. Saran

Dari hasil penelitian yang telah didapatkan, untuk penelitian selanjutnya dapat disarankan :

1. Disarankan pada penelitian selanjutnya untuk mempelajari adsorpsi atom lain pada permukaan grafit planar.
2. Menggunakan metoda lain untuk menentukan adsorpsi atom H pada permukaan grafit.

DAFTAR PUSTAKA

1. Tachikawa, Hiroto. 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. 13255-13362
2. www.cen-online.org. Agustus 22,2005. *Filling Up Hydrogen*. Hal: 42-47.
3. A.Park,Kyung . *Adsorption of Atomic Hydrogen on Single-Walled Carbon Nanotubes*. J.Phys.Chem.B 109. No.18. 2005. 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. 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.
6. <http://id.wikipedia.org/wiki/Graphite>. 02/05/06.20:17:03. 1-2.
7. <http://mineral.galleries.com/mineral/elements/Graphite>. 21/05/06.20:18:56.
8. <http://id.wikipedia.org/wiki/Hidrogen>. 21/05/06.21:31:14. 1-2
9. J.R.Bowser. *Inorganic Chemistry*, Cole Publishing Company, Pasific Grove, California. 1993.
10. P.G.Stecrer and Martha. W. *The Merck Index* ,8th ed. Published by : Merk and Co. Inc.Rahway,N.J, USA. 1968. Hal : 4810.
11. <http://id.wikipedia.org/wiki/Litium>. 21/05/06.21:36:00. 1-2
12. <http://id.wikipedia.org/wiki/Karbon>. 21/05/06. 22:13:59. 1-2
13. T.S.Kusuma. *Modifikasi Pembelajaran Mata Ajaran Pengantar Kimia Fisik Teori*. FMIPA. Universitas Andalas, Padang. 2004.
14. T.S.Kusuma. *Kimia Kuantum dan Statistik*. FMIPA. Universitas Andalas. Padang. 1989. Hal : 30-32.
15. M.Noer, Mansdjoeriah. *Ikatan dan Struktur Molekul*. Depdikbud. Bandung