

PENGARUH ENKAPSULASI LOGAM Ga DAN As TERHADAP CELAH PITA *BORON NITRIDE NANOTUBE*_(4,4)

Andriana*), Agung Tri Prasetya dan Harjito

Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Semarang

Gedung D6 Kampus Sekaran Gunungpati Telp. (024)8508112 Semarang 50229

Info Artikel

Sejarah Artikel:
Diterima Januari 2013
Disetujui Januari 2013
Dipublikasikan Mei 2013

Kata kunci:
BNNT
celah pita
DFT

Abstrak

Tujuan utama dari penelitian ini adalah untuk menurunkan nilai celah pita BNNT sehingga diperoleh BNNT yang bersifat semikonduktor. BNNT yang bersifat semikonduktor ini diharapkan bisa menjadi alternatif bagi CNT. Untuk menurunkan nilai celah pita BNNT, pada penelitian ini dilakukan enkapsulasi Galium (Ga) dan Arsen (As). Penelitian ini dilakukan menggunakan metode DFT/B₃LYP menggunakan paket Gaussian® 03W dan hasilnya dianalisis menggunakan GaussSum 2.2. Penelitian ini menggunakan BNNT_(4,4) yang terdiri dari 4 repetisi cincin BN. Penurunan celah pita diukur menggunakan metode DFT/B₃LYP dengan berbagai *basis set* yakni STO-3G, 3-21G, dan 6-311G. Perhitungan menggunakan STO-3G menunjukkan bahwa celah pita dari BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, dan BNNT_(4,4)-As berturut-turut adalah sebesar 6,10 eV, 2,35 eV, dan 2,99 eV. Perhitungan yang menggunakan 3-21G menunjukkan celah pita dari BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, dan BNNT_(4,4)-As berturut-turut adalah sebesar 6,04 eV, 2,31 eV, dan 2,88 eV. Perhitungan menggunakan 6-311G juga menunjukkan hasil yang identik, celah pita BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, dan BNNT_(4,4)-As berturut-turut adalah sebesar 6,10 eV, 2,25 eV, dan 2,55 eV. Dari penelitian ini dapat disimpulkan bahwa enkapsulasi Ga dan As pada BNNT_(4,4) dapat menurunkan nilai celah pita dari BNNT_(4,4).

Abstract

The main objective of this research is to reduce the band gap of BNNTs to obtain BNNTs which are semiconductor. These semiconducting BNNTs are expected to be an alternative for CNTs. To reduce the band gap of BNNT, encapsulations of gallium (Ga) and arsenic (As) were performed. This study performed through DFT/B₃LYP method using Gaussian® 03W suite and analyzed using GaussSum 2.2. This study uses BNNT_(4,4) consisting of 4 repetitions BN ring. The decreased of BNNT_(4,4)'s band gap is addressed by DFT/B₃LYP calculation with various basis sets which are STO-3G, 3-21G, and 6-311G. Calculations were performed using STO-3G basis set showed that the band gap of BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, and BNNT_(4,4)-As is 6.10 eV, 2.35 eV, and 2.99 eV respectively. Then the calculations were performed using 3-21G basis set showed that the band gap of BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, and BNNT_(4,4)-As is 6.04 eV, 2.31 eV, and 2.88 eV respectively. Finally the calculations were performed using 6-311G basis set showed identical result, the band gap of BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, and BNNT_(4,4)-As is 6.10 eV, 2.25 eV, and 2.55 eV respectively. This study have a conclusion that encapsulation of Ga and As by BNNT_(4,4) could reduce the value of BNNT_(4,4)'s band gap.

Pendahuluan

Teknologi komputer telah berkembang sangat pesat. Pada awal penemuannya komputer berukuran beberapa meter persegi, tetapi sekarang kita dapat menjumpai di sekitar kita telah banyak komputer yang ukurannya hanya beberapa senti meter persegi saja dengan kemampuan yang lebih baik. Sejalan dengan perkembangan teknologi komputer yang sangat pesat, di sisi lain teknologi nano juga mulai menarik minat para ilmuwan. Teknologi nano ini dapat dimanfaatkan dalam bidang elektronik (khususnya teknologi komputer) untuk terciptanya perangkat yang lebih portabel, lebih cepat, lebih dapat diandalkan dan lebih hemat energi.

Dalam harapan untuk mendapatkan manfaat dari teknologi nano tersebut, kita ditantang untuk mendapatkan material nano yang bersifat semikonduktor, sehingga dapat diaplikasikan dalam pembuatan perangkat elektronik. Selama ini material nano yang telah banyak menarik minat para ilmuwan adalah *carbon nanotube* (CNT). Para ilmuwan tertarik kepada CNT dikarenakan sifat-sifat elektronik, mekanik, dan termal yang luar biasa dari CNT. Menurut Patel *et al.* (2012), CNT berdingg tunggal dapat bersifat baik itu metalik ataupun semikonduktor tergantung pada penggulangan nya.

Menurut Huang *et al.* (2002), sejauh ini pemurnian atau sintesis terkontrol CNT dengan penggulangan tertentu belum bisa tercapai. Padahal untuk penggunaan di bidang elektronik, sangat diperlukan keseragaman celah pita pada bahan yang digunakan. Karena kesulitan tersebut, sehingga pembuatan perangkat elektronik menggunakan CNT masih sulit untuk dilakukan. Untuk mengatasi masalah tersebut, maka dicarilah alternatif lain. Perhatian pun beralih ke *boron nitride nanotube* (BNNT), yang dikatakan oleh Cohen & Zettl (2010) bahwa BNNT ini merupakan *nanotube* semikonduktor yang memiliki keseragaman celah pita tanpa dipengaruhi oleh pola penggulangannya.

Secara struktural, BNNT memiliki struktur yang mirip dengan CNT, dimana atom karbon secara bergantian diganti dengan atom nitrogen dan boron. Namun, sifat BNNT sangat berbeda, sementara CNT dapat bersifat konduktor atau semikonduktor tergantung pada arah penggulangan dan jari-jari, sedangkan BNNT adalah semikonduktor bercelah pita lebar. Padahal menurut He *et al.* (2008), dalam

penggunaannya di bidang elektronik, penurunan besarnya celah pita BNNT sangat diperlukan untuk mendapatkan BNNT tipe semikonduktor.

Menurut He *et al.* (2008), celah pita BNNT dapat disesuaikan dengan mengubah komposisi kimia, misalnya dengan menggantikan atom B atau N dengan atom C. Namun, sulit untuk mengendalikan tepat konsentrasi atom karbon dalam *nanotube* BNC pada tahap pertumbuhan tabung. Besarnya celah pita BNNT juga dapat diubah oleh molekul organik kovalen fungsional, atau dengan menerapkan medan listrik melintang melalui efek stark. Jenis metode lain untuk rekayasa struktur elektronik BNNT adalah enkapsulasi. Enkapsulasi dalam BNNT dapat berupa atom logam dan fulleren.

Dari fakta di atas dan kebutuhan akan BNNT yang bersifat semikonduktor maka penelitian ini dilakukan. Penelitian yang dilakukan berupa pengekapsulasian logam Galium (Ga) atau Arsen (As) pada BNNT, dengan harapan dapat mengubah struktur pita BNNT, sehingga didapatkan BNNT yang bersifat semikonduktor. Adapun tujuan lebih jauhnya dapat diaplikasikan pada pembuatan perangkat elektronik yang lebih portabel, lebih cepat, lebih dapat diandalkan, dan lebih hemat energi. Selain itu, BNNT sangat kuat dan tahan terhadap suhu tinggi bahkan melebihi CNT sehingga memungkinkan untuk penggunaan pada perangkat yang berdaya tinggi dan perangkat yang bekerja pada temperatur tinggi.

Metode Penelitian

Penelitian ini dilakukan menggunakan metode *density functional theory* (DFT) dengan fungsional B₃LYP. Metode DFT ini merupakan bagian dari metode kimia kuantum (struktur elektronik). Metode DFT ini dipilih karena merupakan metode yang mengarahkan pada perhitungan struktur elektron, sehingga bisa digunakan untuk pengukuran celah pita dalam suatu sampel.

Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini berupa perangkat keras dan perangkat lunak. Perangkat keras yang digunakan adalah komputer "HP Compaq dc7900 CMT Base Unit PC" dengan penambahan RAM sebesar 2 GB, sehingga totalnya menjadi 4 GB. Perangkat lunak yang digunakan Accelrys Material Studio® 4.4, paket Gaussian® 03W dan GaussSum 2.2 dengan sistem operasi Windows Vista™ Business 32 bit. Sementara sampel yang digunakan dalam

penelitian ini adalah struktur BNNT_(4,4) yang terdiri dari 4 repetisi cincin B-N serta atom-atom logam Ga dan As yang dimodelkan berdasarkan kaidah kimia komputasi.

Variabel-variabel bebas yang diterapkan dalam penelitian ini adalah jenis *basis set* dan jenis logam yang disisipkan pada struktur BNNT_(4,4). Dengan variasi *basis set* berupa STO-3G, 3-21G, dan 6-311G, serta variasi logam berupa logam Ga dan As. Variabel-variabel terikat dalam penelitian ini adalah bentuk geometri sampel dan celah pita BNNT sebelum dan sesudah disisipi logam Ga dan As. Selain kedua hal tersebut besarnya energi enkapsulasi juga termasuk dalam variabel terikat ini. Sedangkan variabel-variabel terkendalinya meliputi struktur BNNT_(4,4) yang digunakan, jumlah logam yang dienkapsulasi, metode DFT, dan kondisi virtual dalam penelitian komputasi ini.

Dalam penelitian ini metode DFT dengan fungsi B₃LYP dipakai untuk melakukan optimasi struktur sampel, pengukuran energi serta pengukuran celah pita. Metode ini sudah digunakan secara luas dalam kalkulasi teoritis terkait penelitian bersampel *nanotube*, termasuk di dalamnya studi mengenai bentuk geometri struktur maupun sifat elektroniknya. Prosedur yang dilakukan dalam penelitian ini adalah dengan membuat pemodelan struktur BNNT_(4,4) menggunakan Accelrys Material Studio® 4.4. Kemudian struktur tersebut digandakan menjadi tiga, yang pertama dibiarkan saja tanpa dilakukan enkapsulasi terhadapnya, struktur kedua disisipkan logam Ga terhadapnya (BNNT_(4,4)-Ga) menggunakan Gauss-View® 03W, demikian juga struktur ketiga disisipkan logam As terhadapnya (BNNT_(4,4)-As). Langkah selanjutnya struktur-struktur tersebut digandakan menjadi tiga karena penelitian ini berlangsung secara 'triplo' kemudian dioptimasi menggunakan Gaussian® 03W. Langkah terakhir, struktur-struktur tersebut diukur nilai celah pitanya menggunakan GaussSum 2.2.

Hasil dan Pembahasan

Struktur sebelum dioptimasi geometri atau masih berupa *template* dari perangkat lunak Accelrys Material Studio® 4.4 memiliki panjang 9,84 Å dan berdiameter 5,42 Å. Struktur BNNT_(4,4) yang dipakai dalam penelitian ini adalah struktur yang terdiri dari 80 atom dengan panjang 4 repetisi cincin BN, dan pada kedua ujung tabungnya diberikan atom-atom hidrogen. Menurut Baei *et al.* (2011), karena tidak adanya keadaan batas berkala

dalam perhitungan molekuler, sehingga diperlukan adanya penjenjuran dari ikatan B maupun N yang menjuntai di ujung *nanotube* yang dibuat, penjenjuran ini dilakukan dengan menambahkan atom-atom hidrogen pada ujung *nanotube*.

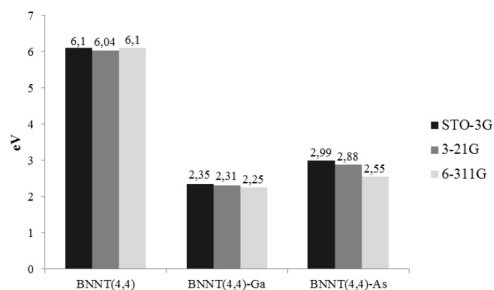
Struktur hasil optimasi tidak memiliki perbedaan yang signifikan jika dibandingkan dengan struktur sebelum dioptimasi. Optimasi ini dilakukan dengan berbagai *basis set*, penentuan *basis set* yang digunakan dalam penelitian ini berdasarkan referensi dari situs "EMSL Basis Set Exchange" yang beralamat di <https://bse.pnl.gov/bse/portal>. Selain mengacu pada situs tersebut, penentuan *basis set* ini juga mempertimbangkan kemampuan *hardware* yang dipakai dalam penelitian serta kompleksitas sistem yang diteliti.

Setelah dilakukan optimasi geometri menggunakan metode DFT/B₃LYP dengan menggunakan tiga macam *basis set*, didapatkan data panjang ikatan serta diameter rongga dari BNNT_(4,4), BNNT_(4,4)-Ga, dan BNNT_(4,4)-As. Dari hasil optimasi ketiga *basis set*, *basis set* 6-311G menghasilkan struktur dengan panjang ikatan yang lebih pendek jika dibandingkan dengan struktur hasil optimasi menggunakan *basis set* STO-3G maupun 3-21G. Dengan kata lain optimasi menggunakan *basis set* 6-311G menghasilkan struktur yang atom-atomnya lebih rapat (*compact*). Untuk pengukuran jari-jari struktur, pengukuran dilakukan di tiga lokasi, yaitu pada kedua ujung dan bagian tengah dari struktur. Khusus untuk BNNT_(4,4)-Ga pada bagian tengah diukur di dua lokasi, karena posisi logam yang berada di antara dua deret atom-atom pada cincin BN. Dari hasil pengukuran didapati bahwa diameter BNNT_(4,4)-Ga cenderung lebih menggelembung di bagian tengahnya apabila dibandingkan dengan BNNT_(4,4), sementara BNNT_(4,4)-As cenderung lebih menciut. Meskipun dapat dikatakan di antara ketiganya tidak memiliki perbedaan diameter yang signifikan.

Apabila kita mencoba untuk menghubungkan antara diameter struktur dan besarnya celah pita, didapati bahwa tidak ada korelasi antara 'besarnya diameter BNNT_(4,4) akibat enkapsulasi' dengan 'besarnya celah pita'. Dengan membandingkan data-data diameter tabung dengan data celah pita pada Gambar 1, misalnya kita berasumsi "semakin menggelembung tabung BNNT_(4,4) (akibat enkapsulasi) pada bagian tengahnya maka semakin rendah celah pitanya", seharusnya

urutan dari celah pita terbesar ke yang terkecil adalah $\text{BNNT}_{(4,4)}\text{-As}$, $\text{BNNT}_{(4,4)}$, dan $\text{BNNT}_{(4,4)}\text{-Ga}$. Kemudian apabila kita berasumsi “semakin menciut tabung $\text{BNNT}_{(4,4)}$ (akibat enkapsulasi) pada bagian tengahnya maka semakin rendah celah pitanya”, seharusnya urutan dari celah pita terbesar ke yang terkecil adalah $\text{BNNT}_{(4,4)}\text{-Ga}$, $\text{BNNT}_{(4,4)}$, dan $\text{BNNT}_{(4,4)}\text{-As}$. Padahal dari hasil penelitian (seperti tertera pada Gambar 1) didapatkan urutan dari nilai celah pita terbesar ke yang terkecil adalah $\text{BNNT}_{(4,4)}$, $\text{BNNT}_{(4,4)}\text{-As}$ dan $\text{BNNT}_{(4,4)}\text{-Ga}$.

Besarnya nilai celah pita didapat dengan menghitung besarnya selisih antara nilai dari *highest occupied molecular orbital* (HOMO) dan *lowest unoccupied molecular orbital* (LUMO) pada sampel yang dianalisis. Adapun nilai dari HOMO dan LUMO sendiri didapat dengan mengukur *density of space* (DOS) dari sampel yang dianalisis. Dari penelitian menggunakan tiga *basis set* yang berbeda menunjukkan hasil yang sejalan dengan hasil penelitian yang dilakukan oleh Baei *et al.* (2011) yang mendapati besarnya celah pita pada $\text{BNNT}_{(4,4)}$ sebesar 6,31 eV. Atau secara kasar dikatakan celah pita dari $\text{BNNT}_{(4,4)}$ adalah sekitar 6 eV seperti yang didapat pada penelitian ini. Untuk besarnya celah pita yang diperoleh dalam penelitian ini dapat dilihat pada Gambar 1.

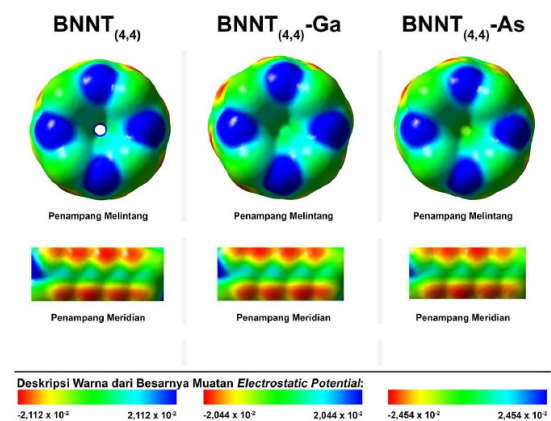


Gambar 1. Nilai celah pita sampel penelitian hasil optimasi menggunakan metode DFT/ B_3LYP

Pada Gambar 1 terlihat bahwa metode DFT/ B_3LYP yang digunakan dalam penelitian ini menghasilkan data yang tidak terlalu berbeda antar *basis set* yang digunakan. Ketiga *basis set*, yakni STO-3G, 3-21G dan 6-311G memberikan hasil yang serupa. Dari hasil pengukuran celah pita ini didapatkan hasil yang menunjukkan bahwa besarnya celah pita dari $\text{BNNT}_{(4,4)}$ dapat diturunkan dengan cara enkapsulasi logam, dalam hal ini enkapsulasi logam Ga maupun As. Penurunan celah pita pada pengenkapsulasian logam Ga lebih besar jika dibandingkan pada pengenkapsulasian As, meskipun bisa dikatakan bahwa keduanya

memberikan penurunan yang signifikan.

Penurunan celah pita pada penelitian ini dikarenakan enkapsulasi logam Ga maupun As, dapat mengganggu terjadinya transfer muatan elektron dari B ke N dalam $\text{BNNT}_{(4,4)}$ yang merupakan penyebab kenapa $\text{BNNT}_{(4,4)}$ memiliki celah pita yang lebar (Cohen & Zettl, 2010). Fenomena tersebut dapat diamati dengan melihat grafik penyebaran muatan dalam sistem yang diteliti seperti tertera pada Gambar 2.



Gambar 2. Kerapatan muatan elektron yang dipetakan berdasar *electrostatic potential*

Gambar 2 adalah gambaran dari kerapatan muatan elektron yang dipetakan berdasar *electrostatic potential* (ESP) hasil optimasi dan pengukuran menggunakan metode DFT/ B_3LYP dengan *basis set* 6-311G. Gambar tersebut menunjukkan adanya transfer muatan elektron antara $\text{BNNT}_{(4,4)}$ dengan logam yang dienkapsulasi. Transfer muatan elektron antara $\text{BNNT}_{(4,4)}$ dengan logam yang dienkapsulasi tersebut dapat mengurangi transfer muatan elektron dari boron ke nitrogen yang merupakan penyebab lebarnya celah pita pada $\text{BNNT}_{(4,4)}$. Hal ini ditunjukkan dengan bersatunya ESP antara $\text{BNNT}_{(4,4)}$ dengan logam yang dienkapsulasi. Selain itu ditunjukkan juga dengan perubahan besarnya nilai ESP pada $\text{BNNT}_{(4,4)}$ yang telah terenkapsulasi.

Dengan memperhatikan Gambar 2 kita mendapati bahwa enkapsulasi logam As menyebabkan *range* nilai ESP-nya menjadi lebih besar (nilainya adalah $-2,454 \times 10^{-2}$ sampai $2,454 \times 10^{-2}$) jika dibandingkan dengan $\text{BNNT}_{(4,4)}$ yang tidak terenkapsulasi. Di lain pihak, pada enkapsulasi Ga *range* nilai ESP-nya justru menjadi lebih kecil apabila dibandingkan dengan $\text{BNNT}_{(4,4)}$ yang tidak terenkapsulasi. Hal ini menunjukkan tidak adanya keterkaitan antara *range* nilai ESP struktur akibat enkapsulasi dengan nilai celah pita (besarnya

penurunan nilai celah pita).

Besarnya penurunan nilai celah pita yang diakibatkan enkapsulasi tersebut bergantung pada besarnya resistivitas listrik dari logam yang dienkapsulasi. Semakin kecil resistivitas listrik dari logam yang disisipkan maka semakin besar penurunan nilai celah pita yang dihasilkan. Hal ini dibuktikan dengan enkapsulasi logam Ga yang memberikan penurunan nilai celah pita lebih besar jika dibandingkan dengan penurunan nilai celah pita akibat enkapsulasi logam As. Nilai resistivitas listrik dari logam Ga dan As berturut-turut adalah $270 \text{ n}\Omega\cdot\text{m}$ dan $333 \text{ n}\Omega\cdot\text{m}$.

Untuk mengetahui bagaimana terjadinya penurunan celah pita berdasarkan perubahan nilai HOMO (pita valensi) dan LUMO (pita konduksi) dapat diperhatikan tabel berikut ini.

Tabel 1. Besarnya nilai HOMO & LUMO dari sampel hasil optimasi menggunakan metode DFT/B3LYP

Basis set	Sampel	HOMO	LUMO	Nilai tengah antara HOMO & LUMO
STO-3G	BNNT _(4,4)	-3,950	2,150	-0,900
	BNNT _(4,4) -Ga	-1,250	1,100	-0,075
	BNNT _(4,4) -As	-1,860	1,130	-0,365
3-21G	BNNT _(4,4)	-6,350	-0,310	-3,330
	BNNT _(4,4) -Ga	-2,550	-0,240	-1,395
	BNNT _(4,4) -As	-4,470	-1,590	-3,030
6-311G	BNNT _(4,4)	-6,630	-0,530	-3,580
	BNNT _(4,4) -Ga	-2,770	-0,520	-1,645
	BNNT _(4,4) -As	-4,750	-2,200	-3,475

Jika perubahan nilai-nilai tersebut dibandingkan berdasarkan nilai perubahan signifikannya, maka dari tabel tersebut terlihat bahwa penyempitan celah pita yang terjadi pada enkapsulasi logam Ga lebih cenderung dikarenakan naiknya nilai pita valensi, sementara penurunan nilai pita konduksinya memberikan kontribusi yang lebih sedikit terhadap penyempitan celah pita. Di lain pihak, pada enkapsulasi As penyempitan celah pita tersebut lebih cenderung dikarenakan penurunan nilai pita konduksi, sementara kenaikan nilai pita valensinya memberikan kontribusi yang lebih sedikit terhadap penyempitan celah pita.

Dengan melihat nilai tengah antara HOMO dan LUMO nampak bahwa baik itu enkapsulasi logam Ga maupun As menyebabkan pusat celah pita dalam grafik DOS bergeser ke kanan (nilainya semakin naik). Mengingat bahwa *fermi level* terletak di antara HOMO dan LUMO, maka akibat enkapsulasi logam Ga dan As ini kemungkinan besar nilai *fermi level* dari BNNT_(4,4) juga mengalami pergeseran ke kanan (*fermi level*nya semakin naik). Kenaikan yang lebih besar terjadi pada enkapsulasi logam Ga.

Dari data-data besarnya celah pita yang diperoleh menunjukkan bahwa pengukuran dari ketiga *basis set* memberikan hasil yang tidak memiliki perbedaan signifikan. Meskipun ke tiga *basis set* memberikan hasil yang serupa, tapi masih terdapat sedikit perbedaan antar *basis set* tersebut, perbedaan ini semakin jelas sejalan dengan semakin banyaknya elektron yang dimiliki logam yang disisipkan, terlihat pada hasil pengukuran celah pita BNNT_(4,4)-As yang lebih memiliki perbedaan antar *basis set*nya jika dibandingkan dengan BNNT_(4,4) maupun BNNT_(4,4)-Ga. Dengan mempertimbangkan antara hasil yang diperoleh dan lamanya waktu yang diperlukan, dapat disimpulkan bahwa dalam penelitian ini (dimana sistem yang diteliti tidak memiliki elektron yang terlalu banyak) penggunaan *basis set* yang besar tidak dirasa 'penting', karena justru akan menyebabkan durasi penelitian menjadi lebih lama, sementara hasil yang diperoleh tidak jauh berbeda dengan hasil dari *basis set* yang lebih kecil.

Untuk mengukur besarnya energi pembentukan BNNT_(4,4)-Ga dan BNNT_(4,4)-As diperlukan data-data mengenai besarnya energi dari sampel yang diteliti. Tabel 2 menunjukkan besarnya energi total yang dimiliki sampel-sampel dalam penelitian ini.

Tabel 2. Besarnya energi total dari sampel hasil optimasi menggunakan metode DFT/B₃LYP

Sampel	Energi total (dalam satuan Hartree)		
	Basis set STO-3G	Basis set 3-21G	Basis set 6-311G
BNNT _(4,4)	-2528,1133860	-2546,4884475	-2560,3271546
BNNT _(4,4) -Ga	-4430,1794219	-4461,9014611	-4485,0887649
BNNT _(4,4) -As	-4738,5045222	-4771,5229981	-4796,0318445
Ga	-1902,1027245	-1915,3947577	-1924,8014295
As	-2210,3908672	-2225,0394144	-2235,7381939

Energi pembentukan BNNT_(4,4)-Ga dan BNNT_(4,4)-As dapat dihitung dari selisih energi total dari sistem setelah enkapsulasi dengan sistem sebelum enkapsulasi (penyusunan enkapsulasi). Seperti yang telah dilakukan oleh Kim *et al.* (2005) yang mengukur besarnya energi enkapsulasi dari asetilen terhadap CNT dengan cara menghitung selisih antara energi sistem saat asetilen belum masuk ke dalam rongga CNT dengan energi sistem saat asetilen telah masuk ke dalam CNT (terenkapsulasi). Dengan perhitungan tersebut dapat diperoleh besarnya energi pembentukan BNNT_(4,4)-Ga dan BNNT_(4,4)-As, seperti tertera pada Tabel 3.

Tabel 3. Besarnya energi pembentukan dari sampel hasil optimasi menggunakan metode DFT/B3LYP

Sampel	Energi pembentukan (dalam satuan Hartree)		
	Basis set STO-3G	Basis set 3-21G	Basis set 6-311G
BNNT _(4,4) -Ga	0,0366886	-0,0182559	0,0398192
BNNT _(4,4) -As	-0,0002690	0,0048638	0,0335040

Dari data-data tersebut terlihat bahwa,

baik itu proses enkapsulasi logam Ga maupun logam As tidak membutuhkan energi yang relatif besar, bahkan nyaris tanpa energi. Hal ini dimungkinkan karena pada dasarnya pada proses enkapsulasi ini tidak terjadi perubahan struktur molekul, yang ditunjukkan dengan tidak terjadinya perubahan atom-atom penyusun struktur, baik pengikatan maupun pelepasan atom dalam struktur yang sudah ada. Meskipun tidak mengubah struktur molekul, enkapsulasi ini dapat menyebabkan perubahan sifat elektronik dari BNNT_(4,4), yakni berupa penurunan nilai celah pita.

Simpulan

Enkapsulasi logam Ga maupun As dapat menurunkan nilai celah pita dari BNNT_(4,4) secara signifikan, dan enkapsulasi yang memberikan penurunan celah pita yang lebih besar terjadi pada enkapsulasi logam Ga. Proses enkapsulasi baik itu logam Ga maupun As oleh BNNT_(4,4) tidak membutuhkan energi yang relatif besar. Hal ini dimungkinkan, karena pada dasarnya proses enkapsulasi yang terjadi bukanlah suatu reaksi kimia yang dapat mengubah struktur molekul.

Daftar Pustaka

- Baei, M. T., Kaveh, F., Torabi, P. & Sayyad-alangi, S. Z. 2011. Adsorption Properties of Oxygen on H-Capped (5,5) Boron Nitride Nanotube (BNNT) A Density Functional Theory. *E-Journal of Chemistry*, 8(2): 609-614.
- Cohen, M. L. & Zettl, A. 2010. The Physics Of Boron Nitride Nanotubes. *Physics Today*, 63(11).
- He, W., Li, Z., Yang, J., & Hou, J. G. 2008. A first principles study on organic molecules encapsulated BN nanotubes. *J chem phys*, 128.
- Huang, Y., Duan, X., Cui, Y., & Lieber, C. M. 2002. *Nano Letters*, 2: 101-104.
- Kim, G., Kim, Y., & Ihm, J. 2005. Encapsulation and Polymerization of Acetylene Molecules Inside a Carbon Nanotube. *Chemical Physics Letters*, 415(2005): 279-282.
- Patel, N. V., Patel, S. J., Chaudhary, Y. M., Patel, A. M., Prajapati, V. J., & Sen, D. J. 2012. Correlation Between sp² Hybridization and Bloom Strength of Carbon Nanotubes. *International Journal of Advance Pharmaceutical and Biological Sciences*, 2(1): 49-55.