

**DIPA**

## **LAPORAN PENELITIAN**

**PENGARUH DOPING NITROGEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT  
ELEKTRONIK CARBON NANOTUBE(CNT)**



**OLEH :**

**RAHADIAN Z, S.PD., M.SI. (KETUA)  
FAJRIAH AZRA, S.Pd., M.Si. (ANGGOTA)**

**Penelitian ini dibiayai oleh :**

**Dana DIPA Universitas Negeri Padang Tahun Anggaran 2008  
Surat Perjanjian Kontrak 1244/H35/KU/DIPA/2008 tanggal 2 Juni 2008**

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU  
PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS NEGERI PADANG  
2008**

DIPA

## LAPORAN PENELITIAN

PENGARUH DOPING NITROGEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT  
ELEKTRONIK CARBON NANOTUBE(CNT)

PERPUSTAKAAN UNIV. NEGERI PADANG  
TELAH TERDAFTAR



JUDUL : PENGARUH DOPING NITROGEN  
TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT...  
PENYUSUN : RAHADIAN Z  
JENIS : LAPORAN PENELITIAN  
NOMOR : 54 / UN.95.13 / PK/KI / 2016  
TANGGAL : 3 NOVEMBER 2016

OLEH :

RAHADIAN Z, S.PD., M.SI. (KETUA)  
FAJRIAH AZRA, S.Pd., M.Si. (ANGGOTA)



Penelitian ini dibiayai oleh :

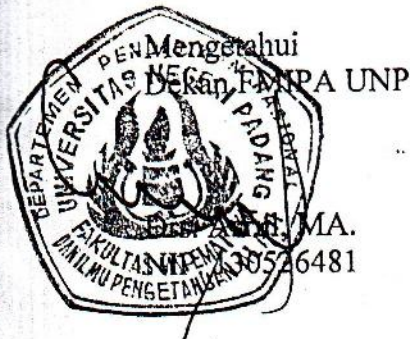
Dana DIPA Universitas Negeri Padang Tahun Anggaran 2008  
Surat Perjanjian Kontrak 1244/H35/KU/DIPA/2008 tanggal 2 Juni 2008

JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU  
PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS NEGERI PADANG  
2008


**HALAMAN PENGESAHAN  
USULAN PENELITIAN DANA DIK UNP**

---

1. a. Judul Penelitian : Pengaruh Doping Nitrogen Terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT).  
b. Bidang Ilmu : MIPA (Kimia Fisik dan Kimia Komputasi)  
c. Kategori Penelitian : Penelitian teoritis dengan aplikasi Kimia Komputasi
2. Peneliti  
a. Ketua Peneliti  
• Nama lengkap dan gelar : Rahadian Z, S.Pd, M.Si  
• Jenis Kelamin : Laki-Laki  
• Golongan / Pangkat / NIP : IIIa / Penata Muda / 132280883  
• Jabatan Fungsional : Assisten Ahli  
• Jabatan Struktural : -  
• Jurusan/ Fakultas : Kimia / FMIPA  
• Pusat Penelitian : Lembaga Penelitian UNP
- b. Alamat Ketua Peneliti  
• Alamat Ketua Peneliti : Jl.Datuk Perpatih Nan Sabatang No. 287, Air Mati Kota Solok.  
• Telpn/ E-mail : (0755) 325959/ rahadian\_z@yahoo.com
3. Jumlah Anggota Peneliti : 1 orang  
• Nama Anggota Peneliti : Fajriah Azra, S.Pd, M.Si
4. Lokasi Penelitian : Laboratorium Kimia Komputasi UGM
5. Kerjasama dengan Institusi Lain  
a. Nama Institusi : Jurusan Kimia FMIPA UGM, yogyakarta  
b. Alamat : Sekip Utara Bls 21 Yogyakarta  
c. Telpn / Fax : 0274-545188
6. Lama Penelitian : 6 Bulan
7. Biaya yang diperlukan : Rp. 5.000.000 (Lima Juta Rupiah)



Ketua Peneliti

  
Rahadian Z, S.P, M.Si  
NIP: 132 300 893



## ABSTRAK

### PENGARUH DOPING NITROGEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT ELEKTRONIK *CARBON NANOTUBE (CNT)*

Oleh:

Rahadian Z, S.Pd, M.Si (Ketua)  
Fajriah Azra, S.Pd, M.Si (Anggota)  
Jurusan Kimia FMIPA UNP

CNT merupakan alotrop karbon yang mempunyai potensi aplikasi yang sangat beragam. Aplikasi CNT dipengaruhi oleh struktur dan sifat elektronik CNT. Upaya untuk modifikasi struktur dan sifat elektronik CNT dapat dilakukan melalui proses doping. Telah dilakukan penelitian untuk menentukan pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik CNT. Dalam penelitian ini, optimasi geometri dilakukan dengan metode *ab initio* pada level RHF menggunakan basis set STO-3G.

Setelah diperoleh struktur yang stabil dengan energi minimal kemudian dilakukan perhitungan untuk mendapatkan harga parameter struktur dan sifat elektronik CNT murni dan terdoping nitrogen berupa diameter, energi HOMO, energi LUMO dan energi Gap. Perhitungan dilakukan dengan bantuan software Hyperchem 7.5, Gaussian dan Gausview. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan diameter CNT dari 4,700 Å menjadi 4,855 Å. Perhitungan juga menunjukkan bahwa doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan energi Gap, dari 1,016293 eV menjadi 1,050578 eV, sehingga menurunkan konduktivitas CNT tersebut.

## PENGANTAR

Kegiatan penelitian mendukung pengembangan ilmu serta terapannya. Dalam hal ini, Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang berusaha mendorong dosen untuk melakukan penelitian sebagai bagian integral dari kegiatan mengajarnya, baik yang secara langsung dibiayai oleh dana Universitas Negeri Padang maupun dana dari sumber lain yang relevan atau bekerja sama dengan instansi terkait.

Sehubungan dengan itu, Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang bekerjasama dengan Pimpinan Universitas, telah memfasilitasi peneliti untuk melaksanakan penelitian tentang *Pengaruh Doping Nitrogen terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT)*, berdasarkan Surat Perjanjian Kontrak Nomor : 1244/H35/KU/DIPA/2008 Tanggal 2 Juni 2008.

Kami menyambut gembira usaha yang dilakukan peneliti untuk menjawab berbagai permasalahan pembangunan, khususnya yang berkaitan dengan permasalahan penelitian tersebut di atas. Dengan selesainya penelitian ini, Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang akan dapat memberikan informasi yang dapat dipakai sebagai bagian upaya penting dalam peningkatan mutu pendidikan pada umumnya. Di samping itu, hasil penelitian ini juga diharapkan memberikan masukan bagi instansi terkait dalam rangka penyusunan kebijakan pembangunan.


Hasil penelitian ini telah ditelaah oleh tim pembahas usul dan laporan penelitian, kemudian untuk tujuan diseminasi, hasil penelitian ini telah diseminarkan ditingkat Universitas. Mudah-mudahan penelitian ini bermanfaat bagi pengembangan ilmu pada umumnya dan khususnya peningkatan mutu staf akademik Universitas Negeri Padang.

Pada kesempatan ini, kami ingin mengucapkan terima kasih kepada berbagai pihak yang membantu terlaksananya penelitian ini, terutama kepada pimpinan lembaga terkait yang menjadi objek penelitian, responden yang menjadi sampel penelitian, dan tim pereviu Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang. Secara khusus, kami menyampaikan terima kasih kepada Rektor Universitas Negeri Padang yang telah berkenan memberi bantuan pendanaan bagi penelitian ini. Kami yakin tanpa dedikasi dan kerjasama yang terjalin selama ini, penelitian ini tidak akan dapat diselesaikan sebagaimana yang diharapkan dan semoga kerjasama yang baik ini akan menjadi lebih baik lagi di masa yang akan datang.

Terima kasih.

Padang, Desember 2008

Ketua Lembaga Penelitian  
Universitas Negeri Padang,



*Anas Yasin*  
Prof. Dr. H. Anas Yasin, M.A.  
LEMNIP 130365634  
PENELITIAN

## KATA PENGANTAR

Alhamdulillahirabbil'alamin, segala puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas segala rahmat inayah dan hidayah-Nya yang telah diberikan hingga saat ini, sehingga terselesaikannya penelitian ini.

Penelitian yang berjudul **“Pengaruh Doping Nitrogen Terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT)”** dilakukan dengan dana DIPA UNP tahun anggaran 2008. Penulis berharap hasil penelitian ini dapat memberikan setetes manfaat terutama dalam kegiatan desain dan sintesis struktur molekul senyawa turunan Imidazoquinoline-5,8-Dione.

Terima kasih dan penghargaan tak luput penulis ucapkan kepada berbagai pihak yang tersebut di bawah ini, atas segala bantuan dan dukungannya selama penelitian hingga terselesaikannya laporan ini.

1. Bpk. Prof. Dr. H. Anas Yasin, M.A, selaku Ketua Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang yang telah memberikan kesempatan dan dana kepada penulis demi terlaksananya penelitian ini.
2. Bpk. Drs. Asrul M.A., selaku DEKAN FMIPA dan Bpk. Drs. Zul Afkar M.S selaku Ketua Jurusan Kimia FMIPA.
3. Bpk. Drs. Ali Amran, M.Pd, M.A, Ph.D dan Ibu Dra. Hj. Irma Mon, M.Si, selaku tim periview yang telah mengoreksi dan memberikan masukan terhadap penyempurnaan penulisan proposal, penelitian dan penulisan laporan ini.

4. Bpk dan Ibu pengelola Laboratorium Kimia FMIPA UNP dan FMIPA UGM yang telah memberikan kesempatan pada penulis untuk melakukan penelitian ini dilaboratorium tersebut.
5. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu-persatu yang telah membantu penyelesaian penelitian dan laporan ini.

Penulis menyadari penulisan laporan ini jauh dari sempurna, oleh karena itu kritik dan saran yang membangun dari berbagai pihak sangat penulis harapkan. Akhirnya penulis berharap semoga laporan ini bermanfaat dalam menambah khasanah ilmu pengetahuan.

Penulis,

Padang, 2008

## DAFTAR ISI

LEMBAR IDENTITAS DAN PENGESAHAN.....	i
ABSTRAK.....	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	vii
DAFTAR LAMPIRAN .....	ix
<b>BAB I : PENDAHULUAN.....</b>	<b>1</b>
1.1. Latar Belakang .....	1
1.2. Perumusan masalah.....	3
<b>BAB II : TINJAUAN PUSTAKA .....</b>	<b>4</b>
2.1 Kimia Komputasi dan Pemodelan Molekul .....	4
2.2 <i>Carbon Nanotube</i> (CNT).....	6
2.3 Doping CNT dengan Nitrogen .....	7
2.4 Sifat Elektronik dan konduktivitas CNT .....	8
<b>BAB III : TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN .....</b>	<b>10</b>
3.1 Tujuan Penelitian.....	10
3.2 Manfaat penelitian.....	10
<b>BAB IV : METODE PENELITIAN .....</b>	<b>11</b>
4.1 Tempat Penelitian .....	11
4.2 Alat dan Bahan.....	11
4.3 Prosedur Kerja.....	11
<b>BAB V : HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>13</b>
5.1 Pemodelan Molekul dan Optimasi Geometri CNT .....	13
5.2 Perhitungan Parameter struktur .....	15
5.3 Perhitungan Sifat Elektronik .....	16
<b>BAB VI : KESIMPULANM DAN SARAN.....</b>	<b>17</b>
6.1 Kesimpulan .....	17
6.2 Saran.....	17
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>18</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>20</b>



## DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 5.1	Energi hasil optimasi Geometri..... 14
Tabel 5.2	Diameter CNT (6,0) murni dan terdoping ..... 15
Tabel 5.3	Sifat elektronik CNT (6,0) murni dan terdoping..... 16

## DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1. CNT yang dibentuk dari graphene sheet.....	6
Gambar 2.2. CNT yang pada kedua ujungnya terdapat penutup .....	6
Gambar 2.3. Unit sel CNT .....	8
Gambar 5.1. Struktur CNT murni.....	14
Gambar 5.2. Struktur CNT terdoping nitrogen.....	15

## DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1. CNT yang dibentuk dari graphene sheet.....	6
Gambar 2.2. CNT yang pada kedua ujungnya terdapat penutup .....	6
Gambar 2.3. Unit sel CNT .....	8
Gambar 5.1. Struktur CNT murni.....	14
Gambar 5.2. Struktur CNT terdoping nitrogen.....	15

## DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1 Hasil Optimasi CNT (6,0) murni .....	20
Lampiran 2 Hasil Optimasi CNT (6,0) terdoping nitrogen .....	21
Lampiran 3 Sifat Elektronik CNT (6,0) murni .....	22
Lampiran 4 Sifat Elektronik CNT (6,0) terdoping nitrogen.....	24
Lampiran 5 Riwayat Hidup Ketua Peneliti.....	26
Lampiran 6 Riwayat Hidup Anggota Peneliti .....	27

## BAB I PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang Masalah

Carbon Nanotube (CNT) merupakan material yang berukuran nanometer yang sangat populer di kalangan peneliti nanoteknologi sekarang ini, dan diprediksikan akan menjadi teknologi andalan di masa depan. Hal ini disebabkan karena CNT mempunyai sifat elektronik yang unggul dengan mobilitas elektron yang tinggi (Mc.Euen, P. L, dkk. 2002) serta mempunyai struktur dan konduktivitas yang unik yaitu dapat bersifat sebagai konduktor maupun semikonduktor (Min-Feng, dkk. 2001).

Karena sifat dan keunikan tersebut, CNT sangat berpotensi digunakan dalam berbagai alat elektronik (Srivastava, D dkk. 2001) dan (Meeyappan and Srivastava, 2002). Penggunaan CNT dalam alat elektronik adalah sebagai transistor dan kapasitor (Bockrath, M. dkk. 1997), dioda (Collins, P. G., dkk. 1997), (Martel, R. dkk. 1998), alat penghasil medan listrik pada panel display/ layar datar (Rocheffort, A; Avouris, P. 2000) serta cip penyimpanan data (Srivastava, D; Menon, M. 2004).

Sifat yang sangat penting sebagai dasar untuk aplikasi CNT dalam bidang elektronika tersebut adalah konduktivitas dari CNT. Konduktivitas tersebut dipengaruhi dan ditentukan oleh struktur dan sifat elektronik CNT itu sendiri. Struktur yang berbeda akan mempunyai sifat elektronik serta konduktivitas yang berbeda.

Oleh karena itu dalam upaya pengembangan dan peningkatan nilai guna CNT dalam bidang elektronika, sangat diperlukan pengontrolan maupun modifikasi terhadap struktur dan sifat elektronik tersebut. Pengontrolan dan modifikasi ini bertujuan untuk menghasilkan CNT yang mempunyai konduktivitas sesuai dengan kebutuhan. Upaya tersebut dapat dilakukan melalui pendopingan atau memasukkan "benda asing" (yang disebut dopan) ke dalam sistim CNT.

Namun upaya untuk pengontrolan dan modifikasi CNT tersebut masih banyak yang dilakukan melalui langkah-langkah *trial and error* dan berdasarkan pengalaman atau intuisi peneliti. Akan tetapi seringkali intuisi ini tidak disertakan dengan data kuantitatif tentang kebolehjadian menemukan senyawa baru dengan struktur dan sifat yang lebih baik. Sehingga seringkali produk yang diperoleh ternyata tidak lebih baik dari senyawa-senyawa yang telah ada. Jika hal ini terjadi berarti waktu, biaya dan tenaga yang telah dikeluarkan dalam eksperimen di laboratorium tersebut akan menjadi sia-sia. Oleh karena itu, perlu dilakukan penelitian yang lebih inovatif dengan langkah yang lebih terarah untuk mengatasi keterbatasan eksperimen laboratorium dan meningkatkan efisiensi serta efektivitas dalam upaya modifikasi CNT.

Sehubungan dengan hal itu, maka dilakukanlah penelitian melalui pemodelan molekul berdasarkan perhitungan teoritik mekanika kuantum dan mekanika statistik menggunakan aplikasi kimia komputasi. Penelitian ini sangat penting dilakukan karena sangat berguna untuk mengatasi keterbatasan eksperimen laboratorium. Seperti keterbatasan untuk melakukan reaksi dengan gas yang mudah meledak, reaksi pada suhu yang sangat tinggi, serta keterbatasan untuk menjelaskan fenomena-fenomena mikroskopik (seperti mobilitas elektron, dan lain-lain).

“Model” yang dihasilkan dari penelitian ini dapat menerangkan dan memprediksi struktur, sifat elektronik serta konduktivitas CNT serta menerangkan fenomena-fenomena dan arah eksperimental dalam melakukan modifikasi CNT. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium, guna mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen laboratorium tersebut.

Sehingga dengan adanya ‘model’ yang dihasilkan dari penelitian ini maka waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium dapat dikurangi. Disamping itu juga dapat mengurangi limbah pencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen.

Berdasarkan latar belakang di atas, maka dilakukan penelitian yang berjudul: **“Pengaruh Doping Nitrogen Terhadap Struktur dan Sifat Elektronik CNT.”**

## **1.2. Perumusan Masalah**

Dalam penelitian ini dirumuskan masalah sebagai berikut:

“Bagaimanakah pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik *Carbon Nanotube* (CNT)?”

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1. Kimia Komputasi dan Pemodelan Molekul

Salah satu penelitian teoritis adalah penelitian dengan metode kimia komputasi. Kimia komputasi sebagai cabang dari ilmu kimia muncul dan berkembang sejalan dengan perkembangan teknologi komputer. Kohn dan Pople pada tahun 1988 mengembangkan metode komputasi dalam bidang kimia kuantum. Pendekatan teori dalam kimia kuantum memberikan hasil yang lebih baik untuk banyak kasus dalam menjabarkan interaksi antara teori dan eksperimen (Levine, 1991).

Pemodelan dan simulasi molekul merupakan bagian dari perhitungan dengan metode kimia komputasi. Pemodelan dan simulasi molekul telah berkembang cukup pesat sejak tahun 1900-an, dan memainkan peranan yang cukup penting dalam perkembangan sains. Hal tersebut seiring dengan kemajuan teknologi komputer yang memberikan dukungan untuk pembuatan perangkat lunak yang dapat digunakan sebagai alat bantu dalam memodelkan senyawa serta menjalankan perhitungan-perhitungan yang dibutuhkan.

Pemodelan molekul dengan metode kimia komputasi tersebut berbasiskan kimia teoritik (mekanika kuantum dan mekanika statistik) dan diarahkan untuk mengatasi keterbatasan eksperimen di laboratorium. Beberapa keterbatasan eksperimen laboratorium tersebut adalah:

- Keterbatasan dalam menjelaskan fenomena dalam skala mikroskopik, misalnya memvisualisasikan molekul, mempelajari struktur molekul, mempelajari sifat suatu molekul, membandingkan sifat dan struktur molekul, mempelajari interaksi antar molekul, mempelajari mekanisme reaksi, memprediksi struktur molekul, memprediksi sifat molekul, memprediksi mekanisme reaksi.
- Keterbatasan dalam melaksanakan penelitian dengan kondisi ekstrim, misalnya untuk melakukan reaksi yang melibatkan



senyawa-senyawa berbahaya dan gampang meledak, reaksi pada suhu yang terlalu tinggi dan lain-lain (Warde, S. 2004).

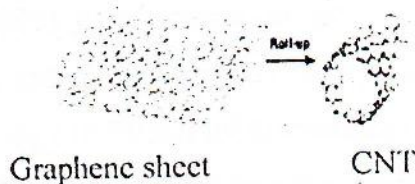
Model yang dihasilkan dalam pemodelan molekul tersebut diharapkan dapat menerangkan dan memprediksi fenomena-fenomena dan arah eksperimental. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium. Dengan demikian dapat mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen di laboratorium. Sehingga waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium tersebut dapat dikurangi. Disamping itu juga dapat mengurangi limbah pencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen (Kier, 1989).

Meskipun kimia komputasi mampu menghasilkan data yang tidak dapat dihasilkan oleh percobaan, namun bukan berarti kajian kimia komputasi dapat menggantikan posisi kajian percobaan. Kedua bidang kajian tersebut harus dapat saling mendukung dan melengkapi.

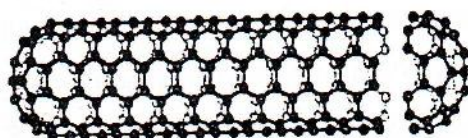
## 2.2. Carbon Nanotube (CNT)

*Carbon nanotube* (CNT) secara umum didefinisikan sebagai tabung berukuran nanometer yang tersusun atas unsur karbon. Dan pada kedua ujung tabung tersebut terdapat tutup yang mengandung cincin lima. CNT pertama kali ditemukan oleh peneliti dari perusahaan Nippon Electronics Company (NEC) Jepang bernama Sumio Iijima pada tahun 1991 (Iijima, S., 1991). Sumio Iijima telah meraih nobel atas temuannya tersebut pada tahun 1996.

Struktur CNT merupakan *graphene sheet* yang menggulung membentuk tabung. Dalam *graphene sheet* setiap atom karbon berikatan atom karbon lain melalui hibridisasi  $sp^2$  untuk membentuk cincin heksagonal (Poggy, 2005). Untuk lebih jelasnya dapat dilihat gambar 2.1 dan 2.2.



Gambar 2.1: CNT yang dibentuk dari graphene sheet



Gambar 2.2: CNT yang pada kedua ujungnya terdapat penutup

CNT sangat berpotensi digunakan dalam berbagai alat elektronik sebagai transistor dan kapasitor (Bockrath, M. dkk. 1997), dioda (Collins, P. G., dkk. 1997), (Martel, R. dkk. 1998), alat penghasil medan listrik pada panel display/ layar datar (Rocheffort, A; Avouris, P. 2000.) serta cip penyimpanan data (Srivastava, D; Menon, M. 2004).

Salah satu sifat yang sangat penting sebagai dasar untuk aplikasi CNT dalam bidang elektronika adalah konduktivitas listrik dari CNT tersebut. Konduktivitas listrik CNT ditentukan oleh struktur dan sifat elektronik CNT. Maka untuk memperoleh CNT dengan konduktivitas listrik yang bervariasi sesuai dengan yang diinginkan perlu dilakukan modifikasi terhadap struktur dan sifat elektronik CNT tersebut.

Penelitian yang berkaitan dengan modifikasi struktur dan sifat elektronik CNT dengan menggunakan aplikasi kimia komputasi antara lain pernah dilakukan oleh Zhang, dkk (2000) yang telah melakukan penelitian untuk memodelkan karbon nanotube (CNT). Dalam penelitiannya mereka mencoba untuk memodelkan CNT jenis armchair dan melapisinya dengan logam Titanium. Dari penelitian tersebut mereka memperoleh hasil bahwa absorpsi titanium pada CNT dapat merubah struktur elektronik CNT tersebut. CNT armchair yang semula bersifat konduktor, ternyata setelah dilapisi dengan Titanium berubah menjadi semikonduktor.

Park dkk. (2005) juga melaporkan bahwa pengkapsulan  $\text{Br}_2$  dalam CNT zigzag (10,2) secara spontan akan menyebabkan perubahan struktur elektronik CNT zigzag (10,2). Hal ini disebabkan karena ketika molekul  $\text{Br}_2$  berada di dalam CNT maka terjadi transfer muatan elektron dari CNT ke  $\text{Br}_2$ . Transfer muatan elektron tersebut menyebabkan peningkatan panjang ikatan  $\text{Br}_2$  yang berada dalam CNT, hal tersebut akan memperbesar diameter CNT. Pengkapsulan  $\text{Br}_2$  dalam CNT tersebut juga mempengaruhi konduktivitas CNT, sehingga bersifat konduktor menyerupai logam.

Kemudian Wojdel dan Bromley pada tahun 2006 juga telah melaporkan bahwa pelapisan SWCNT jenis armchair (3,3) dengan  $\text{SiO}_2$  akan menurunkan selisih energi antara Fermi level dengan pita konduksi. Liu, dkk (2006) juga telah melaporkan pengaruh NO terhadap SWCNT jenis armchair (5,5) 5-1 DB *Defect*. Ternyata adsorpsi N yang berasal dari NO akan memperkecil *band gap* SWCNT sehingga konduktivitas CNT akan meningkat. Dari penelitiannya dilaporkan bahwa *Band gap* SWCNT normal, SWCNT 5-1 DB *Defect* dan SWCNT 5-1 DB *Defect* yang mengadsorpsi NO berturut-turut adalah 1,38 eV; 0,84 eV; 0,74 eV.

### 2.3. Doping CNT dengan Nitrogen

Modifikasi struktur dan sifat elektronik CNT dapat dilakukan dengan pendopingan atau memasukkan "benda asing" (yang disebut dopan) ke dalam sistem CNT. Dengan masuknya "benda asing" atau dopan ke dalam sistem CNT akan merubah struktur CNT. Perubahan struktur tersebut akan berpengaruh terhadap struktur elektronik CNT dan perubahan struktur elektronik tersebut akan berpengaruh terhadap konduktivitas listrik CNT.

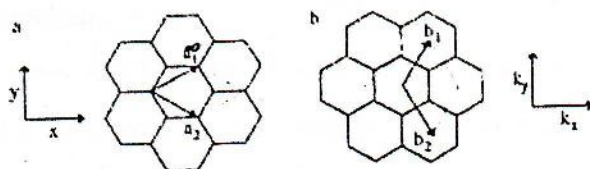
Perbedaan penelitian yang akan dilakukan ini dengan penelitian yang sebelumnya terletak pada jenis CNT dan dopan yang digunakan. CNT yang digunakan adalah jenis SWCNT zigzag (6,0) dengan dopan berupa nitrogen.

Adapun alasan untuk pemilihan nitrogen adalah berdasarkan perbedaan jumlah elektron valensi atom C (yang menyusun CNT) dengan atom nitrogen. CNT disusun oleh atom karbon yang mempunyai empat

elektron valensi. Tentunya, jika nitrogen yang mempunyai 5 elektron valensi berturut-turut didopirkan dalam CNT maka akan terjadi aliran elektron (sebagai pembawa muatan negatif) dalam sistem tersebut akibat adanya elektron yang terdelokalisasi. Aliran elektron tersebut akan menimbulkan suatu lubang elektron (yang merupakan suatu pembawa muatan positif). Secara teori (Rio, R dan Iida, M. 1999) jenis dan jumlah pembawa muatan sangat berpengaruh terhadap konduktivitas suatu bahan, oleh karena itu aliran elektron dan lubang akibat pendopiran dengan nitrogen tersebut tentunya juga akan berpengaruh terhadap struktur dan konduktivitas listrik CNT. Di samping itu, masuknya nitrogen ke dalam sistem CNT tentunya juga akan berpengaruh terhadap struktur CNT tersebut.

#### 2.4. Sifat Elektronik dan konduktivitas CNT

Sifat elektronik CNT dapat dipelajari melalui struktur elektronik graphene dengan menerapkan kondisi batas berulang (Periodik Boundary Condition/ PBC). Unit sel graphene dalam real space direntang dengan vektor  $a_1$  dan  $a_2$ , sedangkan unit sel dalam reciprocal lattice diberikan dengan vektor  $b_1$  dan  $b_2$ , dengan  $b_1$  dan  $b_2$  adalah panjang reciprocal lattice. Masing-masing unit sel tersebut digambarkan dalam gambar 3.



Gambar 2.3: Unit sel CNT

a). Unit sel graphene dalam real space

Panjang  $a_1$  dan  $a_2 = a_0 =$  konstanta kisi atom = 0,246 nm

b) Unit sel dalam reciprocal lattice

$$\text{Vektor } b_1 \text{ dan } b_2 \text{ diberikan dengan } b_i = J_{ab}^{-1} \cdot \frac{2\pi}{|a_j|} = \frac{4\pi}{\sqrt{3} |a_j|} \quad (1)$$

dengan  $J_{ab} = \frac{1}{2} \sqrt{3}$  (faktor koreksi, untuk penggunaan tanpa koordinat kartesian)

Hubungan penyebaran untuk graphene dapat dihitung dengan menggunakan tight binding. Solusi gelombang Bloch dengan dua dimensi vektor gelombang  $k$  ( $k_x$  dan  $k_y$ ) serta energi diberikan dengan persamaan:

$$E_{2D}(k) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a_0}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a_0}{2}\right)} \quad (2)$$

Dengan:  $a_0 = 0,246$  nm dan  $\gamma_0 = 3,1$  eV (energi overlap antara orbital karbon  $\pi - \pi$  yang berdekatan pada graphene). Untuk CNT nilai  $\gamma_0 = 2,6 \pm 0,2$  eV.

Dengan menggunakan vektor  $C_h$  dapat dihitung struktur pita dari CNT. Dimana  $C_h \cdot k = 2\pi q$ , dengan  $q$  merupakan bilangan bulat. Permukaan struktur pita dari graphene sheet dua dimensi, dikurangi menjadi struktur pita satu dimensi, yang dilabeli dengan  $q$ .

Vektor gelombang  $k_x$  dan  $k_y$  secara umum diberikan dengan persamaan:

$$N_x \sqrt{3} a_0 k_x + N_y a_0 k_y = C_h \cdot k = 2\pi q \quad (3)$$

Dimana  $N_y$  dan  $N_x$  didefinisikan dengan  $(N_y, N_x) = (n, m)$

$$\text{Untuk CNT zig zag berlaku } N_y a_0 k_{y,q} = 2\pi q \quad (4)$$

$$\text{dan untuk armchair berlaku } N_x \sqrt{3} a_0 k_{x,q} = 2\pi q \quad (5)$$

Sedangkan untuk CNT khiral tidak ada aturan khusus/ terdapat struktur pita yang spesifik. CNT chiral bisa bersifat konduktor maupun semikonduktor tergantung pada nilai  $(n, m)$ . Jika  $n - m =$  kelipatan 3, bersifat konduktor, sedangkan jika  $n - m \neq$  kelipatan 3, bersifat semikonduktor

## BAB III TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN

### 3.1. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk membuat model molekul CNT murni dan terdoping nitrogen, dan mempelajari pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik CNT.

### 3.2. Manfaat Penelitian

Pemodelan yang dilakukan dalam penelitian ini dapat mengatasi keterbatasan dalam melakukan eksperimen laboratorium. Seperti keterbatasan untuk melakukan reaksi dengan gas yang mudah meledak, reaksi pada suhu yang sangat tinggi, serta keterbatasan untuk menjelaskan fenomena-fenomena mikroskopik (seperti mobilitas elektron, dan lain-lain).

“Model” yang dihasilkan dari penelitian ini dapat menerangkan dan memprediksi struktur, sifat elektronik serta konduktivitas CNT. Di samping itu, model tersebut juga dapat menerangkan fenomena-fenomena dan arah eksperimen dalam melakukan modifikasi CNT. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium, guna menghasilkan CNT dengan struktur dan sifat elektronik yang sesuai dengan kebutuhan dan keinginan.

Jadi, penelitian ini sangat berguna untuk mengatasi keterbatasan eksperimen laboratorium, serta dapat menerangkan fenomena-fenomena dan memberi arah eksperimen guna mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen laboratorium tersebut. Sehingga dengan adanya ‘model’ yang dihasilkan dari penelitian ini maka waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium dapat dikurangi. Disamping itu juga dapat mengurangi limbah pencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen. Jadi penelitian ini merupakan solusi dan langkah untuk meningkatkan efisiensi dan efektivitas dalam upaya modifikasi CNT.

## BAB IV METODE PENELITIAN

### 4.1. Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan di:

- Laboratorium Komputasi Jurusan Kimia FMIPA UNP.
- Laboratorium Komputasi AIC (*Austrian-Indonesian Centre of Computational Chemistry*) Jurusan Kimia FMIPA UGM.

### 4.2. Alat dan Bahan Penelitian

Peralatan yang digunakan dalam penelitian adalah: *Software HyperChem 7.5 for Windows, Gaussian dan Gauss View*. Dan beberapa komputer yang dirangkai secara paralel, untuk melakukan suatu perhitungan secara paralel, dengan spesifikasi sebagai berikut: *Procesor Intel Pentium 4 CPU 3.00 GHz, HDD 80 GB dan RAM 512 MB*.

Sedangkan bahan yang akan dimodelkan dalam penelitian ini adalah Carbon Nanotube dan Nitrogen.

### 4.3. Prosedur Kerja

#### 1. Penentuan basis set.

Langkah awal dalam penelitian ini adalah pemilihan basis set yang sesuai dengan sistem yang akan dikaji dan mempunyai nilai BSSE kecil dari beberapa variasi basis set antara lain STO-3G, 6-31G, dan beberapa basis set yang dapat diakses dari [www.emsl.pnl.gov/forms/basisform.html](http://www.emsl.pnl.gov/forms/basisform.html). Kemudian, himpunan fungsi basis set yang terpilih digunakan untuk perhitungan selanjutnya, seperti untuk optimasi geometri dan perhitungan sifat elektronik.

#### 2. Pemodelan struktur CNT (6,0) murni.

2.1. Digambar struktur 2D dari CNT (6,0) murni

2.2. Kemudian dibuat struktur 3D dari CNT (6,0) tersebut

- 2.3. Optimasi geometri dengan metode ab initio pada level RHF menggunakan basis set terpilih hasil prosedur 1. Sehingga didapat model struktur CNT murni yang stabil (dengan energi terendah).
- 2.4 Struktur 3D CNT murni yang stabil divisualisasikan dengan program Gauss view.
3. Pemodelan struktur CNT (6,0) yang di doping dengan nitrogen
  - 3.1. Nitrogen didopingkan ke dalam struktur CNT (6,0) stabil yang dihasilkan dari prosedur 2.4 (dilakukan dengan Hyperchem).
  - 3.2. Optimasi geometri dengan metode ab initio pada level RHF menggunakan basis set terpilih hasil prosedur 1. Sehingga didapat model struktur CNT terdoping nitrogen yang stabil (dengan energi terendah). (dilakukan dengan program Gaussian)
  - 3.3 Struktur 3D CNT terdoping yang stabil divisualisasikan dengan program Gauss view.
4. Perhitungan panjang ikatan, sudut ikatan, energi ikatan, energi total molekul, diameter molekul, luas permukaan molekul CNT (6,0) murni dan terdoping nitrogen.
5. Perhitungan sifat elektronik CNT (6,0) murni terdoping nitrogen dengan program Gaussian. Sifat elektronik yang dihitung adalah energi HOMO, energi LUMO, band gap dari CNT.



## BAB V

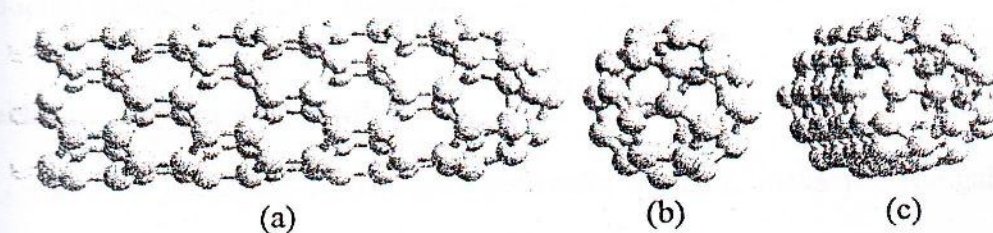
### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 5.1. Hasil Optimasi Geometri

Dari optimasi geometri yang telah dilakukan dalam penelitian ini didapat model struktur CNT murni dan terdoping nitrogen. Struktur yang didapatkan dalam penelitian ini merupakan model struktur CNT dengan struktur molekul paling stabil yang mendekati struktur sebenarnya yang terdapat di alam. Struktur yang stabil tersebut adalah struktur yang memiliki energi potensial permukaan (*potential energy surface*) minimum dengan gaya atomik terkecil. Struktur CNT murni dan CNT terdoping nitrogen tersebut diperlihatkan oleh gambar 5.1 dan 5.2 dengan energi seperti diperlihatkan dalam tabel 5.1.

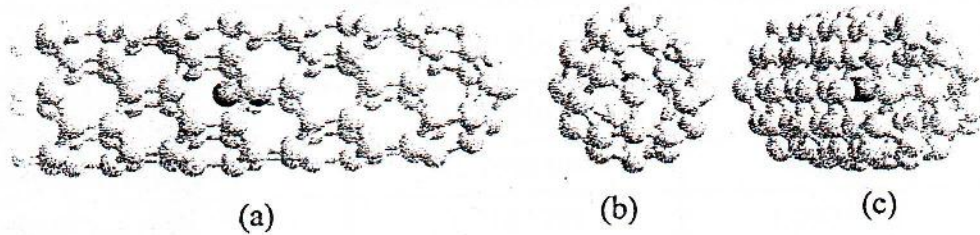
Tabel 5.1: Energi hasil optimisasi geometri

Model	Energi (HF)
CNT murni	-3518.546755
CNT terdoping	-3625.869617



Gambar 5.1: Struktur CNT murni

a. Tampak atas      b. Tampak depan      c. Tampak samping



Gambar 5.2: Struktur CNT terdoping nitrogen  
 a. Tampak atas      b. Tampak depan      c. Tampak samping

### 5.2. Perhitungan Parameter struktur

Setelah didapat struktur CNT yang stabil dengan energi minimal, maka perhitungan dilanjutkan dengan perhitungan parameter struktur. Parameter struktur yang dihitung dalam penelitian ini adalah diameter CNT murni dan terdoping. Dari perhitungan yang dilakukan didapat nilai diameter untuk CNT murni dan terdoping diperlihatkan dalam tabel 5.2.

Tabel 5.2: Diameter CNT murni dan terdoping nitrogen

Model	Diameter (A)
CNT murni	4,700
CNT terdoping	4,855

Tabel 5.2 memperlihatkan bahwa terjadi peningkatan diameter CNT akibat doping nitrogen pada CNT tersebut.

### 5.3. Perhitungan Sifat Elektronik

Setelah dilakukan perhitungan parameter struktur, maka perhitungan dilanjutkan dengan perhitungan sifat elektronik. Dari perhitungan yang dilakukan didapat nilai sifat elektronik untuk CNT murni dan CNT terdoping seperti yang diperlihatkan dalam tabel 5.3.

Tabel 5.3: Nilai Sifat elektronik CNT murni dan terdoping

Sifat Elektronik	CNT Murni	CNT Terdoping
Energi LUMO (eV)	0,7425609	0,7561659
Energi HOMO (eV)	-1,7588544	-1,806744
Energi Gap (eV)	1,0162935	1,0505781

Besar nilai energi Gap CNT akan menggambarkan kemampuan CNT untuk mengalami eksitasi ke keadaan elektronik yang lebih tinggi dalam hal ini eksitasi elektron dari pita valensi ke pita konduksi. Semakin besar energi Gap, maka elektron akan semakin susah tereksitasi dan untuk eksitasi tersebut dibutuhkan energi yang lebih tinggi. Semakin susah elektron tereksitasi dari pita valensi ke pita konduksi maka mobilitas elektron dalam sistim akan semakin sedikit. Semakin sedikit mobilitas elektron dalam suatu sistim maka konduktivitas listrik sistim tersebut semakin rendah.

Tabel 5.3 menggambarkan bahwa energi Gap CNT terdoping nitrogen lebih besar daripada CNT murni, sehingga konduktivitas CNT murni lebih tinggi daripada konduktivitas CNT terdoping. Jadi, doping nitrogen pada CNT akan menurunkan konduktivitas listrik CNT tersebut.

#### 5.4. Sumbangan Model terhadap Eksperimentalis

“Model” yang dihasilkan dari penelitian ini dapat menerangkan dan memprediksi struktur, sifat elektronik serta konduktivitas CNT. Model yang dihasilkan dalam penelitian ini menjelaskan bahwa doping nitrogen pada CNT akan menyebabkan terjadinya perubahan pada struktur dan sifat elektronik CNT, yang mana doping nitrogen akan memperbesar diameter, memperbesar band gap dan menurunkan konduktivitas CNT.

Di samping itu, model tersebut juga dapat menerangkan fenomena-fenomena dan arah eksperimental dalam melakukan modifikasi CNT. Berdasarkan model tersebut, jika kita ingin mendapatkan CNT dengan konduktivitas yang lebih tinggi maka disarankan untuk tidak menggunakan dopan nitrogen. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium, guna menghasilkan CNT dengan struktur dan sifat elektronik yang sesuai dengan kebutuhan dan keinginan.

Pemodelan yang dilakukan dalam penelitian ini dapat mengatasi keterbatasan dalam melakukan eksperimen laboratorium. Seperti keterbatasan untuk melakukan reaksi dengan gas yang mudah meledak, reaksi pada suhu yang sangat tinggi, serta keterbatasan untuk menjelaskan fenomena-fenomena mikroskopik (seperti mobilitas elektron, dan lain-lain). Karena dengan adanya model ini, maka eksperimentalis sudah mendapatkan informasi bahwa ternyata doping nitrogen pada cnt akan menurunkan konduktivitas CNT. Dengan adanya informasi tersebut maka eksperimentalis telah dapat mereduksi kemungkinan dopan yang harus digunakan dalam sintesis CNT. Berarti eksperimentalis tidak perlu lagi melakukan sintesis CNT dengan dopan nitrogen. Yang mana sintesis CNT terdoping harus dilakukan pada kondisi kritis (suhu dan tekanan yang tinggi), disamping itu juga dapat mengurangi limbahpencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen. Jadi, penelitian ini sangat berguna untuk mengatasi keterbatasan eksperimen labortorium, serta dapat menerangkan fenomena-fenomena dan memberi arah eksperimental guna mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen laboratorium tersebut. Sehingga dengan adanya 'model' yang dihasilkan dari penelitian ini maka waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium dapat dikurangi.

## BAB VI

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 6.1 Kesimpulan

Dari penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa:

1. Aplikasi CNT ditentukan oleh struktur dan sifat elektronik CNT
2. Doping akan berpengaruh terhadap struktur dan sifat elektronik CNT.
3. Doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan diameter CNT tersebut, dari 4,700 menjadi 4,855 Å.
4. Doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan Energi Gap CNT, dari 1,0162935 menjadi 1,0505781 sehingga menurunkan konduktivitas CNT tersebut.

#### 6.2. Saran

Penelitian ini memerlukan pengembangan lebih lanjut, oleh karena itu disarankan melakukan kajian tentang pengaruh doping terhadap struktur dan konduktivitas CNT menggunakan jenis dopan dan jenis CNT dengan variasi yang lain.

## DAFTAR PUSTAKA

- Bockrath, M.; Cobden, D. H.; McEuen, P. L.; Chopra, N. G.; Zettl, A.; Thess, A.; Smalley, R. E. (1997). *Science*, 275, 1922
- Collins, P. G.; Zettl, A.; Bando, H.; Thess, A.; Smalley, R. E. (1997). *Science*, 278, 5335
- Iijima, S., *Nature* 354. (1991), 56-58.
- Kier, L.B; Tute, M.S., (1989). *Principle of Medicinal Chemistry. Theoretical Aspect of Drugs Design*. Philadelphia: Lea & Febiger.
- Leach, A.R, 2001, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, second edition. Prentice Hall.
- Levine, I. N. (1991). *Quantum Chemistry*. Fourth Edition. Prentice Hall. New York.
- Lin, L.V., et.al., (2006). Chemical Reaction of Nitric Oxides with the 5-1DB Defect of the Single-Walled Carbon Nanotube, *J. Phys. Chem. B*, 110, 1999-2005.
- Martel, R.; Schmidt, T.; Shea, H. R.; Hertel, T.; Avouris. (1998). *Ph. Appl. Phys. Lett.*, 73, 2447
- McEuen, P. L., Fuhrer, M. S. and Park, H. (2002). Single-Walled Carbon Nanotube Electronics. *IEEE Trans. on Nanotechnology*, 1(1):78-85
- Meyyappan, M; Srivastava, D. (2002). *CRC Handbook of Nanoscience, Engineering and Technology* Vol. 18, p. 1. G.J. Iafate CRC Press. Boca Raton, FL
- Min-Feng, Y; Mark J. Dyer; Rodney S. Ruoff. (2001). Structure and mechanical flexibility of carbon nanotube ribbons: An atomic-force microscopy study. *Journal of Applied Physics* . Vol. 89, number 8.
- Park, N., et.al. (2005). Metallization of The Semiconducting Carbon Nanotube by Encapsulated bromine molecules, *J. Physica E* 29, 693-697.
- Poggi, A.M. (2005). Chemical Force Microscopy on Single-Walled Carbon Nanotube, *Chem. Matter.*, *Journal American Chemical Society*, 4289-4295.

- Rio, R dan Iida, M. (1999). *Fisika dan Teknologi Semikonduktor*. PT. Pradnya Paramita. Jakarta
- Rochefort, A; Avouris, P. (2000). Electron Interference Effects on the Conductance of Doped Carbon Nanotubes. *Journal of Physical Chemistry A*, volume 104, number 44, november 9
- Srivastava, D; Menon, M; K. Cho. (2001). *Journal Comput. Sci. Eng.* 3, 42
- Srivastava, D; Menon, M. (2004). Vacancy-mediated mechanism of nitrogen substitution in carbon nanotubes. *Physical Review B*, 69
- Warde, S. (2004). Molecular Modeling and Simulation of Surfaces. *Online Tutorial*. Cambridge. (<http://www.chem.swin.edu.au>)
- Wojdel, J.C dan Bromley, S.T., (2005), Interaction of SiO<sub>2</sub> with Single-Walled Carbon Nanotube. *J.Phys.Chem. B*, 109, 1387-1391
- Zhang, Y., Dai. H., (2000). Complete Spin Polarization for a CNT with an Adsorbed Atomic Transition-metal Chain. *Appl. Phys. Lett*, 77, 3015-3017.

## Lampiran 1: Hasil Optimasi CNT (6,0) murni

```

1||UNPC-UNK|SP|RHF|STO-3G|C94H6|PCUSER||#T RHF/STO-3G P
OP=REG TEST||Pop=Reg (6,0)||0,1|C,0,1.487,0.342,1.188|C,0,1.46,1.747,1
.25|C,0,0.541,2.36,2.12|C,0,1.185,3.201,3.045|C,0,0.992,2.957,4.417|C,
0,2.391,1.536,5.782|C,0,2.213,2.743,5.081|C,0,3.338,-0.482,4.849|C,0,3
.518,0.831,5.321|C,0,2.886,-1.079,2.552|C,0,3.793,-0.623,3.526|C,0,2.7
64,-0.165,1.49|C,0,4.655,1.546,4.929|C,0,5.543,0.98,4.004|C,0,4.932,0.
081,3.119|C,0,3.895,0.542,1.067|C,0,5.103,0.398,1.764|C,0,2.581,2.469,
0.825|C,0,3.739,1.783,0.434|C,0,2.304,3.935,2.634|C,0,2.816,3.75,1.343
|C,0,3.341,3.473,4.686|C,0,3.257,4.332,3.582|C,0,4.62,2.947,4.912|C,0,
6.232,1.116,1.355|C,0,7.187,1.505,2.305|C,0,6.673,1.698,3.595|C,0,5.74
9,3.666,4.504|C,0,6.909,2.977,4.122|C,0,4.385,5.052,3.174|C,0,5.589,4.
911,3.879|C,0,3.944,4.469,0.933|C,0,4.548,5.374,1.818|C,0,4.868,2.502,
0.024|C,0,4.826,3.903,0.002|C,0,6.146,1.969,0.245|C,0,7.275,2.687,-0.1
64|C,0,5.955,4.622,-0.407|C,0,8.316,2.224,1.896|C,0,5.677,6.093,1.41|C
,0,6.718,5.629,3.47|C,0,8.037,3.695,3.713|C,0,7.997,5.097,3.686|C,0,8.
919,3.129,2.782|C,0,8.479,2.551,0.542|C,0,6.196,5.898,0.121|C,0,6.632,
6.482,2.36|C,0,7.114,3.932,-0.79|C,0,7.76,7.202,1.952|C,0,9.126,5.815,
3.276|C,0,10.049,3.846,2.374|C,0,9.607,3.271,0.134|C,0,7.325,6.617,-0.
287|C,0,8.243,4.65,-1.2|C,0,9.521,4.121,-0.98|C,0,8.205,6.05,-1.223|C,
0,7.926,7.525,0.598|C,0,10.287,5.124,2.897|C,0,8.964,7.063,2.653|C,0,1
0.565,3.656,1.085|C,0,11.418,5.839,2.49|C,0,10.091,7.785,2.245|C,0,9.0
54,8.247,0.192|C,0,9.334,6.767,-1.635|C,0,10.649,4.839,-1.393|C,0,11.6
96,4.373,0.679|C,0,11.356,7.24,2.511|C,0,10.025,8.644,1.131|C,0,9.523,
8.056,-1.116|C,0,10.508,6.092,-2.021|C,0,11.846,4.65,-0.687|C,0,12.314
,5.288,1.553|C,0,11.65,6.823,-2.4|C,0,10.645,8.769,-1.522|C,0,11.174,9
.339,0.707|C,0,11.312,9.646,-0.657|C,0,11.58,8.227,-2.41|C,0,12.918,6.
266,-2.163|C,0,12.967,5.365,-1.093|C,0,12.477,7.954,2.104|C,0,12.367,9
.176,1.431|C,0,13.43,6.031,1.123|C,0,13.64,7.31,1.665|C,0,13.922,5.819
,-0.176|C,0,13.614,9.422,0.842|C,0,14.399,8.273,0.987|C,0,12.569,9.887
,-1.225|C,0,12.735,9.013,-2.305|C,0,14.059,7.072,-2.061|C,0,14.678,6.7
96,-0.837|C,0,14.02,8.461,-2.236|C,0,15.031,8.011,-0.235|C,0,13.75,9.8
9,-0.471|C,0,14.667,9.042,-1.125|H,0,0.633,-0.183,1.649|H,0,-0.255,1.7
1,2.524|H,0,0.169,2.27,4.679|H,0,1.481,0.937,5.959|H,0,2.369,-0.955,5.
084|H,0,1.945,-1.515,2.93||Version=x86-Win32-G98RevA.11.2|HF=-3518.546
7555|RMSD=1.409e-005|Dipole=1.2075976,0.7673299,-0.4430992|PG=C01 [X(C
94H6)]||@

```



Lampiran 2: Hasil Optimasi CNT (6,0) Terdoping Nitrogen

1|I|UNPC-UNK|SP|RHF|STO-3G|C94H6N2|PCUSER||#T RHF/STO-3G  
 POP=REG TEST||Pop Reg (6,0) N2||0,1|C,0,1.497,0.338,1.179|C,0,1.469,1  
 .743,1.241|C,0,0.549,2.355,2.111|C,0,1.192,3.196,3.036|C,0,1.,2.952,4.  
 408|C,0,2.399,1.532,5.773|C,0,2.221,2.738,5.072|C,0,3.347,-0.485,4.84|  
 C,0,3.526,0.827,5.313|C,0,2.896,-1.082,2.543|C,0,3.802,-0.626,3.517|C,  
 0,2.773,-0.168,1.481|C,0,4.663,1.543,4.92|C,0,5.55,0.98,3.994|C,0,4.94  
 1,0.079,3.11|C,0,3.905,0.54,1.059|C,0,5.111,0.399,1.757|C,0,2.59,2.466  
 ,0.817|C,0,3.749,1.782,0.428|C,0,2.311,3.93,2.626|C,0,2.826,3.746,1.33  
 6|C,0,3.348,3.469,4.678|C,0,3.265,4.327,3.573|C,0,4.627,2.944,4.902|C,  
 0,6.244,1.108,1.344|C,0,7.21,1.466,2.304|C,0,6.686,1.692,3.592|C,0,5.7  
 58,3.666,4.504|C,0,6.926,2.962,4.152|C,0,4.389,5.056,3.169|C,0,5.583,4  
 .928,3.905|C,0,3.948,4.472,0.921|C,0,4.525,5.4,1.81|C,0,4.876,2.498,0.  
 009|C,0,4.809,3.904,-0.038|C,0,6.152,1.937,0.209|C,0,7.288,2.632,-0.23  
 3|C,0,5.921,4.633,-0.484|C,0,8.365,2.152,1.899|C,0,5.632,6.155,1.396|C  
 ,0,6.709,5.676,3.528|C,0,8.076,3.675,3.78|C,0,7.99,5.097,3.769|C,0,8.9  
 45,3.062,2.831|C,0,8.491,2.463,0.514|C,0,6.125,5.927,0.078|C,0,6.577,6  
 .53,2.395|C,0,7.078,3.892,-0.863|C,0,7.724,7.216,1.97|C,0,9.113,5.807,  
 3.318|C,0,10.052,3.806,2.399|C,0,9.605,3.22,0.121|C,0,7.282,6.622,-0.3  
 07|C,0,8.217,4.623,-1.234|C,0,9.495,4.093,-0.98|C,0,8.173,6.029,-1.223  
 |C,0,7.892,7.508,0.604|C,0,10.262,5.1,2.911|C,0,8.934,7.044,2.666|C,0,  
 10.542,3.628,1.092|C,0,11.388,5.818,2.494|C,0,10.062,7.761,2.25|C,0,9.  
 026,8.222,0.199|C,0,9.307,6.744,-1.626|C,0,10.621,4.819,-1.384|C,0,11.  
 667,4.354,0.686|C,0,11.327,7.219,2.518|C,0,9.996,8.621,1.138|C,0,9.494  
 ,8.034,-1.109|C,0,10.48,6.071,-2.013|C,0,11.819,4.629,-0.681|C,0,12.28  
 6,5.267,1.56|C,0,11.622,6.803,-2.392|C,0,10.616,8.748,-1.514|C,0,11.14  
 4,9.317,0.714|C,0,11.282,9.624,-0.65|C,0,11.552,8.206,-2.403|C,0,12.89  
 1,6.246,-2.156|C,0,12.94,5.345,-1.086|C,0,12.448,7.933,2.111|C,0,12.33  
 7,9.155,1.438|C,0,13.402,6.011,1.13|C,0,13.611,7.29,1.673|C,0,13.894,5  
 .799,-0.169|C,0,13.585,9.402,0.85|C,0,14.37,8.253,0.995|C,0,12.54,9.86  
 7,-1.218|C,0,12.706,8.993,-2.297|C,0,14.032,7.052,-2.053|C,0,14.65,6.7  
 77,-0.829|C,0,13.992,8.441,-2.228|C,0,15.003,7.991,-0.227|C,0,13.72,9.  
 87,-0.463|C,0,14.638,9.022,-1.117|H,0,0.642,-0.187,1.64|H,0,-0.247,1.7  
 05,2.515|H,0,0.176,2.265,4.67|H,0,1.489,0.933,5.95|H,0,2.378,-0.959,5.  
 075|H,0,1.955,-1.519,2.92|N,0,6.814,4.036,1.714|N,0,7.712,4.609,1.389|  
 |Version=x86-Win32-G98RevA.11.2|HF=-3625.8696173|RMSD=1.146e-005|Dipol  
 e=0.8243455,0.5248586,-0.2987377|PG=C01 [X(C94H6N2)]||@

## Lampiran 3: Sifat Elektronik CNT (6,0) murni

Alpha occ. eigenvalues -- -11.09626 -11.09625 -11.09620 -11.09542 -11.09535  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.09534 -11.09523 -11.09521 -11.09514 -11.09127  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.09123 -11.09121 -11.09066 -11.09060 -11.09058  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.08919 -11.08916 -11.08910 -11.08593 -11.08587  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.08584 -11.08575 -11.08569 -11.08564 -11.07383  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07378 -11.07377 -11.07357 -11.07356 -11.07351  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07220 -11.07212 -11.07210 -11.07200 -11.07197  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07189 -11.07055 -11.07055 -11.07053 -11.07048  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07047 -11.07043 -11.07031 -11.07029 -11.07023  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06970 -11.06965 -11.06963 -11.06845 -11.06838  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06836 -11.06823 -11.06822 -11.06816 -11.06268  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06265 -11.06263 -11.06256 -11.06251 -11.06235  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06188 -11.06186 -11.06181 -11.05877 -11.05872  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.05868 -11.05854 -11.05853 -11.05847 -11.03990  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03983 -11.03976 -11.03967 -11.03964 -11.03952  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03840 -11.03832 -11.03812 -11.03808 -11.03803  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03782 -11.03560 -11.03553 -11.03548 -11.03536  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03535 -11.03524 -10.98156 -10.98150 -10.98148  
 Alpha occ. eigenvalues -- -10.98094 -10.98055 -10.98034 -10.98031 -1.25914  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.24989 -1.22498 -1.22196 -1.22190 -1.20257  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.20255 -1.19285 -1.18000 -1.17998 -1.15577  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.14784 -1.14780 -1.13179 -1.13171 -1.11334  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.11006 -1.11004 -1.10526 -1.10525 -1.08082  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.08076 -1.06409 -1.05837 -1.05835 -1.04670  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.04668 -1.01227 -1.00698 -1.00692 -1.00583  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.00581 -1.00311 -1.00263 -0.98326 -0.98269  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.96887 -0.96882 -0.96840 -0.95940 -0.95933  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.94908 -0.92458 -0.91670 -0.90890 -0.90884  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.88360 -0.86531 -0.86527 -0.86261 -0.85852  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.85822 -0.85821 -0.85065 -0.83494 -0.83484  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.81459 -0.81362 -0.81355 -0.81184 -0.79727  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.79725 -0.78274 -0.78270 -0.78181 -0.77313  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.76076 -0.74892 -0.74890 -0.72949 -0.72946  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.72884 -0.72881 -0.71007 -0.70426 -0.70424  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.69565 -0.68217 -0.67507 -0.67501 -0.66797  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.66793 -0.65445 -0.65439 -0.64185 -0.64184  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.63908 -0.63864 -0.63233 -0.62945 -0.62267  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.62256 -0.61744 -0.61741 -0.61735 -0.61192  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.61186 -0.60958 -0.60954 -0.59684 -0.59680  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.58771 -0.58531 -0.58531 -0.58363 -0.58306  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.57160 -0.57157 -0.56447 -0.56434 -0.55899  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.55173 -0.54865 -0.54786 -0.54779 -0.54747  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.54503 -0.54497 -0.53501 -0.52784 -0.52781  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.52549 -0.52545 -0.52280 -0.51988 -0.51986  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.50960 -0.50958 -0.50663 -0.49494 -0.49357  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.49352 -0.49046 -0.48508 -0.48503 -0.48034  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.47418 -0.47411 -0.46245 -0.46239 -0.46238  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.46144 -0.45736 -0.45733 -0.44539 -0.44533  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.43797 -0.43788 -0.43386 -0.43380 -0.42950  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.42546 -0.41983 -0.41982 -0.41260 -0.41252  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.40696 -0.40689 -0.40400 -0.40301 -0.40297  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.39182 -0.38321 -0.38315 -0.37655 -0.36838  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.36764 -0.35587 -0.35585 -0.33999 -0.33996

Alpha occ. eigenvalues --	-0.32018	-0.29216	-0.29212	-0.28543	-0.28537
Alpha occ. eigenvalues --	-0.27022	-0.26737	-0.26676	-0.26017	-0.25476
Alpha occ. eigenvalues --	-0.24003	-0.23990	-0.22339	-0.22336	-0.21299
Alpha occ. eigenvalues --	-0.19056	-0.17659	-0.15135	-0.15128	-0.06464
Alpha virt. eigenvalues --	0.02729	0.02738	0.09792	0.09812	0.10156
Alpha virt. eigenvalues --	0.12330	0.12337	0.16841	0.16850	0.17388
Alpha virt. eigenvalues --	0.19754	0.19759	0.23004	0.23062	0.23694
Alpha virt. eigenvalues --	0.23708	0.24011	0.24039	0.24064	0.24838
Alpha virt. eigenvalues --	0.26762	0.26769	0.27829	0.28792	0.29918
Alpha virt. eigenvalues --	0.29921	0.31754	0.31877	0.32465	0.32469
Alpha virt. eigenvalues --	0.35431	0.35436	0.35641	0.36892	0.36902
Alpha virt. eigenvalues --	0.38803	0.40031	0.40295	0.40300	0.40852
Alpha virt. eigenvalues --	0.40862	0.42977	0.42980	0.44233	0.44234
Alpha virt. eigenvalues --	0.46281	0.46290	0.54559	0.56692	0.56719
Alpha virt. eigenvalues --	0.58209	0.58210	0.59391	0.60409	0.61124
Alpha virt. eigenvalues --	0.61136	0.61268	0.62278	0.62287	0.62738
Alpha virt. eigenvalues --	0.62862	0.62878	0.63163	0.64387	0.64394
Alpha virt. eigenvalues --	0.66051	0.66062	0.66292	0.66695	0.66708
Alpha virt. eigenvalues --	0.67140	0.68232	0.68516	0.68529	0.68957
Alpha virt. eigenvalues --	0.69370	0.69379	0.70111	0.71571	0.71578
Alpha virt. eigenvalues --	0.72056	0.72722	0.73256	0.73272	0.74182
Alpha virt. eigenvalues --	0.74258	0.74489	0.74503	0.75013	0.75022
Alpha virt. eigenvalues --	0.76134	0.76148	0.76158	0.76660	0.76666
Alpha virt. eigenvalues --	0.76686	0.77142	0.77147	0.77166	0.79006
Alpha virt. eigenvalues --	0.79021	0.79512	0.80126	0.80132	0.81263
Alpha virt. eigenvalues --	0.81747	0.81762	0.82377	0.82388	0.83623
Alpha virt. eigenvalues --	0.83629	0.84929	0.84938	0.85644	0.87443
Alpha virt. eigenvalues --	0.87740	0.87756	0.88316	0.89117	0.89174
Alpha virt. eigenvalues --	0.89175	0.89550	0.89569	0.90763	0.90898
Alpha virt. eigenvalues --	0.90927	0.91466	0.91472	0.92109	0.92186
Alpha virt. eigenvalues --	0.92203	0.92377	0.92746	0.92761	0.93352
Alpha virt. eigenvalues --	0.93361	0.93871	0.93876	0.94086	0.94623
Alpha virt. eigenvalues --	0.95522	0.95528	0.96489	0.96514	0.97677
Alpha virt. eigenvalues --	0.97692	0.97895	0.97904	0.98221	0.98546
Alpha virt. eigenvalues --	0.98559	0.99494	0.99508	0.99699	1.00613
Alpha virt. eigenvalues --	1.00641	1.00984	1.01783	1.01992	1.01997
Alpha virt. eigenvalues --	1.02103	1.02762	1.02770	1.04153	1.04901
Alpha virt. eigenvalues --	1.05454	1.05460	1.06632	1.07928	1.08094
Alpha virt. eigenvalues --	1.08593	1.08599	1.10709	1.10726	1.10846
Alpha virt. eigenvalues --	1.11451	1.11536	1.13611	1.13877	1.14778
Alpha virt. eigenvalues --	1.14786	1.15910	1.15914	1.15944	1.16260
Alpha virt. eigenvalues --	1.18922	1.18927	1.19983	1.19987	1.22449
Alpha virt. eigenvalues --	1.22455				

## Lampiran 4: Sifat Elektronik CNT (6,0) terdoping nitrogen

Alpha occ. eigenvalues --	-15.50359	-15.50092	-11.09577	-11.09568	-11.09567
Alpha occ. eigenvalues --	-11.09366	-11.09361	-11.09360	-11.09356	-11.09354
Alpha occ. eigenvalues --	-11.09349	-11.09330	-11.09320	-11.09313	-11.09083
Alpha occ. eigenvalues --	-11.09081	-11.09075	-11.08994	-11.08990	-11.08983
Alpha occ. eigenvalues --	-11.08181	-11.08175	-11.08171	-11.08162	-11.08159
Alpha occ. eigenvalues --	-11.08152	-11.07266	-11.07260	-11.07259	-11.07250
Alpha occ. eigenvalues --	-11.07248	-11.07244	-11.07091	-11.07084	-11.07083
Alpha occ. eigenvalues --	-11.07070	-11.07070	-11.07062	-11.07047	-11.07042
Alpha occ. eigenvalues --	-11.07040	-11.07035	-11.07034	-11.07028	-11.06893
Alpha occ. eigenvalues --	-11.06887	-11.06884	-11.06874	-11.06870	-11.06864
Alpha occ. eigenvalues --	-11.06626	-11.06625	-11.06625	-11.06602	-11.06599
Alpha occ. eigenvalues --	-11.06598	-11.05991	-11.05983	-11.05980	-11.05965
Alpha occ. eigenvalues --	-11.05962	-11.05956	-11.05871	-11.05867	-11.05852
Alpha occ. eigenvalues --	-11.05839	-11.05838	-11.05832	-11.05808	-11.05807
Alpha occ. eigenvalues --	-11.05798	-11.03810	-11.03800	-11.03798	-11.03786
Alpha occ. eigenvalues --	-11.03783	-11.03774	-11.03646	-11.03636	-11.03634
Alpha occ. eigenvalues --	-11.03624	-11.03619	-11.03612	-11.03468	-11.03461
Alpha occ. eigenvalues --	-11.03453	-11.03444	-11.03436	-11.03428	-10.98521
Alpha occ. eigenvalues --	-10.98504	-10.98489	-10.98416	-10.98405	-10.98386
Alpha occ. eigenvalues --	-10.97786	-1.46317	-1.25379	-1.24032	-1.22216
Alpha occ. eigenvalues --	-1.21838	-1.21834	-1.19979	-1.19976	-1.18642
Alpha occ. eigenvalues --	-1.17743	-1.17740	-1.15291	-1.14556	-1.14555
Alpha occ. eigenvalues --	-1.12931	-1.12924	-1.10800	-1.10786	-1.10781
Alpha occ. eigenvalues --	-1.10260	-1.10258	-1.07893	-1.07886	-1.06079
Alpha occ. eigenvalues --	-1.05499	-1.05497	-1.04462	-1.04459	-1.00729
Alpha occ. eigenvalues --	-1.00475	-1.00474	-1.00423	-1.00410	-1.00382
Alpha occ. eigenvalues --	-1.00376	-0.98237	-0.98165	-0.96753	-0.96415
Alpha occ. eigenvalues --	-0.96414	-0.95691	-0.95687	-0.95115	-0.92081
Alpha occ. eigenvalues --	-0.91324	-0.90746	-0.90743	-0.88208	-0.86361
Alpha occ. eigenvalues --	-0.86358	-0.85918	-0.85802	-0.85566	-0.85563
Alpha occ. eigenvalues --	-0.84935	-0.83425	-0.83422	-0.81229	-0.81226
Alpha occ. eigenvalues --	-0.81188	-0.80954	-0.79354	-0.79351	-0.78216
Alpha occ. eigenvalues --	-0.78213	-0.77755	-0.77092	-0.75952	-0.75745
Alpha occ. eigenvalues --	-0.74820	-0.74819	-0.72742	-0.72739	-0.72511
Alpha occ. eigenvalues --	-0.72510	-0.70558	-0.70311	-0.70307	-0.69172
Alpha occ. eigenvalues --	-0.67769	-0.67116	-0.67116	-0.66866	-0.66861
Alpha occ. eigenvalues --	-0.65895	-0.65893	-0.65067	-0.65057	-0.64851
Alpha occ. eigenvalues --	-0.64465	-0.64460	-0.63245	-0.62792	-0.62520
Alpha occ. eigenvalues --	-0.62197	-0.62193	-0.61592	-0.61585	-0.61167
Alpha occ. eigenvalues --	-0.61054	-0.61049	-0.60581	-0.60576	-0.58520
Alpha occ. eigenvalues --	-0.58356	-0.58351	-0.57777	-0.57716	-0.57077
Alpha occ. eigenvalues --	-0.57075	-0.56681	-0.55946	-0.55939	-0.55532
Alpha occ. eigenvalues --	-0.55086	-0.55084	-0.54647	-0.54622	-0.54233
Alpha occ. eigenvalues --	-0.54227	-0.53624	-0.53608	-0.53605	-0.53033
Alpha occ. eigenvalues --	-0.52409	-0.52404	-0.52210	-0.52204	-0.51685
Alpha occ. eigenvalues --	-0.51683	-0.51139	-0.50791	-0.50223	-0.50218
Alpha occ. eigenvalues --	-0.49731	-0.49003	-0.48998	-0.48919	-0.47779
Alpha occ. eigenvalues --	-0.47776	-0.47646	-0.47639	-0.46598	-0.46396
Alpha occ. eigenvalues --	-0.45658	-0.45653	-0.45167	-0.45162	-0.44630
Alpha occ. eigenvalues --	-0.44096	-0.44094	-0.43732	-0.43723	-0.42900
Alpha occ. eigenvalues --	-0.42406	-0.42220	-0.42212	-0.41542	-0.41532
Alpha occ. eigenvalues --	-0.40935	-0.40930	-0.40298	-0.40291	-0.40143
Alpha occ. eigenvalues --	-0.39894	-0.39886	-0.39153	-0.38276	-0.38269

Alpha occ. eigenvalues --	-0.37103	-0.36929	-0.36181	-0.34802	-0.34798
Alpha occ. eigenvalues --	-0.33864	-0.33862	-0.31239	-0.29047	-0.29038
Alpha occ. eigenvalues --	-0.28341	-0.28335	-0.27913	-0.27774	-0.26264
Alpha occ. eigenvalues --	-0.25673	-0.25520	-0.23314	-0.23308	-0.22339
Alpha occ. eigenvalues --	-0.22330	-0.21514	-0.18720	-0.17279	-0.15137
Alpha occ. eigenvalues --	-0.15127	-0.06640			
Alpha virt. eigenvalues --	0.02779	0.02782	0.09481	0.09487	0.10081
Alpha virt. eigenvalues --	0.11263	0.11275	0.16827	0.16830	0.17413
Alpha virt. eigenvalues --	0.19738	0.19742	0.22066	0.22196	0.23370
Alpha virt. eigenvalues --	0.23376	0.23688	0.24210	0.24551	0.25099
Alpha virt. eigenvalues --	0.25344	0.25345	0.27513	0.27515	0.27599
Alpha virt. eigenvalues --	0.28733	0.29839	0.29843	0.31565	0.32190
Alpha virt. eigenvalues --	0.32388	0.32397	0.34729	0.35144	0.35154
Alpha virt. eigenvalues --	0.36342	0.36349	0.38876	0.39474	0.39475
Alpha virt. eigenvalues --	0.39564	0.40933	0.40942	0.42524	0.42531
Alpha virt. eigenvalues --	0.44188	0.44191	0.45661	0.45662	0.54846
Alpha virt. eigenvalues --	0.57130	0.57142	0.58573	0.58596	0.59712
Alpha virt. eigenvalues --	0.60601	0.61030	0.61439	0.61447	0.62664
Alpha virt. eigenvalues --	0.62680	0.63071	0.63294	0.63309	0.63421
Alpha virt. eigenvalues --	0.64451	0.64462	0.65939	0.66164	0.66179
Alpha virt. eigenvalues --	0.66924	0.66929	0.67376	0.67884	0.68553
Alpha virt. eigenvalues --	0.68672	0.68676	0.69182	0.69527	0.69554
Alpha virt. eigenvalues --	0.70953	0.70968	0.71926	0.71936	0.72131
Alpha virt. eigenvalues --	0.72647	0.73662	0.73672	0.74103	0.74333
Alpha virt. eigenvalues --	0.75005	0.75015	0.75266	0.75957	0.75960
Alpha virt. eigenvalues --	0.76184	0.76206	0.76258	0.76649	0.76654
Alpha virt. eigenvalues --	0.77366	0.78262	0.78266	0.79571	0.79588
Alpha virt. eigenvalues --	0.79628	0.81268	0.81277	0.81397	0.82193
Alpha virt. eigenvalues --	0.82198	0.83165	0.83172	0.84085	0.84088
Alpha virt. eigenvalues --	0.85286	0.86584	0.87582	0.87915	0.87927
Alpha virt. eigenvalues --	0.88266	0.88280	0.88656	0.88661	0.88993
Alpha virt. eigenvalues --	0.89002	0.89167	0.89754	0.91078	0.91092
Alpha virt. eigenvalues --	0.91657	0.91668	0.91756	0.91766	0.91845
Alpha virt. eigenvalues --	0.92476	0.93021	0.93037	0.93456	0.93459
Alpha virt. eigenvalues --	0.93652	0.93912	0.95479	0.95481	0.95727
Alpha virt. eigenvalues --	0.95737	0.96216	0.96638	0.97367	0.97814
Alpha virt. eigenvalues --	0.97823	0.98429	0.98438	0.98713	0.99138
Alpha virt. eigenvalues --	0.99154	1.00785	1.00938	1.00943	1.01846
Alpha virt. eigenvalues --	1.01854	1.01954	1.02007	1.02832	1.02845
Alpha virt. eigenvalues --	1.03896	1.04759	1.05448	1.05463	1.06406
Alpha virt. eigenvalues --	1.06697	1.06999	1.08410	1.08431	1.08437
Alpha virt. eigenvalues --	1.08912	1.10071	1.10620	1.10622	1.11100
Alpha virt. eigenvalues --	1.12979	1.13480	1.13882	1.13889	1.15826
Alpha virt. eigenvalues --	1.15841	1.15844	1.16245	1.18538	1.18547
Alpha virt. eigenvalues --	1.20008	1.20012	1.21506	1.21507	

## RIWAYAT HIDUP KETUA PENELITIAN

1. Nama Lengkap : Rahadian Z, S.Pd., M.Si.  
 2. NIP/NIK : 132280883  
 3. Tempat dan tanggal lahir : Sungai Penuh/ 21 Januari 1974  
 4. Jenis Kelamin : Laki laki  
 5. Pangkat, Golongan : Penata Muda, III a  
 6. Jabatan Fungsional : Asisten Ahli  
 7. Alamat Kantor : Jurusan Kimia FMIPA UNP  
 Jl Prof Dr Hamka Air Tawar Padang  
 Sumatera Barat  
 8. Alamat Rumah : Jl. Datuk Perpatih Nan Sabatang No 287  
 Air Mati Kota Solok  
 9. Telpon : HP 08126633671

### 10. Riwayat Pendidikan

- S1 Jurusan Pendidikan Kimia FPMIPA IKIP Padang, berijazah (1997)
- S2 Kimia Fisika, Universitas Andalas Padang, berijazah (1999)

### 11. Pengalaman Penelitian yang Relevan

- Pembuatan Penuntun Praktikum Kimia Bergambar, Jurusan Kimia FPMIPA IKIP Padang (1997).
- Pembuatan CD (*Compact Disk*) Interaktif pada Pembelajaran Struktur Atom Kelas X Sekolah Menengah Atas, UNP Padang (2007)
- Pembuatan Video Tutorial Interaktif pada Pembelajaran Sistem Koloid, UNP Padang (2007)
- Pembuatan CD Interaktif Pada Pembelajaran Larutan dengan Macromedia Flash MX, UNP Padang (2007)

### 12. Mata kuliah yang diampu dalam dua tahun terakhir

- Pemanfaatan Komputer dalam Pendidikan Kimia
- Media Pembelajaran dalam Kimia
- Kimia Komputasi
- Kimia Fisika 3
- Praktikum Kimia Fisika 1
- Praktikum Kimia Fisika 2

Padang, Februari 2008

Rahadian Z, S.Pd, M.Si  
 NIP. 132280883

## RIWAYAT HIDUP ANGGOTA PENELITI

### 1. Biodata

Nama Lengkap	: Fajriah Azra, S.Pd, M.Si
NIP	: 132300893
Tempat tanggal lahir	: Kubang, 8 Februari 1976
Jenis Kelamin	: Perempuan
Golongan/ Pangkat/ NIP	: IIIb / Penata Muda Tk. I / 132 300 893
Jabatan Fungsional	: Asisten Ahli
Instansi	: FMIPA UNP
Alamat dan telpon	: Komplek TNI AL H. Agus Salim, Siteba. Blok B No. 4, Kelurahan Surau Gadang, RT 05 / XIX / Padang

### II. Riwayat Pendidikan

- S1 Jurusan Kimia FMIPA UNP (1995-1999) di Padang
- S2 Jurusan Kimia FMIPA UGM (2000-2002) di Yogyakarta
- S3 Jurusan Kimia FMIPA UGM (2006-sekarang) di Yogyakarta

### III. Riwayat Pekerjaan:

- 2003 – sekarang : Dosen Jurusan Kimia FMIPA UNP
- 2004 – 2005 : Sekretaris Pengelola Program Non Reguler  
Jurusan Kimia FMIPA UNP.
- 2005 : Pembimbing Peserta Olimpiade Kimia di SMU  
Don Bosco Padang.

### III. Pengalaman penelitian :

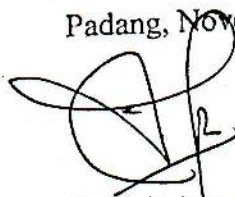
- Penentuan Kadar Asam Benzoat dalam Sirup dan Limun Produksi Industri Rumah Tangga di Padang, 1999.
- Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antiplasmodium Senyawa 1,10-Fenantrolin, 2002.
- Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antioksidan Satu Seri Senyawa Turunan Flavonoid. (Dana DIPA, 2006).
- Analisis HKSA antikanker senyawa turunan imidazoquinoline-5,8-dione berdasarkan parameter muatan atom netto. (Dana DIPA, 2008)
- Pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik Carbon Nanotube (CNT) (Dana DIPA 2008)

### III. Kegiatan Ilmiah yang pernah diikuti:

- Pemakalah dalam Seminar Nasional dan Rapat Tahunan (SEMIRATA VXI) BKS- PTN Indonesia Wilayah Barat, 2-3 Juni 2003 di Kampus UNSRI – Palembang.
- Pemakalah dalam Seminar Nasional bidang MIPA, 11-12 Februari 2005, di Kampus UNP Padang.

- Peserta dalam Seminar Internasional "*An insight into global Education*" 19 Februari 2005, di UNP.
- Pengabdian Masyarakat "Penerapan Kimia terpakai Bagi Ibu-Ibu PKK di Desa Kampung Bendang Kelurahan Sungai Sariak Kecamatan VII Koto Kabupaten Padang Pariaman., 2003.
- Pengabdian masyarakat "Penerapan Kimia terpakai Bagi Guru-guru dan Siswa SLB Wacana Asih, Padang, 2004.
- Dewan Juri dalam Lomba Kimia Tingkat SMU Se-Sumatera Barat, 2003. Diadakan Kimia FMIPA UNP.
- Pemakalah dalam Simposium Nasional "100 Tahun Kebangkitan Nasional dalam Berbagai Perspektif". UGM Yogyakarta, 16-17 Mei 2008.

Padang, November 2008



Fajriah Azra, S.Pd, M.Si  
NIP. 132 300 893



**DIPA**

## **LAPORAN PENELITIAN**

**PENGARUH DOPING NITROGEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT  
ELEKTRONIK CARBON NANOTUBE(CNT)**



**OLEH :**

**RAHADIAN Z, S.PD., M.SI. (KETUA)  
FAJRIAH AZRA, S.Pd., M.Si. (ANGGOTA)**

**Penelitian ini dibiayai oleh :**

**Dana DIPA Universitas Negeri Padang Tahun Anggaran 2008  
Surat Perjanjian Kontrak 1244/H35/KU/DIPA/2008 tanggal 2 Juni 2008**

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU  
PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS NEGERI PADANG  
2008**

**DIPA**

## **LAPORAN PENELITIAN**

**PENGARUH DOPING NITROGEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT  
ELEKTRONIK CARBON NANOTUBE(CNT)**



**OLEH :**

**RAHADIAN Z, S.PD., M.SI. (KETUA)  
FAJRIAH AZRA, S.Pd., M.Si. (ANGGOTA)**

**Penelitian ini dibiayai oleh :**

**Dana DIPA Universitas Negeri Padang Tahun Anggaran 2008  
Surat Perjanjian Kontrak 1244/H35/KU/DIPA/2008 tanggal 2 Juni 2008**

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU  
PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS NEGERI PADANG  
2008**

**HALAMAN PENGESAHAN  
USULAN PENELITIAN DANA DIK UNP**

---

1. a. Judul Penelitian : Pengaruh Doping Nitrogen Terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT).  
b. Bidang Ilmu : MIPA (Kimia Fisik dan Kimia Komputasi)  
c. Kategori Penelitian : Penelitian teoritis dengan aplikasi Kimia Komputasi
2. Peneliti  
a. Ketua Peneliti
- Nama lengkap dan gelar : Rahadian Z, S.Pd, M.Si
  - Jenis Kelamin : Laki-Laki
  - Golongan / Pangkat / NIP : IIIa / Penata Muda / 132280883
  - Jabatan Fungsional : Assisten Ahli
  - Jabatan Struktural : -
  - Jurusan/ Fakultas : Kimia / FMIPA
  - Pusat Penelitian : Lembaga Penelitian UNP
- b. Alamat Ketua Peneliti
- Alamat Ketua Peneliti : Jl.Datuk Perpatih Nan Sabatang No. 287, Air Mati Kota Solok.
  - Telpn/ E-mail : (0755) 325959/ rahadian\_z@yahoo.com
3. Jumlah Anggota Peneliti : 1 orang
- Nama Anggota Peneliti : Fajriah Azra, S.Pd, M.Si
4. Lokasi Penelitian : Laboratorium Kimia Komputasi UGM
5. Kerjasama dengan Institusi Lain
- a. Nama Institusi : Jurusan Kimia FMIPA UGM, yogyakarta
  - b. Alamat : Sekip Utara Bls 21 Yogyakarta
  - c. Telpn / Fax : 0274-545188
6. Lama Penelitian : 6 Bulan
7. Biaya yang diperlukan : Rp. 5.000.000 (Lima Juta Rupiah)



Ketua Peneliti

*Rahadian Z*  
Rahadian Z, S.P, M.Si  
NIP: 132 300 893



## ABSTRAK

### PENGARUH DOPING NITROGEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT ELEKTRONIK *CARBON NANOTUBE (CNT)*

Oleh:

Rahadian Z, S.Pd, M.Si (Ketua)  
Fajriah Azra, S.Pd, M.Si (Anggota)  
Jurusan Kimia FMIPA UNP

CNT merupakan alotrop karbon yang mempunyai potensi aplikasi yang sangat beragam. Aplikasi CNT dipengaruhi oleh struktur dan sifat elektronik CNT. Upaya untuk modifikasi struktur dan sifat elektronik CNT dapat dilakukan melalui proses doping. Telah dilakukan penelitian untuk menentukan pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik CNT. Dalam penelitian ini, optimasi geometri dilakukan dengan metode *ab initio* pada level RHF menggunakan basis set STO-3G.

Setelah diperoleh struktur yang stabil dengan energi minimal kemudian dilakukan perhitungan untuk mendapatkan harga parameter struktur dan sifat elektronik CNT murni dan terdoping nitrogen berupa diameter, energi HOMO, energi LUMO dan energi Gap. Perhitungan dilakukan dengan bantuan software Hyperchem 7.5, Gaussian dan Gausview. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan diameter CNT dari 4,700 Å menjadi 4,855 Å. Perhitungan juga menunjukkan bahwa doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan energi Gap, dari 1,016293 eV menjadi 1,050578 eV, sehingga menurunkan konduktivitas CNT tersebut.

## PENGANTAR

Kegiatan penelitian mendukung pengembangan ilmu serta terapannya. Dalam hal ini, Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang berusaha mendorong dosen untuk melakukan penelitian sebagai bagian integral dari kegiatan mengajarnya, baik yang secara langsung dibiayai oleh dana Universitas Negeri Padang maupun dana dari sumber lain yang relevan atau bekerja sama dengan instansi terkait.

Sehubungan dengan itu, Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang bekerjasama dengan Pimpinan Universitas, telah memfasilitasi peneliti untuk melaksanakan penelitian tentang *Pengaruh Doping Nitrogen terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT)*, berdasarkan Surat Perjanjian Kontrak Nomor : 1244/H35/KU/DIPA/2008 Tanggal 2 Juni 2008.

Kami menyambut gembira usaha yang dilakukan peneliti untuk menjawab berbagai permasalahan pembangunan, khususnya yang berkaitan dengan permasalahan penelitian tersebut di atas. Dengan selesainya penelitian ini, Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang akan dapat memberikan informasi yang dapat dipakai sebagai bagian upaya penting dalam peningkatan mutu pendidikan pada umumnya. Di samping itu, hasil penelitian ini juga diharapkan memberikan masukan bagi instansi terkait dalam rangka penyusunan kebijakan pembangunan.

Hasil penelitian ini telah ditelaah oleh tim pembahas usul dan laporan penelitian, kemudian untuk tujuan diseminasi, hasil penelitian ini telah diseminarkan ditingkat Universitas. Mudah-mudahan penelitian ini bermanfaat bagi pengembangan ilmu pada umumnya dan khususnya peningkatan mutu staf akademik Universitas Negeri Padang.

Pada kesempatan ini, kami ingin mengucapkan terima kasih kepada berbagai pihak yang membantu terlaksananya penelitian ini, terutama kepada pimpinan lembaga terkait yang menjadi objek penelitian, responden yang menjadi sampel penelitian, dan tim pereviu Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang. Secara khusus, kami menyampaikan terima kasih kepada Rektor Universitas Negeri Padang yang telah berkenan memberi bantuan pendanaan bagi penelitian ini. Kami yakin tanpa dedikasi dan kerjasama yang terjalin selama ini, penelitian ini tidak akan dapat diselesaikan sebagaimana yang diharapkan dan semoga kerjasama yang baik ini akan menjadi lebih baik lagi di masa yang akan datang.

Terima kasih.

Padang, Desember 2008

Ketua Lembaga Penelitian  
Universitas Negeri Padang,



*Anas Yasin*  
Prof. Dr. H. Anas Yasin, M.A.  
LEMNIP 130365634  
PENELITIAN

## KATA PENGANTAR

Alhamdulillahirabbil'alamin, segala puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas segala rahmat inayah dan hidayah-Nya yang telah diberikan hingga saat ini, sehingga terselesaikannya penelitian ini.

Penelitian yang berjudul **“Pengaruh Doping Nitrogen Terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT)”** dilakukan dengan dana DIPA UNP tahun anggaran 2008. Penulis berharap hasil penelitian ini dapat memberikan setetes manfaat terutama dalam kegiatan desain dan sintesis struktur molekul senyawa turunan Imidazoquinoline-5,8-Dione.

Terima kasih dan penghargaan tak luput penulis ucapkan kepada berbagai pihak yang tersebut di bawah ini, atas segala bantuan dan dukungannya selama penelitian hingga terselesaikannya laporan ini.

1. Bpk. Prof. Dr. H. Anas Yasin, M.A, selaku Ketua Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang yang telah memberikan kesempatan dan dana kepada penulis demi terlaksananya penelitian ini.
2. Bpk. Drs. Asrul M.A., selaku DEKAN FMIPA dan Bpk. Drs. Zul Afkar M.S selaku Ketua Jurusan Kimia FMIPA.
3. Bpk. Drs. Ali Amran, M.Pd, M.A, Ph.D dan Ibu Dra. Hj. Irma Mon, M.Si, selaku tim periview yang telah mengoreksi dan memberikan masukan terhadap penyempurnaan penulisan proposal, penelitian dan penulisan laporan ini.

4. Bpk dan Ibu pengelola Laboratorium Kimia FMIPA UNP dan FMIPA UGM yang telah memberikan kesempatan pada penulis untuk melakukan penelitian ini dilaboratorium tersebut.
5. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu-persatu yang telah membantu penyelesaian penelitian dan laporan ini.

Penulis menyadari penulisan laporan ini jauh dari sempurna, oleh karena itu kritik dan saran yang membangun dari berbagai pihak sangat penulis harapkan. Akhirnya penulis berharap semoga laporan ini bermanfaat dalam menambah khasanah ilmu pengetahuan.

Penulis,

Padang, 2008

## DAFTAR ISI

LEMBAR IDENTITAS DAN PENGESAHAN.....	i
ABSTRAK.....	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	vii
DAFTAR LAMPIRAN .....	ix
BAB I : PENDAHULUAN.....	1
1.1. Latar Belakang .....	1
1.2. Perumusan masalah.....	3
BAB II : TINJAUAN PUSTAKA .....	4
2.1 Kimia Komputasi dan Pemodelan Molekul .....	4
2.2 <i>Carbon Nanotube</i> (CNT).....	6
2.3 Doping CNT dengan Nitrogen .....	7
2.4 Sifat Elektronik dan konduktivitas CNT .....	8
BAB III : TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN .....	10
3.1 Tujuan Penelitian.....	10
3.2 Manfaat penelitian.....	10
BAB IV : METODE PENELITIAN .....	11
4.1 Tempat Penelitian .....	11
4.2 Alat dan Bahan.....	11
4.3 Prosedur Kerja.....	11
BAB V : HASIL DAN PEMBAHASAN.....	13
5.1 Pemodelan Molekul dan Optimasi Geometri CNT .....	13
5.2 Perhitungan Parameter struktur .....	15
5.3 Perhitungan Sifat Elektronik .....	16
BAB VI : KESIMPULAN DAN SARAN.....	17
6.1 Kesimpulan .....	17
6.2 Saran.....	17
DAFTAR PUSTAKA .....	18
LAMPIRAN.....	20



## DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 5.1	Energi hasil optimasi Geometri..... 14
Tabel 5.2	Diameter CNT (6,0) murni dan terdoping ..... 15
Tabel 5.3	Sifat elektronik CNT (6,0) murni dan terdoping..... 16

## DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1. CNT yang dibentuk dari graphene sheet.....	6
Gambar 2.2. CNT yang pada kedua ujungnya terdapat penutup .....	6
Gambar 2.3. Unit sel CNT .....	8
Gambar 5.1. Struktur CNT murni.....	14
Gambar 5.2. Struktur CNT terdoping nitrogen.....	15

## DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1. CNT yang dibentuk dari graphene sheet.....	6
Gambar 2.2. CNT yang pada kedua ujungnya terdapat penutup .....	6
Gambar 2.3. Unit sel CNT .....	8
Gambar 5.1. Struktur CNT murni.....	14
Gambar 5.2. Struktur CNT terdoping nitrogen.....	15

## DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1 Hasil Optimasi CNT (6,0) murni .....	20
Lampiran 2 Hasil Optimasi CNT (6,0) terdoping nitrogen .....	21
Lampiran 3 Sifat Elektronik CNT (6,0) murni .....	22
Lampiran 4 Sifat Elektronik CNT (6,0) terdoping nitrogen.....	24
Lampiran 5 Riwayat Hidup Ketua Peneliti.....	26
Lampiran 6 Riwayat Hidup Anggota Peneliti .....	27

## BAB I PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang Masalah

Carbon Nanotube (CNT) merupakan material yang berukuran nanometer yang sangat populer di kalangan peneliti nanoteknologi sekarang ini, dan diprediksikan akan menjadi teknologi andalan di masa depan. Hal ini disebabkan karena CNT mempunyai sifat elektronik yang unggul dengan mobilitas elektron yang tinggi (Mc.Euen, P. L, dkk. 2002) serta mempunyai struktur dan konduktivitas yang unik yaitu dapat bersifat sebagai konduktor maupun semikonduktor (Min-Feng, dkk. 2001).

Karena sifat dan keunikan tersebut, CNT sangat berpotensi digunakan dalam berbagai alat elektronik (Srivastava, D dkk. 2001) dan (Meeyappan and Srivastava, 2002). Penggunaan CNT dalam alat elektronik adalah sebagai transistor dan kapasitor (Bockrath, M. dkk. 1997), dioda (Collins, P. G., dkk. 1997), (Martel, R. dkk. 1998), alat penghasil medan listrik pada panel display/ layar datar (Rocheffort, A; Avouris, P. 2000) serta cip penyimpanan data (Srivastava, D; Menon, M. 2004).

Sifat yang sangat penting sebagai dasar untuk aplikasi CNT dalam bidang elektronika tersebut adalah konduktivitas dari CNT. Konduktivitas tersebut dipengaruhi dan ditentukan oleh struktur dan sifat elektronik CNT itu sendiri. Struktur yang berbeda akan mempunyai sifat elektronik serta konduktivitas yang berbeda.

Oleh karena itu dalam upaya pengembangan dan peningkatan nilai guna CNT dalam bidang elektronika, sangat diperlukan pengontrolan maupun modifikasi terhadap struktur dan sifat elektronik tersebut. Pengontrolan dan modifikasi ini bertujuan untuk menghasilkan CNT yang mempunyai konduktivitas sesuai dengan kebutuhan. Upaya tersebut dapat dilakukan melalui pendopingan atau memasukkan "benda asing" (yang disebut dopan) ke dalam sistim CNT.

Namun upaya untuk pengontrolan dan modifikasi CNT tersebut masih banyak yang dilakukan melalui langkah-langkah *trial and error* dan berdasarkan pengalaman atau intuisi peneliti. Akan tetapi seringkali intuisi ini tidak disertakan dengan data kuantitatif tentang kebolehjadian menemukan senyawa baru dengan struktur dan sifat yang lebih baik. Sehingga seringkali produk yang diperoleh ternyata tidak lebih baik dari senyawa-senyawa yang telah ada. Jika hal ini terjadi berarti waktu, biaya dan tenaga yang telah dikeluarkan dalam eksperimen di laboratorium tersebut akan menjadi sia-sia. Oleh karena itu, perlu dilakukan penelitian yang lebih inovatif dengan langkah yang lebih terarah untuk mengatasi keterbatasan eksperimen laboratorium dan meningkatkan efisiensi serta efektivitas dalam upaya modifikasi CNT.

Sehubungan dengan hal itu, maka dilakukanlah penelitian melalui pemodelan molekul berdasarkan perhitungan teoritik mekanika kuantum dan mekanika statistik menggunakan aplikasi kimia komputasi. Penelitian ini sangat penting dilakukan karena sangat berguna untuk mengatasi keterbatasan eksperimen laboratorium. Seperti keterbatasan untuk melakukan reaksi dengan gas yang mudah meledak, reaksi pada suhu yang sangat tinggi, serta keterbatasan untuk menjelaskan fenomena-fenomena mikroskopik (seperti mobilitas elektron, dan lain-lain).

“Model” yang dihasilkan dari penelitian ini dapat menerangkan dan memprediksi struktur, sifat elektronik serta konduktivitas CNT serta menerangkan fenomena-fenomena dan arah eksperimental dalam melakukan modifikasi CNT. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium, guna mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen laboratorium tersebut.

Sehingga dengan adanya ‘model’ yang dihasilkan dari penelitian ini maka waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium dapat dikurangi. Disamping itu juga dapat mengurangi limbah pencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen.

Berdasarkan latar belakang di atas, maka dilakukan penelitian yang berjudul: **“Pengaruh Doping Nitrogen Terhadap Struktur dan Sifat Elektronik CNT.”**

## 1.2. Perumusan Masalah

Dalam penelitian ini dirumuskan masalah sebagai berikut:

“Bagaimanakah pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik *Carbon Nanotube* (CNT)?”

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1. Kimia Komputasi dan Pemodelan Molekul

Salah satu penelitian teoritis adalah penelitian dengan metode kimia komputasi. Kimia komputasi sebagai cabang dari ilmu kimia muncul dan berkembang sejalan dengan perkembangan teknologi komputer. Kohn dan Pople pada tahun 1988 mengembangkan metode komputasi dalam bidang kimia kuantum. Pendekatan teori dalam kimia kuantum memberikan hasil yang lebih baik untuk banyak kasus dalam menjabarkan interaksi antara teori dan eksperimen (Levine, 1991).

Pemodelan dan simulasi molekul merupakan bagian dari perhitungan dengan metode kimia komputasi. Pemodelan dan simulasi molekul telah berkembang cukup pesat sejak tahun 1900-an, dan memainkan peranan yang cukup penting dalam perkembangan sains. Hal tersebut seiring dengan kemajuan teknologi komputer yang memberikan dukungan untuk pembuatan perangkat lunak yang dapat digunakan sebagai alat bantu dalam memodelkan senyawa serta menjalankan perhitungan-perhitungan yang dibutuhkan.

Pemodelan molekul dengan metode kimia komputasi tersebut berbasiskan kimia teoritik (mekanika kuantum dan mekanika statistik) dan diarahkan untuk mengatasi keterbatasan eksperimen di laboratorium. Beberapa keterbatasan eksperimen laboratorium tersebut adalah:

- Keterbatasan dalam menjelaskan fenomena dalam skala mikroskopik, misalnya memvisualisasikan molekul, mempelajari struktur molekul, mempelajari sifat suatu molekul, membandingkan sifat dan struktur molekul, mempelajari interaksi antar molekul, mempelajari mekanisme reaksi, memprediksi struktur molekul, memprediksi sifat molekul, memprediksi mekanisme reaksi.
- Keterbatasan dalam melaksanakan penelitian dengan kondisi ekstrim, misalnya untuk melakukan reaksi yang melibatkan



senyawa-senyawa berbahaya dan gampang meledak, reaksi pada suhu yang terlalu tinggi dan lain-lain (Warde, S. 2004).

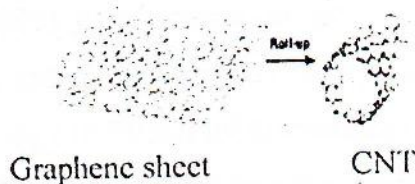
Model yang dihasilkan dalam pemodelan molekul tersebut diharapkan dapat menerangkan dan memprediksi fenomena-fenomena dan arah eksperimental. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium. Dengan demikian dapat mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen di laboratorium. Sehingga waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium tersebut dapat dikurangi. Disamping itu juga dapat mengurangi limbah pencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen (Kier, 1989).

Meskipun kimia komputasi mampu menghasilkan data yang tidak dapat dihasilkan oleh percobaan, namun bukan berarti kajian kimia komputasi dapat menggantikan posisi kajian percobaan. Kedua bidang kajian tersebut harus dapat saling mendukung dan melengkapi.

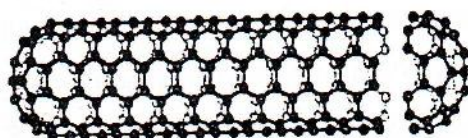
## 2.2. Carbon Nanotube (CNT)

*Carbon nanotube* (CNT) secara umum didefinisikan sebagai tabung berukuran nanometer yang tersusun atas unsur karbon. Dan pada kedua ujung tabung tersebut terdapat tutup yang mengandung cincin lima. CNT pertama kali ditemukan oleh peneliti dari perusahaan Nippon Electronics Company (NEC) Jepang bernama Sumio Iijima pada tahun 1991 (Iijima, S., 1991). Sumio Iijima telah meraih nobel atas temuannya tersebut pada tahun 1996.

Struktur CNT merupakan *graphene sheet* yang menggulung membentuk tabung. Dalam *graphene sheet* setiap atom karbon berikatan atom karbon lain melalui hibridisasi  $sp^2$  untuk membentuk cincin heksagonal (Poggy, 2005). Untuk lebih jelasnya dapat dilihat gambar 2.1 dan 2.2.



Gambar 2.1: CNT yang dibentuk dari graphene sheet



Gambar 2.2: CNT yang pada kedua ujungnya terdapat penutup

CNT sangat berpotensi digunakan dalam berbagai alat elektronik sebagai transistor dan kapasitor (Bockrath, M. dkk. 1997), dioda (Collins, P. G., dkk. 1997), (Martel, R. dkk. 1998), alat penghasil medan listrik pada panel display/ layar datar (Rocheffort, A; Avouris, P. 2000.) serta cip penyimpanan data (Srivastava, D; Menon, M. 2004).

Salah satu sifat yang sangat penting sebagai dasar untuk aplikasi CNT dalam bidang elektronika adalah konduktivitas listrik dari CNT tersebut. Konduktivitas listrik CNT ditentukan oleh struktur dan sifat elektronik CNT. Maka untuk memperoleh CNT dengan konduktivitas listrik yang bervariasi sesuai dengan yang diinginkan perlu dilakukan modifikasi terhadap struktur dan sifat elektronik CNT tersebut.

Penelitian yang berkaitan dengan modifikasi struktur dan sifat elektronik CNT dengan menggunakan aplikasi kimia komputasi antara lain pernah dilakukan oleh Zhang, dkk (2000) yang telah melakukan penelitian untuk memodelkan karbon nanotube (CNT). Dalam penelitiannya mereka mencoba untuk memodelkan CNT jenis armchair dan melapisinya dengan logam Titanium. Dari penelitian tersebut mereka memperoleh hasil bahwa absorpsi titanium pada CNT dapat merubah struktur elektronik CNT tersebut. CNT armchair yang semula bersifat konduktor, ternyata setelah dilapisi dengan Titanium berubah menjadi semikonduktor.

Park dkk. (2005) juga melaporkan bahwa pengkapsulan  $\text{Br}_2$  dalam CNT zigzag (10,2) secara spontan akan menyebabkan perubahan struktur elektronik CNT zigzag (10,2). Hal ini disebabkan karena ketika molekul  $\text{Br}_2$  berada di dalam CNT maka terjadi transfer muatan elektron dari CNT ke  $\text{Br}_2$ . Transfer muatan elektron tersebut menyebabkan peningkatan panjang ikatan  $\text{Br}_2$  yang berada dalam CNT, hal tersebut akan memperbesar diameter CNT. Pengkapsulan  $\text{Br}_2$  dalam CNT tersebut juga mempengaruhi konduktivitas CNT, sehingga bersifat konduktor menyerupai logam.

Kemudian Wojdel dan Bromley pada tahun 2006 juga telah melaporkan bahwa pelapisan SWCNT jenis armchair (3,3) dengan  $\text{SiO}_2$  akan menurunkan selisih energi antara Fermi level dengan pita konduksi. Liu, dkk (2006) juga telah melaporkan pengaruh NO terhadap SWCNT jenis armchair (5,5) 5-1 DB *Defect*. Ternyata adsorpsi N yang berasal dari NO akan memperkecil *band gap* SWCNT sehingga konduktivitas CNT akan meningkat. Dari penelitiannya dilaporkan bahwa *Band gap* SWCNT normal, SWCNT 5-1 DB *Defect* dan SWCNT 5-1 DB *Defect* yang mengadsorpsi NO berturut-turut adalah 1,38 eV; 0,84 eV; 0,74 eV.

### 2.3. Doping CNT dengan Nitrogen

Modifikasi struktur dan sifat elektronik CNT dapat dilakukan dengan pendopingan atau memasukkan "benda asing" (yang disebut dopan) ke dalam sistim CNT. Dengan masuknya "benda asing" atau dopan ke dalam sistim CNT akan merubah struktur CNT. Perubahan struktur tersebut akan berpengaruh terhadap struktur elektronik CNT dan perubahan struktur elektronik tersebut akan berpengaruh terhadap konduktivitas listrik CNT.

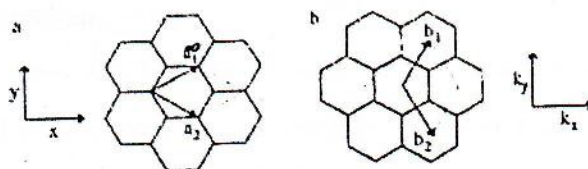
Perbedaan penelitian yang akan dilakukan ini dengan penelitian yang sebelumnya terletak pada jenis CNT dan dopan yang digunakan. CNT yang digunakan adalah jenis SWCNT zigzag (6,0) dengan dopan berupa nitrogen.

Adapun alasan untuk pemilihan nitrogen adalah berdasarkan perbedaan jumlah elektron valensi atom C (yang menyusun CNT) dengan atom nitrogen. CNT disusun oleh atom karbon yang mempunyai empat

elektron valensi. Tentunya, jika nitrogen yang mempunyai 5 elektron valensi berturut-turut didopirkan dalam CNT maka akan terjadi aliran elektron (sebagai pembawa muatan negatif) dalam sistim tersebut akibat adanya elektron yang terdelokalisir. Aliran elektron tersebut akan menimbulkan suatu lubang elektron (yang merupakan suatu pembawa muatan positif). Secara teori (Rio, R dan Iida, M. 1999) jenis dan jumlah pembawa muatan sangat berpengaruh terhadap konduktivitas suatu bahan, oleh karena itu aliran elektron dan lubang akibat pendopiran dengan nitrogen tersebut tentunya juga akan berpengaruh terhadap struktur dan konduktivitas listrik CNT. Di samping itu, masuknya nitrogen ke dalam sistim CNT tentunya juga akan berpengaruh terhadap struktur CNT tersebut.

#### 2.4. Sifat Elektronik dan konduktivitas CNT

Sifat elektronik CNT dapat dipelajari melalui struktur elektronik graphene dengan menerapkan kondisi batas berulang (Periodik Boundary Condition/ PBC). Unit sel graphene dalam real space direntang dengan vektor  $a_1$  dan  $a_2$ , sedangkan unit sel dalam reciprocal lattice diberikan dengan vektor  $b_1$  dan  $b_2$ , dengan  $b_1$  dan  $b_2$  adalah panjang reciprocal lattice. Masing-masing unit sel tersebut digambarkan dalam gambar 3.



Gambar 2.3: Unit sel CNT

a). Unit sel graphene dalam real space

Panjang  $a_1$  dan  $a_2 = a_0 =$  konstanta kisi atom = 0,246 nm

b) Unit sel dalam reciprocal lattice

$$\text{Vektor } b_1 \text{ dan } b_2 \text{ diberikan dengan } b_i = J_{ab}^{-1} \cdot \frac{2\pi}{|a_j|} = \frac{4\pi}{\sqrt{3} |a_j|} \quad (1)$$

dengan  $J_{ab} = \frac{1}{2} \sqrt{3}$  (faktor koreksi, untuk penggunaan tanpa koordinat kartesian)

Hubungan penyebaran untuk graphene dapat dihitung dengan menggunakan tight binding. Solusi gelombang Bloch dengan dua dimensi vektor gelombang  $k$  ( $k_x$  dan  $k_y$ ) serta energi diberikan dengan persamaan:

$$E_{2D}(k) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a_0}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a_0}{2}\right)} \quad (2)$$

Dengan:  $a_0 = 0,246$  nm dan  $\gamma_0 = 3,1$  eV (energi overlap antara orbital karbon  $\pi - \pi$  yang berdekatan pada graphene). Untuk CNT nilai  $\gamma_0 = 2,6 \pm 0,2$  eV.

Dengan menggunakan vektor  $C_h$  dapat dihitung struktur pita dari CNT. Dimana  $C_h \cdot k = 2\pi q$ , dengan  $q$  merupakan bilangan bulat. Permukaan struktur pita dari graphene sheet dua dimensi, dikurangi menjadi struktur pita satu dimensi, yang dilabeli dengan  $q$ .

Vektor gelombang  $k_x$  dan  $k_y$  secara umum diberikan dengan persamaan:

$$N_x \sqrt{3} a_0 k_x + N_y a_0 k_y = C_h \cdot k = 2\pi q \quad (3)$$

Dimana  $N_y$  dan  $N_x$  didefinisikan dengan  $(N_y, N_x) = (n, m)$

$$\text{Untuk CNT zig zag berlaku } N_y a_0 k_{y,q} = 2\pi q \quad (4)$$

$$\text{dan untuk armchair berlaku } N_x \sqrt{3} a_0 k_{x,q} = 2\pi q \quad (5)$$

Sedangkan untuk CNT khiral tidak ada aturan khusus/ terdapat struktur pita yang spesifik. CNT chiral bisa bersifat konduktor maupun semikonduktor tergantung pada nilai  $(n, m)$ . Jika  $n - m =$  kelipatan 3, bersifat konduktor, sedangkan jika  $n - m \neq$  kelipatan 3, bersifat semikonduktor

## BAB III TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN

### 3.1. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk membuat model molekul CNT murni dan terdoping nitrogen, dan mempelajari pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik CNT.

### 3.2. Manfaat Penelitian

Pemodelan yang dilakukan dalam penelitian ini dapat mengatasi keterbatasan dalam melakukan eksperimen laboratorium. Seperti keterbatasan untuk melakukan reaksi dengan gas yang mudah meledak, reaksi pada suhu yang sangat tinggi, serta keterbatasan untuk menjelaskan fenomena-fenomena mikroskopik (seperti mobilitas elektron, dan lain-lain).

“Model” yang dihasilkan dari penelitian ini dapat menerangkan dan memprediksi struktur, sifat elektronik serta konduktivitas CNT. Di samping itu, model tersebut juga dapat menerangkan fenomena-fenomena dan arah eksperimen dalam melakukan modifikasi CNT. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium, guna menghasilkan CNT dengan struktur dan sifat elektronik yang sesuai dengan kebutuhan dan keinginan.

Jadi, penelitian ini sangat berguna untuk mengatasi keterbatasan eksperimen laboratorium, serta dapat menerangkan fenomena-fenomena dan memberi arah eksperimen guna mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen laboratorium tersebut. Sehingga dengan adanya ‘model’ yang dihasilkan dari penelitian ini maka waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium dapat dikurangi. Disamping itu juga dapat mengurangi limbah pencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen. Jadi penelitian ini merupakan solusi dan langkah untuk meningkatkan efisiensi dan efektivitas dalam upaya modifikasi CNT.

## BAB IV METODE PENELITIAN

### 4.1. Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan di:

- Laboratorium Komputasi Jurusan Kimia FMIPA UNP.
- Laboratorium Komputasi AIC (*Austrian-Indonesian Centre of Computational Chemistry*) Jurusan Kimia FMIPA UGM.

### 4.2. Alat dan Bahan Penelitian

Peralatan yang digunakan dalam penelitian adalah: *Software HyperChem 7.5 for Windows, Gaussian dan Gauss View*. Dan beberapa komputer yang dirangkai secara paralel, untuk melakukan suatu perhitungan secara paralel, dengan spesifikasi sebagai berikut: *Procesor Intel Pentium 4 CPU 3.00 GHz, HDD 80 GB dan RAM 512 MB*.

Sedangkan bahan yang akan dimodelkan dalam penelitian ini adalah Carbon Nanotube dan Nitrogen.

### 4.3. Prosedur Kerja

#### 1. Penentuan basis set.

Langkah awal dalam penelitian ini adalah pemilihan basis set yang sesuai dengan sistem yang akan dikaji dan mempunyai nilai BSSE kecil dari beberapa variasi basis set antara lain STO-3G, 6-31G, dan beberapa basis set yang dapat diakses dari [www.emsl.pnl.gov/forms/basisform.html](http://www.emsl.pnl.gov/forms/basisform.html). Kemudian, himpunan fungsi basis set yang terpilih digunakan untuk perhitungan selanjutnya, seperti untuk optimasi geometri dan perhitungan sifat elektronik.

#### 2. Pemodelan struktur CNT (6,0) murni.

2.1. Digambar struktur 2D dari CNT (6,0) murni

2.2. Kemudian dibuat struktur 3D dari CNT (6,0) tersebut

- 2.3. Optimasi geometri dengan metode ab initio pada level RHF menggunakan basis set terpilih hasil prosedur 1. Sehingga didapat model struktur CNT murni yang stabil (dengan energi terendah).
- 2.4 Struktur 3D CNT murni yang stabil divisualisasikan dengan program Gauss view.
3. Pemodelan struktur CNT (6,0) yang di doping dengan nitrogen
  - 3.1. Nitrogen didopingkan ke dalam struktur CNT (6,0) stabil yang dihasilkan dari prosedur 2.4 (dilakukan dengan Hyperchem).
  - 3.2. Optimasi geometri dengan metode ab initio pada level RHF menggunakan basis set terpilih hasil prosedur 1. Sehingga didapat model struktur CNT terdoping nitrogen yang stabil (dengan energi terendah). (dilakukan dengan program Gaussian)
  - 3.3 Struktur 3D CNT terdoping yang stabil divisualisasikan dengan program Gauss view.
4. Perhitungan panjang ikatan, sudut ikatan, energi ikatan, energi total molekul, diameter molekul, luas permukaan molekul CNT (6,0) murni dan terdoping nitrogen.
5. Perhitungan sifat elektronik CNT (6,0) murni terdoping nitrogen dengan program Gaussian. Sifat elektronik yang dihitung adalah energi HOMO, energi LUMO, band gap dari CNT.



## BAB V

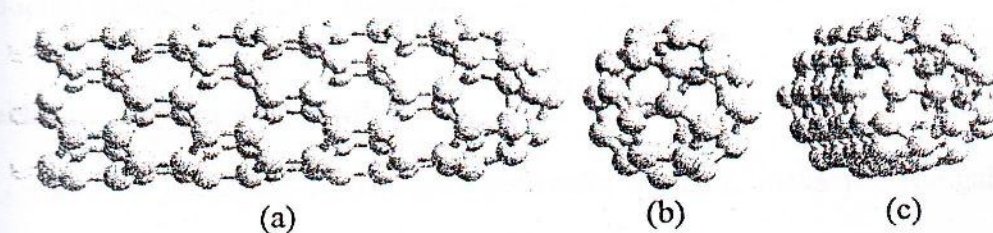
### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 5.1. Hasil Optimasi Geometri

Dari optimasi geometri yang telah dilakukan dalam penelitian ini didapat model struktur CNT murni dan terdoping nitrogen. Struktur yang didapatkan dalam penelitian ini merupakan model struktur CNT dengan struktur molekul paling stabil yang mendekati struktur sebenarnya yang terdapat di alam. Struktur yang stabil tersebut adalah struktur yang memiliki energi potensial permukaan (*potential energy surface*) minimum dengan gaya atomik terkecil. Struktur CNT murni dan CNT terdoping nitrogen tersebut diperlihatkan oleh gambar 5.1 dan 5.2 dengan energi seperti diperlihatkan dalam tabel 5.1.

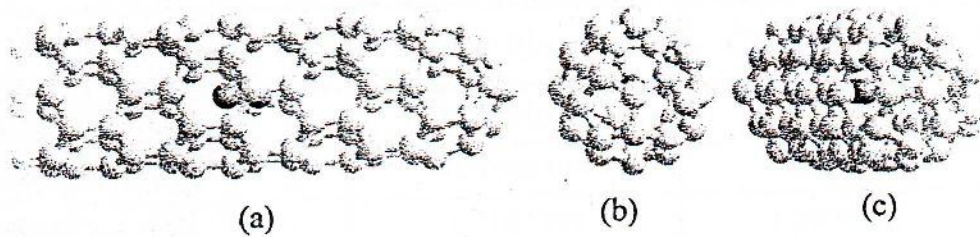
Tabel 5.1: Energi hasil optimisasi geometri

Model	Energi (HF)
CNT murni	-3518.546755
CNT terdoping	-3625.869617



Gambar 5.1: Struktur CNT murni

a. Tampak atas      b. Tampak depan      c. Tampak samping



Gambar 5.2: Struktur CNT terdoping nitrogen  
 a. Tampak atas      b. Tampak depan      c. Tampak samping

### 5.2. Perhitungan Parameter struktur

Setelah didapat struktur CNT yang stabil dengan energi minimal, maka perhitungan dilanjutkan dengan perhitungan parameter struktur. Parameter struktur yang dihitung dalam penelitian ini adalah diameter CNT murni dan terdoping. Dari perhitungan yang dilakukan didapat nilai diameter untuk CNT murni dan terdoping diperlihatkan dalam tabel 5.2.

Tabel 5.2: Diameter CNT murni dan terdoping nitrogen

Model	Diameter (A)
CNT murni	4,700
CNT terdoping	4,855

Tabel 5.2 memperlihatkan bahwa terjadi peningkatan diameter CNT akibat doping nitrogen pada CNT tersebut.

### 5.3. Perhitungan Sifat Elektronik

Setelah dilakukan perhitungan parameter struktur, maka perhitungan dilanjutkan dengan perhitungan sifat elektronik. Dari perhitungan yang dilakukan didapat nilai sifat elektronik untuk CNT murni dan CNT terdoping seperti yang diperlihatkan dalam tabel 5.3.

Tabel 5.3: Nilai Sifat elektronik CNT murni dan terdoping

Sifat Elektronik	CNT Murni	CNT Terdoping
Energi LUMO (eV)	0,7425609	0,7561659
Energi HOMO (eV)	-1,7588544	-1,806744
Energi Gap (eV)	1,0162935	1,0505781

Besar nilai energi Gap CNT akan menggambarkan kemampuan CNT untuk mengalami eksitasi ke keadaan elektronik yang lebih tinggi dalam hal ini eksitasi elektron dari pita valensi ke pita konduksi. Semakin besar energi Gap, maka elektron akan semakin susah tereksitasi dan untuk eksitasi tersebut dibutuhkan energi yang lebih tinggi. Semakin susah elektron tereksitasi dari pita valensi ke pita konduksi maka mobilitas elektron dalam sistim akan semakin sedikit. Semakin sedikit mobilitas elektron dalam suatu sistim maka konduktivitas listrik sistim tersebut semakin rendah.

Tabel 5.3 menggambarkan bahwa energi Gap CNT terdoping nitrogen lebih besar daripada CNT murni, sehingga konduktivitas CNT murni lebih tinggi daripada konduktivitas CNT terdoping. Jadi, doping nitrogen pada CNT akan menurunkan konduktivitas listrik CNT tersebut.

#### 5.4. Sumbangan Model terhadap Eksperimentalis

“Model” yang dihasilkan dari penelitian ini dapat menerangkan dan memprediksi struktur, sifat elektronik serta konduktivitas CNT. Model yang dihasilkan dalam penelitian ini menjelaskan bahwa doping nitrogen pada CNT akan menyebabkan terjadinya perubahan pada struktur dan sifat elektronik CNT, yang mana doping nitrogen akan memperbesar diameter, memperbesar band gap dan menurunkan konduktivitas CNT.

Di samping itu, model tersebut juga dapat menerangkan fenomena-fenomena dan arah eksperimental dalam melakukan modifikasi CNT. Berdasarkan model tersebut, jika kita ingin mendapatkan CNT dengan konduktivitas yang lebih tinggi maka disarankan untuk tidak menggunakan dopan nitrogen. Sehingga model tersebut dapat dijadikan sebagai acuan yang sangat berguna bagi eksperimentalis untuk melakukan eksperimen di laboratorium, guna menghasilkan CNT dengan struktur dan sifat elektronik yang sesuai dengan kebutuhan dan keinginan.

Pemodelan yang dilakukan dalam penelitian ini dapat mengatasi keterbatasan dalam melakukan eksperimen laboratorium. Seperti keterbatasan untuk melakukan reaksi dengan gas yang mudah meledak, reaksi pada suhu yang sangat tinggi, serta keterbatasan untuk menjelaskan fenomena-fenomena mikroskopik (seperti mobilitas elektron, dan lain-lain). Karena dengan adanya model ini, maka eksperimentalis sudah mendapatkan informasi bahwa ternyata doping nitrogen pada cnt akan menurunkan konduktivitas CNT. Dengan adanya informasi tersebut maka eksperimentalis telah dapat mereduksi kemungkinan dopan yang harus digunakan dalam sintesis CNT. Berarti eksperimentalis tidak perlu lagi melakukan sintesis CNT dengan dopan nitrogen. Yang mana sintesis CNT terdoping harus dilakukan pada kondisi kritis (suhu dan tekanan yang tinggi), disamping itu juga dapat mengurangi limbahpencemar lingkungan yang dihasilkan waktu eksperimen. Jadi, penelitian ini sangat berguna untuk mengatasi keterbatasan eksperimen labortorium, serta dapat menerangkan fenomena-fenomena dan memberi arah eksperimental guna mengurangi *trial and error* yang sering terjadi dalam eksperimen laboratorium tersebut. Sehingga dengan adanya 'model' yang dihasilkan dari penelitian ini maka waktu, biaya, tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan eksperimen di laboratorium dapat dikurangi.

## BAB VI

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 6.1 Kesimpulan

Dari penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa:

1. Aplikasi CNT ditentukan oleh struktur dan sifat elektronik CNT
2. Doping akan berpengaruh terhadap struktur dan sifat elektronik CNT.
3. Doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan diameter CNT tersebut, dari 4,700 menjadi 4,855 Å.
4. Doping nitrogen pada CNT (6,0) meningkatkan Energi Gap CNT, dari 1,0162935 menjadi 1,0505781 sehingga menurunkan konduktivitas CNT tersebut.

#### 6.2. Saran

Penelitian ini memerlukan pengembangan lebih lanjut, oleh karena itu disarankan melakukan kajian tentang pengaruh doping terhadap struktur dan konduktivitas CNT menggunakan jenis dopan dan jenis CNT dengan variasi yang lain.

## DAFTAR PUSTAKA

- Bockrath, M.; Cobden, D. H.; McEuen, P. L.; Chopra, N. G.; Zettl, A.; Thess, A.; Smalley, R. E. (1997). *Science*, 275, 1922
- Collins, P. G.; Zettl, A.; Bando, H.; Thess, A.; Smalley, R. E. (1997). *Science*, 278, 5335
- Iijima, S., *Nature* 354. (1991), 56-58.
- Kier, L.B; Tute, M.S., (1989). *Principle of Medicinal Chemistry. Theoretical Aspect of Drugs Design*. Philadelphia: Lea & Febiger.
- Leach, A.R, 2001, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, second edition. Prentice Hall.
- Levine, I. N. (1991). *Quantum Chemistry*. Fourth Edition. Prentice Hall. New York.
- Lin, L.V., et.al., (2006). Chemical Reaction of Nitric Oxides with the 5-1DB Defect of the Single-Walled Carbon Nanotube, *J. Phys. Chem. B*, 110, 1999-2005.
- Martel, R.; Schmidt, T.; Shea, H. R.; Hertel, T.; Avouris. (1998). *Ph. Appl. Phys. Lett.*, 73, 2447
- McEuen, P. L., Fuhrer, M. S. and Park, H. (2002). Single-Walled Carbon Nanotube Electronics. *IEEE Trans. on Nanotechnology*, 1(1):78-85
- Meyyappan, M; Srivastava, D. (2002). *CRC Handbook of Nanoscience, Engineering and Technology* Vol. 18, p. 1. G.J. Iafate CRC Press. Boca Raton, FL
- Min-Feng, Y; Mark J. Dyer; Rodney S. Ruoff. (2001). Structure and mechanical flexibility of carbon nanotube ribbons: An atomic-force microscopy study. *Journal of Applied Physics* . Vol. 89, number 8.
- Park, N., et.al. (2005). Metallization of The Semiconducting Carbon Nanotube by Encapsulated bromine molecules, *J. Physica E* 29, 693-697.
- Poggi, A.M. (2005). Chemical Force Microscopy on Single-Walled Carbon Nanotube, *Chem. Matter.*, *Journal American Chemical Society*, 4289-4295.

- Rio, R dan Iida, M. (1999). *Fisika dan Teknologi Semikonduktor*. PT. Pradnya Paramita. Jakarta
- Rochefort, A; Avouris, P. (2000). Electron Interference Effects on the Conductance of Doped Carbon Nanotubes. *Journal of Physical Chemistry A*, volume 104, number 44, november 9
- Srivastava, D; Menon, M; K. Cho. (2001). *Journal Comput. Sci. Eng.* 3, 42
- Srivastava, D; Menon, M. (2004). Vacancy-mediated mechanism of nitrogen substitution in carbon nanotubes. *Physical Review B*, 69
- Warde, S. (2004). Molecular Modeling and Simulation of Surfaces. *Online Tutorial*. Cambridge. (<http://www.chem.swin.edu.au>)
- Wojdel, J.C dan Bromley, S.T., (2005), Interaction of SiO<sub>2</sub> with Single-Walled Carbon Nanotube. *J.Phys.Chem. B*, 109, 1387-1391
- Zhang, Y., Dai. H., (2000). Complete Spin Polarization for a CNT with an Adsorbed Atomic Transition-metal Chain. *Appl. Phys. Lett*, 77, 3015-3017.

## Lampiran 1: Hasil Optimasi CNT (6,0) murni

```

1||UNPC-UNK|SP|RHF|STO-3G|C94H6|PCUSER||#T RHF/STO-3G P
OP=REG TEST||Pop=Reg (6,0)||0,1|C,0,1.487,0.342,1.188|C,0,1.46,1.747,1
.25|C,0,0.541,2.36,2.12|C,0,1.185,3.201,3.045|C,0,0.992,2.957,4.417|C,
0,2.391,1.536,5.782|C,0,2.213,2.743,5.081|C,0,3.338,-0.482,4.849|C,0,3
.518,0.831,5.321|C,0,2.886,-1.079,2.552|C,0,3.793,-0.623,3.526|C,0,2.7
64,-0.165,1.49|C,0,4.655,1.546,4.929|C,0,5.543,0.98,4.004|C,0,4.932,0.
081,3.119|C,0,3.895,0.542,1.067|C,0,5.103,0.398,1.764|C,0,2.581,2.469,
0.825|C,0,3.739,1.783,0.434|C,0,2.304,3.935,2.634|C,0,2.816,3.75,1.343
|C,0,3.341,3.473,4.686|C,0,3.257,4.332,3.582|C,0,4.62,2.947,4.912|C,0,
6.232,1.116,1.355|C,0,7.187,1.505,2.305|C,0,6.673,1.698,3.595|C,0,5.74
9,3.666,4.504|C,0,6.909,2.977,4.122|C,0,4.385,5.052,3.174|C,0,5.589,4.
911,3.879|C,0,3.944,4.469,0.933|C,0,4.548,5.374,1.818|C,0,4.868,2.502,
0.024|C,0,4.826,3.903,0.002|C,0,6.146,1.969,0.245|C,0,7.275,2.687,-0.1
64|C,0,5.955,4.622,-0.407|C,0,8.316,2.224,1.896|C,0,5.677,6.093,1.41|C
,0,6.718,5.629,3.47|C,0,8.037,3.695,3.713|C,0,7.997,5.097,3.686|C,0,8.
919,3.129,2.782|C,0,8.479,2.551,0.542|C,0,6.196,5.898,0.121|C,0,6.632,
6.482,2.36|C,0,7.114,3.932,-0.79|C,0,7.76,7.202,1.952|C,0,9.126,5.815,
3.276|C,0,10.049,3.846,2.374|C,0,9.607,3.271,0.134|C,0,7.325,6.617,-0.
287|C,0,8.243,4.65,-1.2|C,0,9.521,4.121,-0.98|C,0,8.205,6.05,-1.223|C,
0,7.926,7.525,0.598|C,0,10.287,5.124,2.897|C,0,8.964,7.063,2.653|C,0,1
0.565,3.656,1.085|C,0,11.418,5.839,2.49|C,0,10.091,7.785,2.245|C,0,9.0
54,8.247,0.192|C,0,9.334,6.767,-1.635|C,0,10.649,4.839,-1.393|C,0,11.6
96,4.373,0.679|C,0,11.356,7.24,2.511|C,0,10.025,8.644,1.131|C,0,9.523,
8.056,-1.116|C,0,10.508,6.092,-2.021|C,0,11.846,4.65,-0.687|C,0,12.314
,5.288,1.553|C,0,11.65,6.823,-2.4|C,0,10.645,8.769,-1.522|C,0,11.174,9
.339,0.707|C,0,11.312,9.646,-0.657|C,0,11.58,8.227,-2.41|C,0,12.918,6.
266,-2.163|C,0,12.967,5.365,-1.093|C,0,12.477,7.954,2.104|C,0,12.367,9
.176,1.431|C,0,13.43,6.031,1.123|C,0,13.64,7.31,1.665|C,0,13.922,5.819
,-0.176|C,0,13.614,9.422,0.842|C,0,14.399,8.273,0.987|C,0,12.569,9.887
,-1.225|C,0,12.735,9.013,-2.305|C,0,14.059,7.072,-2.061|C,0,14.678,6.7
96,-0.837|C,0,14.02,8.461,-2.236|C,0,15.031,8.011,-0.235|C,0,13.75,9.8
9,-0.471|C,0,14.667,9.042,-1.125|H,0,0.633,-0.183,1.649|H,0,-0.255,1.7
1,2.524|H,0,0.169,2.27,4.679|H,0,1.481,0.937,5.959|H,0,2.369,-0.955,5.
084|H,0,1.945,-1.515,2.93||Version=x86-Win32-G98RevA.11.2|HF=-3518.546
7555|RMSD=1.409e-005|Dipole=1.2075976,0.7673299,-0.4430992|PG=C01 [X(C
94H6)]||@

```



Lampiran 2: Hasil Optimasi CNT (6,0) Terdoping Nitrogen

1|I|UNPC-UNK|SP|RHF|STO-3G|C94H6N2|PCUSER||#T RHF/STO-3G  
 POP=REG TEST||Pop Reg (6,0) N2||0,1|C,0,1.497,0.338,1.179|C,0,1.469,1  
 .743,1.241|C,0,0.549,2.355,2.111|C,0,1.192,3.196,3.036|C,0,1.,2.952,4.  
 408|C,0,2.399,1.532,5.773|C,0,2.221,2.738,5.072|C,0,3.347,-0.485,4.84|  
 C,0,3.526,0.827,5.313|C,0,2.896,-1.082,2.543|C,0,3.802,-0.626,3.517|C,  
 0,2.773,-0.168,1.481|C,0,4.663,1.543,4.92|C,0,5.55,0.98,3.994|C,0,4.94  
 1,0.079,3.11|C,0,3.905,0.54,1.059|C,0,5.111,0.399,1.757|C,0,2.59,2.466  
 ,0.817|C,0,3.749,1.782,0.428|C,0,2.311,3.93,2.626|C,0,2.826,3.746,1.33  
 6|C,0,3.348,3.469,4.678|C,0,3.265,4.327,3.573|C,0,4.627,2.944,4.902|C,  
 0,6.244,1.108,1.344|C,0,7.21,1.466,2.304|C,0,6.686,1.692,3.592|C,0,5.7  
 58,3.666,4.504|C,0,6.926,2.962,4.152|C,0,4.389,5.056,3.169|C,0,5.583,4  
 .928,3.905|C,0,3.948,4.472,0.921|C,0,4.525,5.4,1.81|C,0,4.876,2.498,0.  
 009|C,0,4.809,3.904,-0.038|C,0,6.152,1.937,0.209|C,0,7.288,2.632,-0.23  
 3|C,0,5.921,4.633,-0.484|C,0,8.365,2.152,1.899|C,0,5.632,6.155,1.396|C  
 ,0,6.709,5.676,3.528|C,0,8.076,3.675,3.78|C,0,7.99,5.097,3.769|C,0,8.9  
 45,3.062,2.831|C,0,8.491,2.463,0.514|C,0,6.125,5.927,0.078|C,0,6.577,6  
 .53,2.395|C,0,7.078,3.892,-0.863|C,0,7.724,7.216,1.97|C,0,9.113,5.807,  
 3.318|C,0,10.052,3.806,2.399|C,0,9.605,3.22,0.121|C,0,7.282,6.622,-0.3  
 07|C,0,8.217,4.623,-1.234|C,0,9.495,4.093,-0.98|C,0,8.173,6.029,-1.223  
 |C,0,7.892,7.508,0.604|C,0,10.262,5.1,2.911|C,0,8.934,7.044,2.666|C,0,  
 10.542,3.628,1.092|C,0,11.388,5.818,2.494|C,0,10.062,7.761,2.25|C,0,9.  
 026,8.222,0.199|C,0,9.307,6.744,-1.626|C,0,10.621,4.819,-1.384|C,0,11.  
 667,4.354,0.686|C,0,11.327,7.219,2.518|C,0,9.996,8.621,1.138|C,0,9.494  
 ,8.034,-1.109|C,0,10.48,6.071,-2.013|C,0,11.819,4.629,-0.681|C,0,12.28  
 6,5.267,1.56|C,0,11.622,6.803,-2.392|C,0,10.616,8.748,-1.514|C,0,11.14  
 4,9.317,0.714|C,0,11.282,9.624,-0.65|C,0,11.552,8.206,-2.403|C,0,12.89  
 1,6.246,-2.156|C,0,12.94,5.345,-1.086|C,0,12.448,7.933,2.111|C,0,12.33  
 7,9.155,1.438|C,0,13.402,6.011,1.13|C,0,13.611,7.29,1.673|C,0,13.894,5  
 .799,-0.169|C,0,13.585,9.402,0.85|C,0,14.37,8.253,0.995|C,0,12.54,9.86  
 7,-1.218|C,0,12.706,8.993,-2.297|C,0,14.032,7.052,-2.053|C,0,14.65,6.7  
 77,-0.829|C,0,13.992,8.441,-2.228|C,0,15.003,7.991,-0.227|C,0,13.72,9.  
 87,-0.463|C,0,14.638,9.022,-1.117|H,0,0.642,-0.187,1.64|H,0,-0.247,1.7  
 05,2.515|H,0,0.176,2.265,4.67|H,0,1.489,0.933,5.95|H,0,2.378,-0.959,5.  
 075|H,0,1.955,-1.519,2.92|N,0,6.814,4.036,1.714|N,0,7.712,4.609,1.389|  
 |Version=x86-Win32-G98RevA.11.2|HF=-3625.8696173|RMSD=1.146e-005|Dipol  
 e=0.8243455,0.5248586,-0.2987377|PG=C01 [X(C94H6N2)]||@

## Lampiran 3: Sifat Elektronik CNT (6,0) murni

Alpha occ. eigenvalues -- -11.09626 -11.09625 -11.09620 -11.09542 -11.09535  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.09534 -11.09523 -11.09521 -11.09514 -11.09127  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.09123 -11.09121 -11.09066 -11.09060 -11.09058  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.08919 -11.08916 -11.08910 -11.08593 -11.08587  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.08584 -11.08575 -11.08569 -11.08564 -11.07383  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07378 -11.07377 -11.07357 -11.07356 -11.07351  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07220 -11.07212 -11.07210 -11.07200 -11.07197  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07189 -11.07055 -11.07055 -11.07053 -11.07048  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.07047 -11.07043 -11.07031 -11.07029 -11.07023  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06970 -11.06965 -11.06963 -11.06845 -11.06838  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06836 -11.06823 -11.06822 -11.06816 -11.06268  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06265 -11.06263 -11.06256 -11.06251 -11.06235  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.06188 -11.06186 -11.06181 -11.05877 -11.05872  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.05868 -11.05854 -11.05853 -11.05847 -11.03990  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03983 -11.03976 -11.03967 -11.03964 -11.03952  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03840 -11.03832 -11.03812 -11.03808 -11.03803  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03782 -11.03560 -11.03553 -11.03548 -11.03536  
 Alpha occ. eigenvalues -- -11.03535 -11.03524 -10.98156 -10.98150 -10.98148  
 Alpha occ. eigenvalues -- -10.98094 -10.98055 -10.98034 -10.98031 -1.25914  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.24989 -1.22498 -1.22196 -1.22190 -1.20257  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.20255 -1.19285 -1.18000 -1.17998 -1.15577  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.14784 -1.14780 -1.13179 -1.13171 -1.11334  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.11006 -1.11004 -1.10526 -1.10525 -1.08082  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.08076 -1.06409 -1.05837 -1.05835 -1.04670  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.04668 -1.01227 -1.00698 -1.00692 -1.00583  
 Alpha occ. eigenvalues -- -1.00581 -1.00311 -1.00263 -0.98326 -0.98269  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.96887 -0.96882 -0.96840 -0.95940 -0.95933  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.94908 -0.92458 -0.91670 -0.90890 -0.90884  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.88360 -0.86531 -0.86527 -0.86261 -0.85852  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.85822 -0.85821 -0.85065 -0.83494 -0.83484  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.81459 -0.81362 -0.81355 -0.81184 -0.79727  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.79725 -0.78274 -0.78270 -0.78181 -0.77313  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.76076 -0.74892 -0.74890 -0.72949 -0.72946  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.72884 -0.72881 -0.71007 -0.70426 -0.70424  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.69565 -0.68217 -0.67507 -0.67501 -0.66797  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.66793 -0.65445 -0.65439 -0.64185 -0.64184  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.63908 -0.63864 -0.63233 -0.62945 -0.62267  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.62256 -0.61744 -0.61741 -0.61735 -0.61192  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.61186 -0.60958 -0.60954 -0.59684 -0.59680  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.58771 -0.58531 -0.58531 -0.58363 -0.58306  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.57160 -0.57157 -0.56447 -0.56434 -0.55899  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.55173 -0.54865 -0.54786 -0.54779 -0.54747  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.54503 -0.54497 -0.53501 -0.52784 -0.52781  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.52549 -0.52545 -0.52280 -0.51988 -0.51986  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.50960 -0.50958 -0.50663 -0.49494 -0.49357  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.49352 -0.49046 -0.48508 -0.48503 -0.48034  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.47418 -0.47411 -0.46245 -0.46239 -0.46238  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.46144 -0.45736 -0.45733 -0.44539 -0.44533  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.43797 -0.43788 -0.43386 -0.43380 -0.42950  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.42546 -0.41983 -0.41982 -0.41260 -0.41252  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.40696 -0.40689 -0.40400 -0.40301 -0.40297  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.39182 -0.38321 -0.38315 -0.37655 -0.36838  
 Alpha occ. eigenvalues -- -0.36764 -0.35587 -0.35585 -0.33999 -0.33996

Alpha occ. eigenvalues --	-0.32018	-0.29216	-0.29212	-0.28543	-0.28537
Alpha occ. eigenvalues --	-0.27022	-0.26737	-0.26676	-0.26017	-0.25476
Alpha occ. eigenvalues --	-0.24003	-0.23990	-0.22339	-0.22336	-0.21299
Alpha occ. eigenvalues --	-0.19056	-0.17659	-0.15135	-0.15128	-0.06464
Alpha virt. eigenvalues --	0.02729	0.02738	0.09792	0.09812	0.10156
Alpha virt. eigenvalues --	0.12330	0.12337	0.16841	0.16850	0.17388
Alpha virt. eigenvalues --	0.19754	0.19759	0.23004	0.23062	0.23694
Alpha virt. eigenvalues --	0.23708	0.24011	0.24039	0.24064	0.24838
Alpha virt. eigenvalues --	0.26762	0.26769	0.27829	0.28792	0.29918
Alpha virt. eigenvalues --	0.29921	0.31754	0.31877	0.32465	0.32469
Alpha virt. eigenvalues --	0.35431	0.35436	0.35641	0.36892	0.36902
Alpha virt. eigenvalues --	0.38803	0.40031	0.40295	0.40300	0.40852
Alpha virt. eigenvalues --	0.40862	0.42977	0.42980	0.44233	0.44234
Alpha virt. eigenvalues --	0.46281	0.46290	0.54559	0.56692	0.56719
Alpha virt. eigenvalues --	0.58209	0.58210	0.59391	0.60409	0.61124
Alpha virt. eigenvalues --	0.61136	0.61268	0.62278	0.62287	0.62738
Alpha virt. eigenvalues --	0.62862	0.62878	0.63163	0.64387	0.64394
Alpha virt. eigenvalues --	0.66051	0.66062	0.66292	0.66695	0.66708
Alpha virt. eigenvalues --	0.67140	0.68232	0.68516	0.68529	0.68957
Alpha virt. eigenvalues --	0.69370	0.69379	0.70111	0.71571	0.71578
Alpha virt. eigenvalues --	0.72056	0.72722	0.73256	0.73272	0.74182
Alpha virt. eigenvalues --	0.74258	0.74489	0.74503	0.75013	0.75022
Alpha virt. eigenvalues --	0.76134	0.76148	0.76158	0.76660	0.76666
Alpha virt. eigenvalues --	0.76686	0.77142	0.77147	0.77166	0.79006
Alpha virt. eigenvalues --	0.79021	0.79512	0.80126	0.80132	0.81263
Alpha virt. eigenvalues --	0.81747	0.81762	0.82377	0.82388	0.83623
Alpha virt. eigenvalues --	0.83629	0.84929	0.84938	0.85644	0.87443
Alpha virt. eigenvalues --	0.87740	0.87756	0.88316	0.89117	0.89174
Alpha virt. eigenvalues --	0.89175	0.89550	0.89569	0.90763	0.90898
Alpha virt. eigenvalues --	0.90927	0.91466	0.91472	0.92109	0.92186
Alpha virt. eigenvalues --	0.92203	0.92377	0.92746	0.92761	0.93352
Alpha virt. eigenvalues --	0.93361	0.93871	0.93876	0.94086	0.94623
Alpha virt. eigenvalues --	0.95522	0.95528	0.96489	0.96514	0.97677
Alpha virt. eigenvalues --	0.97692	0.97895	0.97904	0.98221	0.98546
Alpha virt. eigenvalues --	0.98559	0.99494	0.99508	0.99699	1.00613
Alpha virt. eigenvalues --	1.00641	1.00984	1.01783	1.01992	1.01997
Alpha virt. eigenvalues --	1.02103	1.02762	1.02770	1.04153	1.04901
Alpha virt. eigenvalues --	1.05454	1.05460	1.06632	1.07928	1.08094
Alpha virt. eigenvalues --	1.08593	1.08599	1.10709	1.10726	1.10846
Alpha virt. eigenvalues --	1.11451	1.11536	1.13611	1.13877	1.14778
Alpha virt. eigenvalues --	1.14786	1.15910	1.15914	1.15944	1.16260
Alpha virt. eigenvalues --	1.18922	1.18927	1.19983	1.19987	1.22449
Alpha virt. eigenvalues --	1.22455				

#### Lampiran 4: Sifat Elektronik CNT (6,0) terdoping nitrogen

Alpha occ. eigenvalues --	-15.50359	-15.50092	-11.09577	-11.09568	-11.09567
Alpha occ. eigenvalues --	-11.09366	-11.09361	-11.09360	-11.09356	-11.09354
Alpha occ. eigenvalues --	-11.09349	-11.09330	-11.09320	-11.09313	-11.09083
Alpha occ. eigenvalues --	-11.09081	-11.09075	-11.08994	-11.08990	-11.08983
Alpha occ. eigenvalues --	-11.08181	-11.08175	-11.08171	-11.08162	-11.08159
Alpha occ. eigenvalues --	-11.08152	-11.07266	-11.07260	-11.07259	-11.07250
Alpha occ. eigenvalues --	-11.07248	-11.07244	-11.07091	-11.07084	-11.07083
Alpha occ. eigenvalues --	-11.07070	-11.07070	-11.07062	-11.07047	-11.07042
Alpha occ. eigenvalues --	-11.07040	-11.07035	-11.07034	-11.07028	-11.06893
Alpha occ. eigenvalues --	-11.06887	-11.06884	-11.06874	-11.06870	-11.06864
Alpha occ. eigenvalues --	-11.06626	-11.06625	-11.06625	-11.06602	-11.06599
Alpha occ. eigenvalues --	-11.06598	-11.05991	-11.05983	-11.05980	-11.05965
Alpha occ. eigenvalues --	-11.05962	-11.05956	-11.05871	-11.05867	-11.05852
Alpha occ. eigenvalues --	-11.05839	-11.05838	-11.05832	-11.05808	-11.05807
Alpha occ. eigenvalues --	-11.05798	-11.03810	-11.03800	-11.03798	-11.03786
Alpha occ. eigenvalues --	-11.03783	-11.03774	-11.03646	-11.03636	-11.03634
Alpha occ. eigenvalues --	-11.03624	-11.03619	-11.03612	-11.03468	-11.03461
Alpha occ. eigenvalues --	-11.03453	-11.03444	-11.03436	-11.03428	-10.98521
Alpha occ. eigenvalues --	-10.98504	-10.98489	-10.98416	-10.98405	-10.98386
Alpha occ. eigenvalues --	-10.97786	-1.46317	-1.25379	-1.24032	-1.22216
Alpha occ. eigenvalues --	-1.21838	-1.21834	-1.19979	-1.19976	-1.18642
Alpha occ. eigenvalues --	-1.17743	-1.17740	-1.15291	-1.14556	-1.14555
Alpha occ. eigenvalues --	-1.12931	-1.12924	-1.10800	-1.10786	-1.10781
Alpha occ. eigenvalues --	-1.10260	-1.10258	-1.07893	-1.07886	-1.06079
Alpha occ. eigenvalues --	-1.05499	-1.05497	-1.04462	-1.04459	-1.00729
Alpha occ. eigenvalues --	-1.00475	-1.00474	-1.00423	-1.00410	-1.00382
Alpha occ. eigenvalues --	-1.00376	-0.98237	-0.98165	-0.96753	-0.96415
Alpha occ. eigenvalues --	-0.96414	-0.95691	-0.95687	-0.95115	-0.92081
Alpha occ. eigenvalues --	-0.91324	-0.90746	-0.90743	-0.88208	-0.86361
Alpha occ. eigenvalues --	-0.86358	-0.85918	-0.85802	-0.85566	-0.85563
Alpha occ. eigenvalues --	-0.84935	-0.83425	-0.83422	-0.81229	-0.81226
Alpha occ. eigenvalues --	-0.81188	-0.80954	-0.79354	-0.79351	-0.78216
Alpha occ. eigenvalues --	-0.78213	-0.77755	-0.77092	-0.75952	-0.75745
Alpha occ. eigenvalues --	-0.74820	-0.74819	-0.72742	-0.72739	-0.72511
Alpha occ. eigenvalues --	-0.72510	-0.70558	-0.70311	-0.70307	-0.69172
Alpha occ. eigenvalues --	-0.67769	-0.67116	-0.67116	-0.66866	-0.66861
Alpha occ. eigenvalues --	-0.65895	-0.65893	-0.65067	-0.65057	-0.64851
Alpha occ. eigenvalues --	-0.64465	-0.64460	-0.63245	-0.62792	-0.62520
Alpha occ. eigenvalues --	-0.62197	-0.62193	-0.61592	-0.61585	-0.61167
Alpha occ. eigenvalues --	-0.61054	-0.61049	-0.60581	-0.60576	-0.58520
Alpha occ. eigenvalues --	-0.58356	-0.58351	-0.57777	-0.57716	-0.57077
Alpha occ. eigenvalues --	-0.57075	-0.56681	-0.55946	-0.55939	-0.55532
Alpha occ. eigenvalues --	-0.55086	-0.55084	-0.54647	-0.54622	-0.54233
Alpha occ. eigenvalues --	-0.54227	-0.53624	-0.53608	-0.53605	-0.53033
Alpha occ. eigenvalues --	-0.52409	-0.52404	-0.52210	-0.52204	-0.51685
Alpha occ. eigenvalues --	-0.51683	-0.51139	-0.50791	-0.50223	-0.50218
Alpha occ. eigenvalues --	-0.49731	-0.49003	-0.48998	-0.48919	-0.47779
Alpha occ. eigenvalues --	-0.47776	-0.47646	-0.47639	-0.46598	-0.46396
Alpha occ. eigenvalues --	-0.45658	-0.45653	-0.45167	-0.45162	-0.44630
Alpha occ. eigenvalues --	-0.44096	-0.44094	-0.43732	-0.43723	-0.42900
Alpha occ. eigenvalues --	-0.42406	-0.42220	-0.42212	-0.41542	-0.41532
Alpha occ. eigenvalues --	-0.40935	-0.40930	-0.40298	-0.40291	-0.40143
Alpha occ. eigenvalues --	-0.39894	-0.39886	-0.39153	-0.38276	-0.38269

Alpha occ. eigenvalues --	-0.37103	-0.36929	-0.36181	-0.34802	-0.34798
Alpha occ. eigenvalues --	-0.33864	-0.33862	-0.31239	-0.29047	-0.29038
Alpha occ. eigenvalues --	-0.28341	-0.28335	-0.27913	-0.27774	-0.26264
Alpha occ. eigenvalues --	-0.25673	-0.25520	-0.23314	-0.23308	-0.22339
Alpha occ. eigenvalues --	-0.22330	-0.21514	-0.18720	-0.17279	-0.15137
Alpha occ. eigenvalues --	-0.15127	-0.06640			
Alpha virt. eigenvalues --	0.02779	0.02782	0.09481	0.09487	0.10081
Alpha virt. eigenvalues --	0.11263	0.11275	0.16827	0.16830	0.17413
Alpha virt. eigenvalues --	0.19738	0.19742	0.22066	0.22196	0.23370
Alpha virt. eigenvalues --	0.23376	0.23688	0.24210	0.24551	0.25099
Alpha virt. eigenvalues --	0.25344	0.25345	0.27513	0.27515	0.27599
Alpha virt. eigenvalues --	0.28733	0.29839	0.29843	0.31565	0.32190
Alpha virt. eigenvalues --	0.32388	0.32397	0.34729	0.35144	0.35154
Alpha virt. eigenvalues --	0.36342	0.36349	0.38876	0.39474	0.39475
Alpha virt. eigenvalues --	0.39564	0.40933	0.40942	0.42524	0.42531
Alpha virt. eigenvalues --	0.44188	0.44191	0.45661	0.45662	0.54846
Alpha virt. eigenvalues --	0.57130	0.57142	0.58573	0.58596	0.59712
Alpha virt. eigenvalues --	0.60601	0.61030	0.61439	0.61447	0.62664
Alpha virt. eigenvalues --	0.62680	0.63071	0.63294	0.63309	0.63421
Alpha virt. eigenvalues --	0.64451	0.64462	0.65939	0.66164	0.66179
Alpha virt. eigenvalues --	0.66924	0.66929	0.67376	0.67884	0.68553
Alpha virt. eigenvalues --	0.68672	0.68676	0.69182	0.69527	0.69554
Alpha virt. eigenvalues --	0.70953	0.70968	0.71926	0.71936	0.72131
Alpha virt. eigenvalues --	0.72647	0.73662	0.73672	0.74103	0.74333
Alpha virt. eigenvalues --	0.75005	0.75015	0.75266	0.75957	0.75960
Alpha virt. eigenvalues --	0.76184	0.76206	0.76258	0.76649	0.76654
Alpha virt. eigenvalues --	0.77366	0.78262	0.78266	0.79571	0.79588
Alpha virt. eigenvalues --	0.79628	0.81268	0.81277	0.81397	0.82193
Alpha virt. eigenvalues --	0.82198	0.83165	0.83172	0.84085	0.84088
Alpha virt. eigenvalues --	0.85286	0.86584	0.87582	0.87915	0.87927
Alpha virt. eigenvalues --	0.88266	0.88280	0.88656	0.88661	0.88993
Alpha virt. eigenvalues --	0.89002	0.89167	0.89754	0.91078	0.91092
Alpha virt. eigenvalues --	0.91657	0.91668	0.91756	0.91766	0.91845
Alpha virt. eigenvalues --	0.92476	0.93021	0.93037	0.93456	0.93459
Alpha virt. eigenvalues --	0.93652	0.93912	0.95479	0.95481	0.95727
Alpha virt. eigenvalues --	0.95737	0.96216	0.96638	0.97367	0.97814
Alpha virt. eigenvalues --	0.97823	0.98429	0.98438	0.98713	0.99138
Alpha virt. eigenvalues --	0.99154	1.00785	1.00938	1.00943	1.01846
Alpha virt. eigenvalues --	1.01854	1.01954	1.02007	1.02832	1.02845
Alpha virt. eigenvalues --	1.03896	1.04759	1.05448	1.05463	1.06406
Alpha virt. eigenvalues --	1.06697	1.06999	1.08410	1.08431	1.08437
Alpha virt. eigenvalues --	1.08912	1.10071	1.10620	1.10622	1.11100
Alpha virt. eigenvalues --	1.12979	1.13480	1.13882	1.13889	1.15826
Alpha virt. eigenvalues --	1.15841	1.15844	1.16245	1.18538	1.18547
Alpha virt. eigenvalues --	1.20008	1.20012	1.21506	1.21507	

## RIWAYAT HIDUP KETUA PENELITIAN

1. Nama Lengkap : Rahadian Z, S.Pd., M.Si.  
 2. NIP/NIK : 132280883  
 3. Tempat dan tanggal lahir : Sungai Penuh/ 21 Januari 1974  
 4. Jenis Kelamin : Laki laki  
 5. Pangkat, Golongan : Penata Muda, III a  
 6. Jabatan Fungsional : Asisten Ahli  
 7. Alamat Kantor : Jurusan Kimia FMIPA UNP  
 Jl Prof Dr Hamka Air Tawar Padang  
 Sumatera Barat  
 8. Alamat Rumah : Jl. Datuk Perpatih Nan Sabatang No 287  
 Air Mati Kota Solok  
 9. Telpon : HP 08126633671

### 10. Riwayat Pendidikan

- S1 Jurusan Pendidikan Kimia FPMIPA IKIP Padang, berijazah (1997)
- S2 Kimia Fisika, Universitas Andalas Padang, berijazah (1999)

### 11. Pengalaman Penelitian yang Relevan

- Pembuatan Penuntun Praktikum Kimia Bergambar, Jurusan Kimia FPMIPA IKIP Padang (1997).
- Pembuatan CD (*Compact Disk*) Interaktif pada Pembelajaran Struktur Atom Kelas X Sekolah Menengah Atas, UNP Padang (2007)
- Pembuatan Video Tutorial Interaktif pada Pembelajaran Sistem Koloid, UNP Padang (2007)
- Pembuatan CD Interaktif Pada Pembelajaran Larutan dengan Macromedia Flash MX, UNP Padang (2007)

### 12. Mata kuliah yang diampu dalam dua tahun terakhir

- Pemanfaatan Komputer dalam Pendidikan Kimia
- Media Pembelajaran dalam Kimia
- Kimia Komputasi
- Kimia Fisika 3
- Praktikum Kimia Fisika 1
- Praktikum Kimia Fisika 2

Padang, Februari 2008

Rahadian Z, S.Pd, M.Si  
 NIP. 132280883

## RIWAYAT HIDUP ANGGOTA PENELITI

### 1. Biodata

Nama Lengkap	: Fajriah Azra, S.Pd, M.Si
NIP	: 132300893
Tempat tanggal lahir	: Kubang, 8 Februari 1976
Jenis Kelamin	: Perempuan
Golongan/ Pangkat/ NIP	: IIIb / Penata Muda Tk. I / 132 300 893
Jabatan Fungsional	: Asisten Ahli
Instansi	: FMIPA UNP
Alamat dan telpon	: Komplek TNI AL H. Agus Salim, Siteba. Blok B No. 4, Kelurahan Surau Gadang, RT 05 / XIX / Padang

### II. Riwayat Pendidikan

- S1 Jurusan Kimia FMIPA UNP (1995-1999) di Padang
- S2 Jurusan Kimia FMIPA UGM (2000-2002) di Yogyakarta
- S3 Jurusan Kimia FMIPA UGM (2006-sekarang) di Yogyakarta

### III. Riwayat Pekerjaan:

- 2003 – sekarang : Dosen Jurusan Kimia FMIPA UNP
- 2004 – 2005 : Sekretaris Pengelola Program Non Reguler  
Jurusan Kimia FMIPA UNP.
- 2005 : Pembimbing Peserta Olimpiade Kimia di SMU  
Don Bosco Padang.

### III. Pengalaman penelitian :

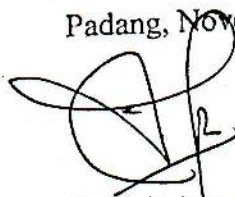
- Penentuan Kadar Asam Benzoat dalam Sirup dan Limun Produksi Industri Rumah Tangga di Padang, 1999.
- Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antiplasmodium Senyawa 1,10-Fenantrolin, 2002.
- Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antioksidan Satu Seri Senyawa Turunan Flavonoid. (Dana DIPA, 2006).
- Analisis HKSA antikanker senyawa turunan imidazoquinoline-5,8-dione berdasarkan parameter muatan atom netto. (Dana DIPA, 2008)
- Pengaruh doping nitrogen terhadap struktur dan sifat elektronik Carbon Nanotube (CNT) (Dana DIPA 2008)

### III. Kegiatan Ilmiah yang pernah diikuti:

- Pemakalah dalam Seminar Nasional dan Rapat Tahunan (SEMIRATA VXI) BKS- PTN Indonesia Wilayah Barat, 2-3 Juni 2003 di Kampus UNSRI – Palembang.
- Pemakalah dalam Seminar Nasional bidang MIPA, 11-12 Februari 2005, di Kampus UNP Padang.

- Peserta dalam Seminar Internasional "*An insight into global Education*" 19 Februari 2005, di UNP.
- Pengabdian Masyarakat "Penerapan Kimia terpakai Bagi Ibu-Ibu PKK di Desa Kampung Bendang Kelurahan Sungai Sariak Kecamatan VII Koto Kabupaten Padang Pariaman., 2003.
- Pengabdian masyarakat "Penerapan Kimia terpakai Bagi Guru-guru dan Siswa SLB Wacana Asih, Padang, 2004.
- Dewan Juri dalam Lomba Kimia Tingkat SMU Se-Sumatera Barat, 2003. Diadakan Kimia FMIPA UNP.
- Pemakalah dalam Simposium Nasional "100 Tahun Kebangkitan Nasional dalam Berbagai Perspektif". UGM Yogyakarta, 16-17 Mei 2008.

Padang, November 2008



Fajriah Azra, S.Pd, M.Si  
NIP. 132 300 893



**BERITA ACARA SERAH TERIMA  
LAPORAN HASIL PELAKSANAAN PENELITIAN DIPA**

**Nomor : 536/H35.2/PG/2008**

Pada hari ini Senin tanggal dua puluh lima bulan November tahun dua ribu delapan, kami yang bertanda tangan di bawah ini:

1. Prof. Dr. H. Anas Yasin, M.A. : Selaku Ketua Lembaga Penelitian Universitas Negeri Padang, berdasarkan Surat Keputusan Menteri Pendidikan Nasional Republik Indonesia No. 27/J.41/KP/2005 tanggal 7 Februari 2005 dalam hal ini bertindak atas nama Pemerintah Republik Indonesia, selanjutnya disebut **PIHAK KESATU**.
2. Rahadian Z, S.Pd, M, Si : Selaku Ketua Proyek Penelitian, beralamat di Jurusan Kimia Fakultas FMIPA Universitas Negeri Padang dalam hal ini bertindak untuk dan atas nama peneliti/ kelompok peneliti, selanjutnya disebut **PIHAK KEDUA**.

Menerangkan bahwa :

1. Berdasarkan **Surat Perjanjian Pelaksanaan Penelitian** Nomor: 025/H35.2/DIPA/KU/2014 Tanggal 2 Juni 2008, **PIHAK KEDUA** telah menyerahkan **Laporan Akhir Hasil Pelaksanaan Penelitian** dengan judul penelitian *Pengaruh Doping Nitrogen terhadap Struktur dan Sifat Elektronik Carbon Nanotube (CNT)* sebanyak 2 (dua) eksampul sesuai dengan format laporan yang telah ditentukan oleh **PIHAK PERTAMA** yang tertuang dalam buku Panduan Penelitian Universitas Negeri Padang dan **PIHAK PERTAMA** telah menerima serta menyetujui laporan tersebut dengan **PIHAK KEDUA**
2. Sesuai dengan Pasal 4 ayat b dalam **Surat Perjanjian Pelaksanaan Penelitian PIHAK KEDUA** berhak menerima Pembayaran Tahap Kedua sebesar 30% dari Dana DIPA (30% x Rp. 5.000.000,-) yaitu sebesar Rp. 1.500.000,- (Satu juta lima ratus riburupiah)
3. Berita Acara ini dibuat rangkap 2 (dua) untuk dipergunakan sesuai dengan keperluan.

PIHAK KEDUA

Rahadian Z, S.Pd, M, Si  
NIP. 132280983

PIHAK KESATU

Prof. Dr.H. Anas Yasin, M.A.  
NIP 130365634

KUITANSI

Sudah terima dari : Rektor Universitas Negeri Padang

Uang sebesar : ===== Satu juta lima ratus ribu rupiah =====

Pembayaran untuk : biaya penelitian Dana DIPA UNP tahun anggaran 2008 tahap II (dua) sebesar 30% dari nilai Kontrak No.: 025/H35.2/DIPA/KU/2014 tanggal 2 Juni 2008.

30% x Rp. 5.000.000,- = Rp. 1.500.000,- dengan rincian berupa:

- a. Belanja Barang = Rp. 1.050.000,-
- b. Transpor = Rp. 450.000,-

Pemotongan : Fee Lembaga 8,5 % x Rp. 1.500.000,- = Rp. 127.500,-  
PPH 4,5 % x Rp. 1.050.000,- = Rp. 47.250,-

Diterima Bersih Rp. 1.325.250,-

Mengetahui:  
Ketua Lembaga Penelitian  
Universitas Negeri Padang,



Prof. Dr. H. Anas Yasin, M.A.  
NIP. 130365634

Padang, 25 November 2008

Yang menerima,  
Ketua : Rahadian Z, S.Pd, M, Si

Anggota : Fajriah Azra, S.Pd., M.Si.

