

Analisa pengaruh molecule attachment terhadap besarnya absorption energy pada nanotube dengan simulasi exchange correlation energy pada Matlab 6.5

Fani Triwiyanto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20242522&lokasi=lokal>

Abstrak

Fenomena charge transfer pada nanotube terjadi ketika nanotube bereaksi dengan molekul lain. Charge transfer ini terjadi karena adanya perubahan orbital elektron dalam sebuah atom dan interaksi antar elektron dalam molekul, sehingga elektron tersebut akan melepaskan sebagian energinya. Proses charge transfer ini dapat dijelaskan dengan metode Lennard-Jones interaction, Local Density Approximation (LDA) dan Generalized Gradient Approximation (GGA). Metode memperhitungkan spin dari elektron. Pada penelitian ini dilakukan simulasi dengan menggunakan software mathcad dan Matlab 6.5 guna mempelajari pengaruh molecule attachment terhadap besar absorption energi di nanotube. Besarnya charge transfer ini dipengaruhi oleh jari-jari dan nomor atom. Atom oksigen, nitrogen dan hidrogen digunakan untuk mengetahui besarnya charge transfer pada nanotube, karena ketika unsur ini merupakan penyusun utama dari molekul organik. Hasil simulasi yang dilakukan menunjukkan besar absorption energy tiap atom berbeda-beda. Atom oksigen mempunyai nilai absorption energy yang terbesar, yaitu ~ -6.7 H, hal ini dikarenakan reaksi antara nanotube dengan oksigen mempunyai ikatan yang stabil dengan bond order = 3, Atom nitrogen menghasilkan absorption energy sebesar ~ -2 H dan atom hidrogen sebesar $\sim +0.6$ H.