



PENGARUH ENKAPSULASI Fe DAN Cu PADA BNNT TERHADAP PARAMETER NMR MENGGUNAKAN DFT

Erwin Budi Pamungkas*), Agung Tri Prasetya dan Mohamad Alauhdin

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:
boron nitridenanotube
(BNNT)
energi
nuclear magnetic resonance
(NMR)
density functional theory
(DFT)

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui energi BNNT_(5,0) sebelum di enkapsulasi dan setelah dienkapsulasi dengan logam Fe dan Cu, dan mempelajari parameter NMR dari BNNT setelah dienkapsulasi ataupun sebelum di enkapsulasi. Perhitungan menggunakan paket Gaussian® 03W dengan metode DFT/B₃LYP, *basis set* yang digunakan yakni STO-3G dan 3-21G. Perhitungan energi dapat menentukan logam yang efektif untuk disisipkan dalam BNNT. Berdasarkan hasil perhitungan dengan kedua *basis set* menunjukkan bahwa penyisipan logam Cu dapat menghasilkan energi ikat yang lebih stabil, hal ini dapat dilihat dari besarnya energi yang lebih kecil. Sementara itu, hasil perhitungan NMR diperoleh nilai isotropi, nilai ini dapat menunjukkan nilai kerapatan elektroniknya. Pada lapisan N pertama atau B keempat pada BNNT tanpa penyisipan logam, mempunyai nilai isotropi besar sehingga mempunyai kerapatan elektronik yang tinggi, sedangkan nilai isotropi paling kecil pada lapisan N keempat atau B pertama, sehingga mempunyai kerapatan elektronik yang rendah. Penyisipan logam mempengaruhi nilai isotropi pada lapisan kedua dan ketiga. Hal ini dikarenakan posisinya lebih dekat dengan logam, sehingga kerapatan elektroniknya tinggi yang ditunjukkan dengan nilai isotropi yang besar.

Abstract

This research aims to determine the energy and NMR parameter of BNNT(5,0) before and after encapsulation with Fe and Cu metals. Calculation was done using Gaussian® 03W package with DFT/B3LYP method. The basis set used were STO-3G and 3-21G. Energy calculation can determine the effectiveness of metal encapsulation in the BNNTs. Based on calculations with both basis set showed that the encapsulation of Cu can produce more stable energy. It can be seen from the smaller amount of energy. Meanwhile, the results of the determination of NMR parameter obtained isotropy values, this value may indicate the value of the electronic density. In the first layer of N or fourth layer of B on BNNT without encapsulation of metal, has a large isotropy value it means the layer has a high electronic density, while the smallest of isotropy value way in the fourth layer of N or the first layer of B. It has a low electronic density. The encapsulation of the metals affects the value of isotropy in the second and third layers. It caused by the closer position to wordsthe metals. It has high electronic density as indicated by the large value of isotropy.

Pendahuluan

Dewasa ini, eksperimen komputer memainkan peranan yang sangat penting dalam perkembangan sains. Pada masa lalu, sains ditunjukkan oleh kaitan antara eksperimen dan teori. Dalam eksperimen, sistem diukur dan hasilnya dinyatakan dalam bentuk numerik. Dalam teori, model suatu sistem pada umumnya disusun dalam bentuk himpunan persamaan matematik. Perkembangan kimia komputasi yang dimulai pada tahun 1950 telah mengubah diskripsi suatu sistem kimia dengan masuknya unsur baru diantara eksperimen dan teori yaitu eksperimen komputer (*computer experiment*). Perkembangan eksperimen komputer mengubah secara substansial hubungan tradisional antara teori dan eksperimen. Simulasi komputer membutuhkan suatu metode yang akurat dalam memodelkan sistem yang dikaji. Simulasi sering dapat dilakukan dengan kondisi yang sangat mirip dengan eksperimen sehingga hasil perhitungan kimia komputasi dapat dibandingkan secara langsung dengan eksperimen. Jika hal ini terjadi, maka simulasi bersifat sebagai alat yang sangat berguna, bukan hanya untuk memahami dan menginterpretasi data eksperimen dalam tingkat mikroskopik, tetapi juga dapat mengkaji bagian yang tidak dapat dijangkau secara eksperimen, seperti reaksi pada kondisi tekanan yang sangat tinggi atau reaksi yang melibatkan gas berbahaya. Penelitian kimia dengan alat komputer pada era 1950-an dimulai dengan kajian hubungan struktur kimia dengan aktivitas fisiologi dari senyawa. Salah satu ahli kimia yang berjasa besar dalam bidang ini adalah John Pople yang berhasil mengkonversi teori-teori fisika dan matematika ke dalam kimia melalui program komputer. Metode kimia komputasi memungkinkan para kimiawan melakukan penentuan struktur dan sifat suatu sistem kimia dengan cepat. Bidang yang sangat terbantu dengan berkembangnya kimia komputasi adalah bidang kristalografi (Pranowo, 2000).

Teknologi nano merupakan teknologi masa depan, karena material nano menunjukkan sifat yang luar biasa yang dapat dimanfaatkan dalam kehidupan manusia. Inilah yang membuat para ilmuwan untuk meneliti dan mengembangkan teknologi nano. *Boron nitride nanotube* (BNNT) merupakan salah satu material nano yang mempunyai sifat unik dan memiliki sifat yang luar biasa. *Boron nitride nanotube* merupakan analog struktur dari *carbon nanotube* (CNT). BNNT diprediksikan pertama

kali pada tahun 1994 dan disintesis pada tahun berikutnya (Wang, *et al.*, 2009). Sifat BNNT dan CNT sangatlah berbeda, BNNT bersifat semikonduktor dengan celah pita lebar, nilainya berkisar 5,5 eV. Sedangkan CNT dapat bersifat konduktor atau semikonduktor tergantung pada arah *rolling* dan jari-jari.

Nuclear magnetic resonance (NMR) merupakan alat teoritis yang digunakan untuk menentukan struktur yang kompleks. Pada NMR yang diuji adalah inti atom bukan elektron sehingga dapat mengetahui informasi-informasi tentang NMR dari molekul tersebut. Perhitungan secara teoritis dapat melengkapi pemahaman tentang parameter NMR, eksperimen seperti yang telah ditunjukkan sebelumnya dalam penelitian CNT dimana parameter NMR telah membantu untuk menentukan dan membedakan struktur dari *nanotube* (Ahmadi, *et al.*, 2010). Perhitungan dengan parameter NMR dapat digunakan untuk mempelajari struktur elektronik dan sifat dari material nano (Rouzbehani, *et al.*, 2009).

DFT merupakan salah satu dari beberapa pendekatan populer untuk perhitungan struktur partikel berelektron banyak secara mekanika kuantum untuk sistem molekul dan bahan rapat. DFT adalah teori mekanika kuantum yang digunakan dalam fisika dan kimia untuk mengamati keadaan dasar dari sistem banyak partikel. Metode tradisional dalam perhitungan struktur elektron, seperti teori *Hartree Fock* didasarkan pada fungsi gelombang berelektron banyak yang rumit. Sasaran utama dari DFT adalah menggantikan fungsi gelombang partikel berelektron banyak dengan kerapatan elektron sebagai besaran dasarnya. Metode DFT mempunyai nilai keakuratan yang tinggi dan cocok dengan molekul BNNT yang mempunyai jarak antar atom yang rapat daripada metode mekanika molekul yang lebih cocok untuk molekul dengan jarak antar atom yang jauh sehingga kurang cocok untuk meneliti BNNT.

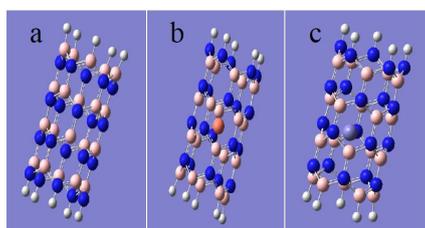
Metode Penelitian

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah seperangkat komputer yang mempunyai spesifikasi Intel Quart Core dengan RAM (*Random Acces Memory*) 2 GB. Perangkat lunak yang digunakan diantaranya Accelrys Material Studio 4.4 yang digunakan sebagai pemodelan struktur BNNT_(5,0), Hyperchem 8.0.8, Gaussian 03, GaussView 3.0 dan operasi sistem yang dipakai adalah Windows Vista® Business OA (EM)-(SEA).

Dilakukan pemodelan molekul BNNT dengan menggunakan perangkat lunak Accelrys Material Studio 4.4 yang kemudian disimpan dalam format MDL Mol File (.mol). Pada ujung tabung diberikan atom-atom hidrogen. Optimasi struktur dengan menggunakan perangkat lunak GaussView 3.0. File yang telah disimpan dibuka dengan GaussView 3.0 pada *job type* pilih optimasi kemudian menyetting metode (DFT) dan *basis set* (STO-3G atau 3-21G), sebelum menggunakan metode DFT digunakan metode mekanika molekuler. Pemodelan struktur BNNT yang akan disisipi logam Fe atau Cu menggunakan bantuan perangkat lunak GaussView 3.0. Penyisipan logam dilakukan pada BNNT yang telah dioptimasi, dengan membuka *file output* (.chk). Pilih menu *element fragment* untuk melakukan penyisipan logam, klik Fe atau Cu kemudian tentukan posisi logam tepat di tengah-tengah rongga BNNT. Setelah dilakukan penyisipan logam kemudian model struktur dilakukan optimasi dengan GaussView 3.0, kemudian menyetting metode (DFT) dan *basis set* (STO-3G atau 3-21G) sebelum menggunakan metode DFT digunakan metode mekanika molekuler. Perhitungan parameter NMR struktur BNNT dengan membuka file BNNT yang telah dioptimasi (.chk) baik yang belum disisipi logam atau yang belum disisipi dengan perangkat lunak GaussView 3.0 pada *job type* pilih NMR, kemudian menyetting metode (DFT) dan *basis set* (STO-3G atau 3-21G).

Hasil dan Pembahasan

Optimasi geometri bertujuan untuk memperoleh konformasi geometri yang paling stabil dari molekul BNNT_(5,0) sebelum dan sesudah disisipi logam. Setelah dilakukan optimasi geometri dengan menggunakan metode DFT-B3LYP, untuk hasil optimasi geometri hasil strukturnya dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 1. struktur teroptimasi untuk: (a) BNNT, (b) BNNT disisipi logam Fe, (c) BNNT disisipi logam Cu

Dari Gambar 1 terlihat bahwa logam yang disisipkan yaitu Fe maupun Cu tetap berada di tengah rongga. Dari optimasi geometri akan

diperoleh energi total, energi *output* Gaussian satuannya adalah *hartree* kemudian satuan tersebut dikonversi menjadi kjoule/mol (1 *hartree* = 627,51 kcal/mol, 1 kcal/mol = 4,1868 kjoule/mol). Data energi dari BNNT sebelum dan sesudah penyisipan logam Fe atau Cu dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Energi total molekul BNNT sebelum dan sesudah penyisipan

Basis Set	Energi (kJ/mol)		
	BNNT	BNNT-Fe	BNNT-Cu
STO-3G	-4150340,58579	-7433558,09740	-8410396,87308
3-21G	-4180588,41418	-7484567,89180	-8469704,02245
Mek. Molekuler	2163,80452	3291,61541	2423,49242

Berdasarkan dari Tabel 1 dapat dilihat penyisipan logam akan menstabilkan *nanotube*, ini dapat dilihat dari energinya yang menjadi lebih kecil. Dari Tabel 1 juga terlihat untuk kedua jenis *basis set* yaitu STO-3G dan 3-21G ternyata molekul BNNT yang disisipi Cu mempunyai energi yang lebih kecil, artinya penyisipan dengan logam Cu lebih efektif dibanding logam Fe jika disisipkan terhadap BNNT. Penelitian ini sesuai dengan penelitian yang dilakukan Pamungkas (2010) dimana penyisipan logam terhadap *nanotube* dapat menstabilkan *nanotube* itu sendiri.

Logam Cu lebih stabil dari pada logam Fe karena jumlah elektron Cu lebih banyak daripada Fe. Dan konfigurasi elektron Cu terdapat elektron yang tidak berpasangan pada sub kulit 4s, sedangkan pada Fe elektron yang tidak berpasangan terdapat pada sub kulit 3d, dari sini terlihat bahwa orbital s akan lebih mudah berinteraksi dan bertukar elektron dari pada orbital d. Tingkat energi orbital 4s lebih rendah daripada 3d. Untuk mencapai ke orbital 3d membutuhkan energi yang lebih besar.

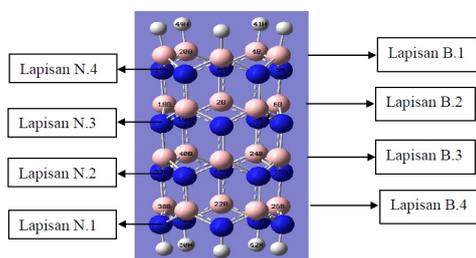
Kestabilan molekul BNNT mengenkapsulasi logam Fe dan Cu karena adanya interaksi antara atom BN pada BNNT dengan atom logam, dimana akan terjadi gaya London. Gaya London kekuatannya tergantung pada jumlah elektron dalam molekul atau besarnya massa molekul zat. Dengan bertambahnya jumlah elektron atau massa molekul akan menyebabkan pengaruh inti atom terhadap awan elektron yang semakin lemah sehingga mudah untuk dipolarisasikan dan gaya London yang terjadipun akan semakin kuat.

Perhitungan energi menggunakan metode mekanika molekuler berdasarkan interaksi antar molekul, dan tidak terlalu memperhatikan adanya elektron. Molekul digambarkan sebagai kumpulan atom yang berinteraksi dengan atom lain. Sedangkan perhitungan energi

menggunakan metode DFT lebih berdasarkan interaksi antar elektron. Pada enkapsulasi logam, jika dihitung dengan mekanika molekuler akan terjadi energi tolakan antara molekul BNNT dengan logam, logam yang berada ditengah rongga BNNT dianggap sebagai benda asing, sehingga akan terjadi gaya tolak menolak antara molekul BNNT dengan logam yang mengakibatkan energi yang terhitung dalam optimasi geometri akan menjadi lebih besar.

Pada enkapsulasi logam yang dihitung dengan metode DFT, akan terjadi interaksi antara elektron logam yang tidak berpasangan dengan molekul BNNT. Pada enkapsulasi logam ini akan terjadi kerapatan elektron yang makin besar. Elektron logam yang tidak berpasangan akan berinteraksi dengan molekul BNNT, terjadi gaya London. Terjadinya gaya ini menyebabkan energi yang terhitung menjadi menurun sehingga dapat menstabilkan BNNT.

Parameter NMR dihitung setelah dilakukan optimasi geometri terhadap BNNT sebelum dan setelah disisipi logam. Struktur BNNT akan terbag menjadi menjadi 4 lapisan, yang terlihat pada Gambar 2.



Gambar 2. Struktur BNNT 3D

Data Tabel 2 dan Tabel 3 merupakan data NMR BNNT sebelum disisipi logam, sedangkan Tabel 4 sampai Tabel 7 merupakan data NMR setelah disisipi logam.

Tabel 2. NMR BNNT basis set STO-3G

Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)	Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)
N.1	227	102	B.1	90	59
N.2	206	166	B.2	92	44
N.3	203	179	B.3	91	42
N.4	182	190	B.4	94	47

Tabel 3. NMR BNNT dengan basis set 3-21G

Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)	Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)
N.1	174	103	B.1	88	53
N.2	139	163	B.2	92	40
N.3	138	168	B.3	91	38
N.4	104	205	B.4	94	40

Dari Tabel 2 dan Tabel 3 perhitungan parameter NMR untuk 15N dan 11B dengan menggunakan basis set STO-3G dan 3-21G. Untuk 15N dapat dilihat terjadi penurunan nilai

isotropinya dari N.1 sampai N.4, sedangkan untuk nilai anisotropinya terjadi peningkatan. Untuk 11B akan terjadi peningkatan nilai isotropinya dari B.1 sampai B.2, sedangkan untuk nilai anisotropinya akan mengalami penurunan. Pada 15N nilai isotropi paling besar terdapat pada lapisan N.1, sedangkan nilai anisotropi nilai tertinggi terdapat pada lapisan N.4. Untuk 11B nilai isotropi paling besar terdapat pada lapisan B.4, sedangkan nilai anisotropi tertinggi terdapat pada lapisan B.1. lapisan N.1 mempunyai nilai isotropi paling besar, sehingga kerapatan elektronnya tinggi, sebaliknya nilai isotropi paling kecil pada lapisan N.4 sehingga kerapatan elektronnya rendah. Hal ini karena terjadi transfer muatan elektron dari B ke N, atom N mempunyai nilai keelektronegatifan yang lebih tinggi sehingga akan lebih bersifat menarik elektron. Nilai isotropi dan anisotropi pada N lebih besar daripada B, maka inti atau proton N akan lebih terperisai oleh elektron.

Tabel 4. NMR BNNT penyisipan logam Fe dengan basis set STO-3G

Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)	Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)
N.1	N ₂₃ = 232.9025	110.3239	B.1	B ₄ = 93.5133	61.3558
	N ₂₇ = 226.2813	107.7904		B ₈ = 88.5896	59.1058
	N ₃₁ = 226.2445	107.8465		B ₁₂ = 88.5520	59.0681
	N ₃₅ = 232.8291	110.4162		B ₁₆ = 93.5292	61.3323
	N ₃₉ = 231.5114	67.0672		B ₂₀ = 87.7801	54.2526
N.2	N ₂₁ = 237.3036	109.0420	B.2	B ₂ = 92.1515	39.4749
	N ₂₅ = 319.9308	72.2332		B ₆ = 92.4264	50.6740
	N ₂₉ = 205.6026	132.4822		B ₁₀ = 84.5551	46.1219
	N ₃₃ = 319.4166	71.8763		B ₁₄ = 92.2831	50.5816
	N ₃₇ = 237.3915	109.3187		B ₁₈ = 92.1790	39.4581
N.3	N ₃ = 264.9802	212.2975	B.3	B ₂₄ = 98.4284	89.4658
	N ₇ = 211.1935	156.1042		B ₂₈ = 108.6918	66.6473
	N ₁₁ = 210.6484	155.3225		B ₃₂ = 108.6251	66.3912
	N ₁₅ = 264.8253	212.2177		B ₃₆ = 98.6327	89.3957
	N ₁₉ = 169.5149	172.0413		B ₄₀ = 127.6865	55.5814
N.4	N ₁ = 183.1650	198.6309	B.4	B ₂₂ = 103.1916	26.8214
	N ₅ = 187.9919	196.1544		B ₂₆ = 102.5054	35.7929
	N ₉ = 184.9589	182.5360		B ₃₀ = 91.0579	44.4654
	N ₁₃ = 187.9537	196.1559		B ₃₄ = 102.5127	35.8058
	N ₁₇ = 183.1678	198.6720		B ₃₈ = 103.1873	26.8377

Tabel 5. NMR BNNT penyisipan logam Fe dengan basis set 3-21G

Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)	Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)
N.1	N ₂₃ = 172.7104	105.1916	B.1	B ₄ = 91.2998	52.5676
	N ₂₇ = 175.4728	98.0383		B ₈ = 91.3442	52.0532
	N ₃₁ = 174.9863	99.0500		B ₁₂ = 91.3564	52.0520
	N ₃₅ = 173.0765	104.7479		B ₁₆ = 90.9875	52.8945
	N ₃₉ = 175.3533	95.6649		B ₂₀ = 85.8922	56.4494
N.2	N ₂₁ = 132.2171	156.4631	B.2	B ₂ = 104.3412	41.3606
	N ₂₅ = 138.8322	158.3455		B ₆ = 103.3377	47.1162
	N ₂₉ = 146.4532	140.1010		B ₁₀ = 105.4924	50.4848
	N ₃₃ = 138.2746	159.1694		B ₁₄ = 103.6021	46.8346
	N ₃₇ = 132.9100	154.7616		B ₁₈ = 104.0511	41.8534
N.3	N ₃ = 205.8377	76.6623	B.3	B ₂₄ = 92.6466	27.1784
	N ₇ = 290.0031	88.0294		B ₂₈ = 104.7732	24.0815
	N ₁₁ = 284.8034	84.0385		B ₃₂ = 104.0614	23.9768
	N ₁₅ = 200.1923	79.8035		B ₃₆ = 91.7402	28.5081
	N ₁₉ = 149.2317	140.2467		B ₄₀ = 85.9452	32.4598
N.4	N ₁ = 107.4358	195.3705	B.4	B ₂₂ = 92.8428	38.8502
	N ₅ = 115.2466	189.1404		B ₂₆ = 93.4753	37.5166
	N ₉ = 114.9658	181.1277		B ₃₀ = 92.7175	39.0968
	N ₁₃ = 115.2504	190.1710		B ₃₄ = 93.5851	37.3630
	N ₁₇ = 107.5217	195.1946		B ₃₈ = 92.4753	38.8928

Perhitungan dengan menggunakan dua basis set yaitu STO-3G dan 3-21G, penyisipan logam akan mempengaruhi nilai isotropi dan

anisotropi pada N dan B pada lapisan kedua dan ketiga, sedangkan untuk lapisan pertama dan keempat tidak terlalu terpengaruh nilainya. Terjadinya perubahan nilai pada lapisan kedua dan ketiga ini karena posisi logam yang disisipkan lebih dekat dengan atom pada lapisan tersebut. Atom-atom pada lapisan kedua dan ketiga akan lebih mudah berinteraksi daripada atom-atom pada lapisan pertama dan keempat karena posisinya lebih dekat. Nilai isotropi pada lapisan kedua dan ketiga akan mengalami kenaikan, maka kerapatan elektron pada lapisan ini juga mengalami kenaikan. Bertambahnya kerapatan elektron disekitar proton akan mempengaruhi besarnya parameter *shielding*. Semakin besar kerapatan elektron makin besar parameter *shielding*nya, maka makin besar energi yang diperlukan untuk beresonansi dan semakin tinggi medan magnetnya.

Tabel 6. NMR BNNT penyisipan logam Cu dengan *basis set* STO-3G

Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)	Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)
N.1	N ₂₃ = 232.6621	80.1584	B.1	B ₄ = 94.0339	53.5131
	N ₂₇ = 232.6608	80.1398		B ₈ = 94.0597	53.4929
	N ₃₁ = 229.8910	90.5352		B ₁₂ = 96.3134	55.7269
	N ₃₅ = 228.6049	94.5452		B ₁₆ = 85.3503	62.7529
	N ₃₉ = 229.8852	90.5111		B ₂₀ = 96.3565	55.7156
N.2	N ₃₁ = 238.0044	113.3378	B.2	B ₂ = 120.3586	22.2076
	N ₃₅ = 234.1226	113.5168		B ₆ = 110.6770	34.6260
	N ₃₉ = 238.0251	113.3703		B ₁₀ = 120.3222	22.1583
	N ₄₃ = 216.9088	134.7137		B ₁₄ = 99.5998	36.7732
	N ₄₇ = 216.9656	134.6340		B ₁₈ = 99.6435	36.6880
N.3	N ₃ = 318.3763	42.9635	B.3	B ₂₄ = 110.1848	27.7804
	N ₇ = 318.4493	43.1418		B ₂₈ = 110.1872	27.7888
	N ₁₁ = 272.5582	82.1611		B ₃₂ = 103.8327	25.4853
	N ₁₅ = 200.6735	161.2251		B ₃₆ = 91.0470	40.2910
	N ₁₉ = 272.7961	81.8921		B ₄₀ = 103.8562	25.4237
N.4	N ₁ = 185.0130	177.5328	B.4	B ₂₂ = 99.2853	41.6976
	N ₅ = 178.1693	159.9566		B ₂₆ = 100.1547	41.6088
	N ₉ = 184.9998	177.5284		B ₃₀ = 99.3047	41.6897
	N ₁₃ = 188.8951	175.2490		B ₃₄ = 96.4500	44.3891
	N ₁₇ = 188.8885	175.3191		B ₃₈ = 96.4696	44.3745

Tabel 7. NMR BNNT penyisipan logam Cu dengan *basis set* 3-21G

Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)	Lapisan	Isotropi (ppm)	Anisotropi (ppm)
N.1	N ₂₃ = 176.8295	96.6555	B.1	B ₄ = 96.6483	44.9293
	N ₂₇ = 177.2753	95.9144		B ₈ = 96.5744	44.8611
	N ₃₁ = 177.3756	96.0115		B ₁₂ = 96.5110	44.8223
	N ₃₅ = 177.0051	96.0392		B ₁₆ = 96.7757	44.8336
	N ₃₉ = 177.5407	95.7972		B ₂₀ = 96.6221	44.9107

Simpulan

Penyisipan logam Fe dan Cu kedalam BNNT akan dapat menstabilkan molekul BNNT_(5,0), hal ini dapat dilihat dari energinya yang lebih kecil. Logam Cu lebih efektif untuk disisipkan pada BNNT daripada logam Fe, hal ini dapat dilihat dari data energinya yang lebih kecil. Sedangkan untuk perhitungan parameter NMR, penyisipan logam akan mempengaruhi nilai isotropi dan anisotropi pada lapisan kedua

dan ketiga karena posisinya lebih dekat dengan logam. Bertambahnya nilai isotropi ini akan menyebabkan bertambahnya kerapatan proton disekitar elektron dan mempengaruhi parameter *shielding*. Semakin besar kerapatan elektron makin besar parameter *shielding*nya, maka makin besar energi yang diperlukan untuk beresonansi dan semakin tinggi medan magnetnya.

Daftar Pustaka

- Ahmadi, T. S., Ahmad Seif, dan Goodarz M. Rozbahani. 2010. The pristine and carbon, silicon or germanium-substituted (10, 0) BN nanotube: A computational DFT study of NMR parameters. *Arabian Journal of Chemistry* 3, 121–126.
- Batista, R. J. C., Alan B. de Oliveira, dan Daniel L. Rocco. 2010. Iron oxide doped boron nitride nanotubes: structural and magnetic properties. Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG, Brazil, 35400-000.
- Pamungkas, B. P. 2010. Kajian Teoritis Sifat Carbon Nano Tube (3,3) (CNT) Terhadap Dopan Logam Fe Dan Logam Mn Dengan Teori Hartree Fock (HF). Skripsi. Semarang. FMIPA Universitas Negeri Semarang.
- Pranowo, H.D. 2000. Kimia Komputasi. Yogyakarta : FMIPA UGM.
- Rouzbehani, Goudarz M., Temer S. Ahmadi, dan Ahmad Sherif. 2009. Computation of The NMR Parameter of H-Capped (10,0) And (5,5) Single-Walled SiC Nanotube. *Journal of Physical and Theoretical Chemistry of Islamic Azad University of Iran*, 6 (3) 165-171.
- Wang, J., Chee Huel Lee, dan Yoshio Bando. 2009. Multiwalled Boron Nitride Nanotubes: Growth, Properties, and Applications. Michigan USA: Department of Physics, Michigan Technological University, 118 Fisher Hall, 1400 Townsend Drive, Houghton, MI 4993, USA. DOI: 10.1007/978-1-4419-0086-9_2
- Xiang, H.J, Jinlong Yang, J.G Hou dan Qingshi Zhu. 2005. Half-Metallic Ferromagnetism in Transition-Metal Encapsulated Boron Nitride Nanotube. China: University of Science and Technology. PACS numbers: 75.75.+a,61.46.+w,72.25.-b,73.22.-f
- Zhang, H. dan Ying C. 2006. Boron Nitride Nanotubes: Synthesis and Structure. Canberra, Australia : The Australian National University.