

## PENGARUH ENKAPSULASI SILIKON ATAU GERMANIUM PADA BNNT TERHADAP PARAMETER NMR DENGAN DFT

**Nanda Mahmudi\*), Kasmui, dan Agung Tri Prasetya**

Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Semarang

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

### Info Artikel

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

Kata kunci:  
boron nitrite nanotube (5,0)  
(BNNT)  
basis set  
DFT  
NMR

### Abstrak

Boron nitrite nanotube (BNNT) merupakan salah satu nanomaterial yang cukup menjanjikan sebagai bahan alternatif pembuatan peralatan elektronik dan memori, tetapi BNNT mempunyai sifat semikonduktor dengan band gap lebar yaitu 5,5 eV. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh enkapsulasi unsur Si dan Ge pada sifat BNNT menggunakan metode teori fungsi kerapatan (DFT) dalam program Gaussian 03 W dan diharapkan dapat mengubah sifat BNNT menjadi ferromagnetik. Pada penelitian ini, struktur BNNT (5,0) dengan repetisi 2 dibuat dengan program Material Studio 4.4, kemudian dioptimasi dengan program Gaussian 03 W. setelah dioptimasi, BNNT mengenkapsulasi unsur Si dan Ge di tengah-tengah rongga dan dioptimasi kembali. Selanjutnya dihitung NMR BNNT sebelum dan sesudah mengenkapsulasi Si dan Ge. Berdasarkan hasil penelitian diketahui bahwa BNNT yang mengenkapsulasi Si atau Ge strukturnya yaitu -4883577,799 kJ/mol dan -9525836,636 kJ/mol lebih stabil daripada struktur BNNT awal yaitu -4132503,361 kJ/mol. Besar medan magnet untuk BNNT yang mengenkapsulasi Si atau Ge yaitu 478,89414 T dan 474,30441 T lebih kecil daripada BNNT awal yaitu 489,47913 T, sehingga BNNT yang mengenkapsulasi Si atau Ge tidak dapat dijadikan sebagai bahan dasar pembuatan memori magnetik.

### Abstract

Boron Nitrite Nanotube (BNNT) is one of the new material is promising as an alternative material manufacture electronic equipment and memory, but BNNT has semiconducting properties with a wide band gap of 5.5 eV. This study aimed to investigate the effect of metal encapsulation properties of Si and Ge on boron nitrite nanotubes (BNNT) using density functional theory (DFT) in the program Gaussian 03 W and it is expected to change the nature of BNNT becomes ferromagnetic. In this study, structure BNNT (5,0) with repetition 2 made by program Material Studio 4.4, then it is optimization by Gaussian 03 W. After optimization, BNNT encapsulation unsure Si and Ge in the middle and then optimization again. Calculation NMR BNNT before and after encapsulate Si or Ge. Based on the survey results revealed that BNNT that encapsulate Si or Ge metal structure is more stable than the structure of the initial BNNT. They are -4883577,799 kJ/mol, -9525836,636 kJ/mol and -4132503,361 kJ/mol. BNNT large magnetic field to encapsulate Si or Ge is smaller than the initial BNNT. They are 478,89414 T, 474,30441 T and 489,47913 T, so BNNT that encapsulate Si or Ge can't be a material magnetic memory.

## Pendahuluan

Nanomaterial menunjukkan sifat-sifat luar biasa dan diharapkan dapat mewujudkan bahan semikonduktor yang berukuran lebih kecil dengan biaya produksi yang lebih rendah, namun memiliki kemampuan tinggi, misalnya adalah *carbon nanotube* (CNT). Sejauh ini, untuk mensintesis CNT dengan penggulungan tertentu tidak dapat dicapai. Hal ini disebabkan karena pada proses sintesis CNT, diameter silinder CNT dapat dikontrol dengan baik, tetapi tidak dengan *chirality*-nya. Akibatnya, CNT-CNT yang dihasilkan akan bercampur antara yang bersifat logam dengan semikonduktor. Ini membuat peralatan elektronik yang dibuat dengan CNT menjadi sulit, sehingga peneliti mencari bahan berukuran nano lainnya untuk memenuhi kebutuhan akan sirkuit komponen yang lebih kecil, yakni *boron nitrit nanotube* (BNNT).

BNNT struktur yang mirip dengan struktur CNT dimana unsur C diganti dengan unsur B dan unsur N. BNNT memiliki celah pita konstan  $\sim 5,5$  eV. Ini disebabkan karena beberapa dari muatan elektron pada boron berpindah ke nitrogen sehingga ikatan yang terbentuk tidak benar-benar kovalen, tetapi memiliki sifat ionik. Perpindahan muatan memberikan peningkatan celah pada pita konduksi dan pita valensi, dengan demikian BN mempunyai sifat seperti semikonduktor yang memiliki celah pita yang luas dan menyebabkan BNNT mempunyai sifat isolator (Wenlong, 2008). BNNT memiliki beberapa sifat lain, misalnya modulus elastis yang tinggi, stabilitas struktural yang tinggi, kemampuan antioksidasi, dan senyawa *inert*. BNNT memiliki kekakuan yang luar biasa, dengan *modulus Young's*  $\sim 1.2$  TPa. Kekakuan dan *modulus Young's* pada BNNT diharapkan dapat dikembangkan menjadi bahan alternatif pengganti CNT sebagai bahan yang banyak digunakan untuk membangun sirkuit komputer, khususnya perangkat memori yang tahan terhadap panas. BNNT memiliki sifat elektronik hampir seragam yang tidak dipengaruhi oleh diameter dan kiralitas dan mengalami ketahanan oksidasi tinggi. Hasil penelitian terakhir menunjukkan bahwa BNNT murni tahan terhadap oksidasi sampai  $1.100^\circ\text{C}$ .

Teknologi nanomaterial membuka jalan bagi industri semikonduktor untuk dapat mewujudkan *chip* yang berukuran lebih kecil dengan biaya produksi yang lebih rendah, namun memiliki kemampuan yang lebih tinggi

dibandingkan teknologi yang ada saat ini, sehingga tidak hanya ukuran komputer semakin ringkas, namun juga peningkatan kemampuan dan kapasitas yang luar biasa dan memungkinkan penyelesaian program-program besar dalam waktu yang singkat. Apabila penguasaan nanoteknologi di bidang magnet diaplikasikan pada sistem penyimpanan data, misalnya, akan menaikkan kapasitas penyimpanan data, ketahanan terhadap keausan, sampai kepada semakin kecilnya panas buangan pada peralatan elektronik karena kurva histeresis dari bahan-bahan tersebut sangat sempit atau bahkan nol seperti pada supermagnet.

Berbagai penelitian tentang BNNT telah dilakukan untuk mengubah sifat BNNT menjadi feromagnetik seperti penelitian yang dilakukan oleh Temer S. Ahmadi, Ahmad Seif dan Goodarz M. R, 2010. Temer, secara khusus telah melakukan perhitungan *ab initio* pada karbon, silikon, dan germanium yang tersubstitusi pada BN *nanotube*. Dalam penelitian yang dilakukan oleh Temer S. Ahmadi, Ahmad Seif dan Goodarz M. R, 2010 menyatakan bahwa unsur karbon (C), silikon (Si) dan germanium (Ge) yang disubstitusikan satu unsur B atau unsur N dalam BNNT dapat menginduksi magnetisasi spontan pada *nanotube*. Temer, *et al* mempertimbangkan tujuh model dari (10,0) zigzag *single-wall* BNNT dengan jarak 1,0 nm. Model no. 1 adalah (10,0) BNNT murni, sedangkan model no. 2-7 merupakan substituen C, Si dan Ge dalam (10,0) BNNT. Perhitungan dilakukan berdasarkan pada DFT dan menggunakan program Gaussian 03. Semua struktur dioptimasi menggunakan fungsional kerapatan hibridisasi B<sub>3</sub>LYP-DFT dengan standar *basis set* 6-31G(d) digunakan untuk mengevaluasi muatan dan parameter NMR (ICS dan ACS) 11B dan 15N.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa parameter ICS (*isotropic chemical shielding*) dan ACS (*anisotropic chemical shielding*), unsur C, Ge dan Si yang tersubstitusi kedalam BNNT dan menggantikan satu unsur B atau unsur N, unsur dopan meluas keluar dari permukaan *nanotube*, membentuk struktur tetrahedral dengan tiga unsur tetangganya. Panjang ikatan mengalami kenaikan mulai dari unsur C ke unsur Si dan kemudian ke unsur Ge tetapi sudut ikatan yang terbentuk mengalami penurunan untuk unsur-unsur BNNT yang berikatan pada unsur C, Si dan Ge. Model (10,0) BNNT murni, parameter NMR dibagi kedalam beberapa lapisan yang

ekivalen, dimana B.1 mempunyai nilai ICS yang terkecil jika dibandingkan dengan B.2, B.2, B.4 dan B.5, tapi N.1 mempunyai nilai ICS yang terbesar jika dibandingkan dengan N.2, N.2, N.4 dan N.5. Oleh karena itu, pada lapisan B.1 mempunyai kerapatan elektron yang terendah dan pada lapisan N.1 mempunyai kerapatan elektron yang tertinggi.

Feng Li, *et al* melakukan penelitian tentang struktur elektronik dan sifat magnetik dari BNNT yang didopan oleh fluorin (F-BNNT) dengan menggunakan program SIESTA. Feng Li, *et al* mengadakan serangkaian tes pada F-(8,0) BNNT, F-(10,0) BNNT, F-(5,5) BNNT dan 2D lembar F-BN. Hasilnya menunjukkan bahwa F-(8,0) BNNT, F-(10,0) BNNT, F-(5,5) BNNT dan 2D lembar F-BN mempunyai sifat magnetik yang hampir sama dan dalam perhitungan yang dilakukan oleh Feng Li, *et al* menunjukkan bahwa fluorinasi dari BNNT dapat menginduksi magnet dalam tabung (*tube*).

Meskipun, unsur F diserap pada permukaan BNNT yang lepas dengan mudah ketika BNNT terkena udara atau dibawah sinar irradiasi dalam mikroskop elektron, BNNT dengan penyerapan unsur F dapat menyebabkan reaksi yang lama antara BNNT dan Fluorin atau HF pada suhu rendah. Oleh karena itu, jika katalis logam, yang digunakan untuk mengkatalis pertumbuhan BNNT, dapat dihilangkan menggunakan proses pencucian kimia, sifat magnet dari F-BNNT dapat ditemukan secara eksperimen.

Xiang, H.J, Jinlong Yang, J.G Hou dan Qingshi Zhu, mempelajari boron nitrit *nanotube* zig-zag yang diisi dengan heksagonal Ni yang dikemas mendekati *nanowire*. Struktur hibrid Ni/BN *nanotube* merupakan logam feromagnetik dengan magnetik yang besar. Beberapa keistimewaan dari sifat magnetik dihasilkan dari interaksi antara Ni *nanowire* dan BNNT ditemukan. BNNT (9,0) yang mengenkapsulasi dengan logam Ni menunjukkan sifat semi-metalik, dimana dapat menjadi setengah-logam setelah mendoping elektron-elektron lebih dari 1,4 elektron per unit sel. Pada hakekatnya sifat setengah-metalik dapat dicapai dalam dua cara; salah satunya dengan melapisi Ni *nanowire* dengan ukuran yang lebih kecil dari BNNT, BNNT (8,0) dan lainnya menggunakan tekanan hidrostatik untuk memampatkan secara homogen logam Ni yang dienkapsulasi BNNT.

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui

sifat magnet, dan energi optimasi yang terbentuk dari BNNT yang mengenkapsulasi Si dan Ge berukuran nano. BNNT yang telah mengenkapsulasi dengan unsur Si dan unsur Ge diharapkan dapat mengubah sifat BNNT yang mempunyai sifat isolator berubah menjadi semi-logam dan menjadi feromagnetik sehingga dapat digunakan sebagai bahan pengganti digunakan untuk membangun sirkuit komputer yang tahan terhadap panas dan keausan.

#### Metode Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di Lab komputasi, Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang. Bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah *boron nitrite nanotube* (BNNT). Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah komputer dengan prosesor tipe Intel Quart Core, Harddisk 250 GB, Random Acces Memory (RAM) 2 GB dan monitor Hp LE1851w untuk perangkat keras dan perangkat lunaknya Accelrys Material Studio 4.4, Gaussian 03, dan Windows Vista® Business OA (EM)-(SEA).

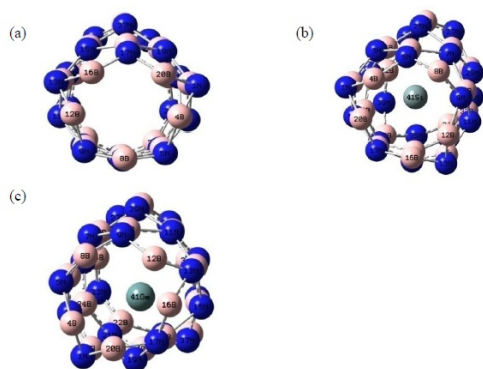
Pemodelan struktur BNNT murni dilakukan dengan cara menggambar struktur *boron nitrite nanotube* pada program Material Studio 4.4 dan memilih *build*, kemudian pilih *single-wall nanostruktur* dan *build boron nitrite nanotube*, kemudian struktur BNNT disimpan pada file MDL molfile (mol). Pemodelan struktur BNNT yang akan mengenkapsulasi Si atau Ge dilakukan dengan cara membuka file BNNT hasil optimasi menggunakan perangkat lunak GaussView 03, kemudian Si atau Ge dienkapsulasi ke dalam BNNT.

Optimasi struktur BNNT murni dapat dilakukan dengan menjalankan GaussView 03, kemudian membuka file (mol) yang sudah disimpan. *Calculate* dipilih, selanjutnya pilih *Gaussian*. Pada *job type* dipilih optimasi dan metode yang digunakan adalah DFT, B<sub>3</sub>LPY dengan *basis set* STO-3G. *Save as output* dengan memilih *submit* dan disimpan dalam BNNT file Gaussian job file (gjf). Optimasi struktur BNNT yang mengenkapsulasi Si atau Ge dapat dilakukan dengan cara yang dengan optimasi struktur BNNT murni. Perhitungan NMR untuk BNNT murni dapat dilakukan dengan menjalankan GaussView 03, kemudian membuka file (mol) BNNT murni yang telah dioptimasi. Pilih *Calculate*, selanjutnya pilih *Gaussian*. Pada *job type* dipilih NMR dan metode yang digunakan adalah DFT, B<sub>3</sub>LPY dengan *basis set* STO-3G. *Save as* dengan memilih *submit*

dan disimpan dalam BNNT Gaussian job file (gjf).

**Hasil dan Pembahasan**

Hasil optimasi BNNT murni dengan metode DFT menggunakan *basis set* B<sub>3</sub>LPY dan STO-3G dan struktur BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge dengan metode yang sama dapat dilihat pada Gambar 1. Dari gambar di bawah menunjukkan bahwa struktur BNNT murni mengalami perubahan pada kedua sisi BNNT setelah dioptimasi. Perubahan ini disebabkan karena struktur BNNT kurang stabil sehingga bentuk strukturnya tidak menyerupai tabung. Pada Gambar 1. b dan c menunjukkan struktur BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge setelah dioptimasi dan memperlihatkan bahwa struktur pada BNNT yang telah mengenkapsulasi unsur Si dan Ge juga mengalami perubahan di kedua sisi tabung. Unsur Si atau Ge yang dienkapsulasi BNNT tidak membentuk suatu ikatan dengan BNNT dan tetap berada di tengah rongga.



**Gambar 1.** Struktur teroptimasi untuk struktur: (a) BNNT(5,0), (b) BNNT(5,0) yang mengenkapsulasi unsur Si, (c) BNNT(5,0) yang mengenkapsulasi unsur Ge

**Tabel 1.** Energi optimasi BNNT(5,0) sebelum dan sesudah mengenkapsulasi unsur Si atau Ge

Energi BNNT (5,0)	Basis Set STO-3G (kJ/mol)
BNNT	-4132503,361
BNNT mengenkapsulasi Si	-4883577,799
BNNT mengenkapsulasi Ge	-9525836,636

Berdasarkan Tabel 1 diketahui bahwa BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge mempunyai energi optimasi lebih kecil dibandingkan dengan BNNT murni dan BNNT yang mengenkapsulasi unsur Ge mempunyai energi optimasi lebih kecil daripada BNNT yang mengenkapsulasi Si. Ketika BNNT mengenkapsulasi unsur Si atau Ge, struktur BNNT tersebut menjadi lebih stabil dari pada struktur BNNT yang tidak mengenkapsulasi unsur Si atau Ge. Ini juga disebabkan karena

adanya kontribusi orbital d pada unsur yang mengenkapsulasi dan transport elektron atau spin yang terjadi pada inti unsur tersebut.

Data NMR BNNT sebelum dan sesudah mengenkapsulasi unsur Si atau Ge dapat dilihat pada Tabel 2, 3 dan 4.

**Tabel 2.** NMR BNNT<sub>(5,0)</sub> setelah dioptimasi

Lapisan	Isotropi(ppm)	Anisotropi(ppm)	Lapisan	Isotropi(ppm)	Anisotropi(ppm)
N.1	108, 192, 192, 110, 177	269, 128, 131, 267, 181	B.1	93, 85, 86, 92, 93	36, 17, 162, 36, 28
	193, 198, 192, 196, 196	147, 133, 151, 147, 147		B.2	52, 81, 52, 60, 60
N.3	201, 210, 210, 204, 212	138, 175, 176, 132, 185	B.3	101, 87, 89, 102, 85	63, 62, 59, 68
	-194, -543, -221, 151, 156	-672, 1143, 109, 218		B.4	98, 96, 98, 94, 93

**Tabel 3.** NMR BNNT<sub>(5,0)</sub> sesudah dioptimasi dan mengenkapsulasi Si

Lapisan	Isotropi(ppm)	Anisotropi(ppm)	Lapisan	Isotropi(ppm)	Anisotropi(ppm)
N.1	17, 52, 49, 20, 66	213, 124, 135, 216, 160	B.1	71, 80, 78, 70, 81	25, 27, 16, 31, 14
	85, 95, 78, 87, 75	129, 106, 127, 128, 138		B.2	41, -1, 43, 44, 42
N.3	118, 116, 119, 112, 114	79, 120, 143, 137, 137	B.3	73, 63, 80, 81, 62	48, 64, 27, 32, 67
	27, -8, -128, -22, 30	-176, 206, 217, 180		B.4	88, 86, 90, 79, 84

**Tabel 4.** NMR BNNT<sub>(5,0)</sub> sesudah dioptimasi dan mengenkapsulasi Ge

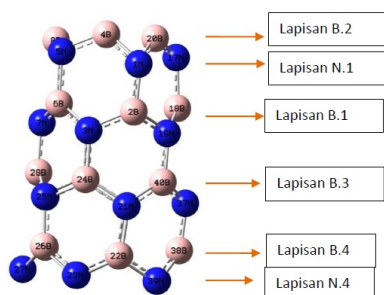
Lapisan	Isotropi	Anisotropi	Lapisan	Isotropi	Anisotropi
N.1	18, 55, 60, 13, 65	224, 122, 105, 221, 148	B.1	71, 75, 63, 75, 86	32, 18, 36, 21, 42
	72, 76, 88, 116, 131	115, 134, 124, 57, 66		B.2	42, 23, 44, 40, 47
N.3	69, 76, 102, 132, 131	93, 159, 139, 116, 94	B.3	82, 79, 62, 82, 68	28, 34, 67, 36, 57
	18, -5, 33, 31, -30	286, 197, 165, 195		B.4	85, 74, 77, 91, 90

Tabel 2 sampai 4 menunjukkan data NMR BNNT sebelum dan sesudah mengenkapsulasi unsur Si atau Ge dengan parameter isotropi dan anisotropi dari model struktur (5,0) BNNT. Dari tabel tersebut diketahui bahwa 20 N dan 20 B unsur *nanotube* dibagi kedalam 4 lapisan. Nilai isotropi pada stuktur BNNT mengalami kenaikan dari lapis N.1 ke N.3, tetapi pada lapisan ke N.4 nilai isotropi mengalami penurunan dan untuk nilai isotropi pada lapis B.1 ke B.2 mengalami penurunan dan mengalami kenaikan pada lapisan B.3 dan mengalami penurunan pada lapisan B.4. Nilai anisotropi pada struktur yang sama mengalami penurunan dari lapisan N.1 ke N.3, tapi pada lapisan N.4 nilai anisotropi mengalami kenaikan dan untuk nilai anisotropik pada lapisan B.1 ke B.2 mengalami kenaikan yang kemudian mengalami penurunan sampai pada lapisan B.4. Parameter NMR salah satu sisi tabung ke tengah-tengah tabung mempunyai nilai yang berbeda. Perubahan dari parameter NMR pada unsur N disebabkan karena adanya pasangan elektron bebas yang lebih dibandingkan dengan pada unsur B (Temer, 2010).

Parameter NMR dari struktur BNNT yang

mengenkapsulasi unsur Si atau Ge ditunjukkan pada Tabel 3 dan Tabel 4. Nilai isotropi untuk BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si mengalami penurunan pada lapisan N.1 sampai lapisan N.3 dan mengalami kenaikan pada lapisan N.4 sedangkan nilai anisotropi mengalami penurunan. Nilai isotropi pada lapisan B.1 sampai B.4 juga mengalami penurunan sedangkan untuk anisotropi mengalami penurunan jika dibandingkan dengan nilai NMR pada struktur BNNT. Nilai isotropi untuk struktur BNNT yang dienkapsulasi dengan logam Ge juga mengalami kenaikan pada lapisan N.1 sampai N.4 sedangkan nilai anisotropinya mengalami penurunan dan nilai isotropi pada lapisan B.1 sampai B.3 mengalami penurunan dan untuk lapisan B.4 mengalami kenaikan sedangkan nilai anisotropinya mengalami penurunan pada lapisan B.1, B.3 dan B.4 dan untuk lapisan B.2 nilai anisotropinya mengalami kenaikan.

Pada struktur BNNT yang mengenkapsulasi dengan unsur Ge mempunyai perubahan nilai NMR yang signifikan dibandingkan dengan BNNT yang mengenkapsulasi dengan unsur Si. Hal ini disebabkan karena unsur Ge mempunyai jari-jari unsur yang lebih besar daripada jari-jari pada unsur Si. BNNT maupun BNNT yang mengenkapsulasi Si atau Ge mempunyai nilai anisotropi jauh di bawah medan, sehingga berada di luar susunan yang normal untuk suatu spektrometer NMR. Hal ini disebabkan karena ikatan yang terbentuk pada BNNT tersebut adalah ikatan  $sp^2$  sehingga proton pada BNNT murni dan yang mengenkapsulasi Si atau Ge tak terperisai oleh efek-efek anisotropi.



**Gambar 2.** Pembagian lapisan pada BNNT

Perhitungan perbedaan energi yang diperlukan untuk menjungkir balik dan mendapatkan sinyal NMR dapat ditentukan dengan menggunakan persamaan:

$$B_0 = \frac{v \cdot 2\pi}{\gamma}$$

Persamaan di atas dapat digunakan untuk mencari besar medan magnet pada struktur BNNT murni dan struktur BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge. Tabel 5 berikut ini menunjukkan total medan magnet pada struktur BNNT murni dan struktur BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge.

**Tabel 5.** Total medan magnet BNNT sebelum dan sesudah mengoptimasi unsur Si dan Ge

BNNT (5.0)	Total Medan Magnet ( $B_0$ ) (T)
BNNT	489,47913
BNNT mengenkapsulasi Si	478,89414
BNNT mengenkapsulasi Ge	474,30441

Berdasarkan data dari Tabel 5 diketahui bahwa besar medan magnet untuk BNNT yang mengenkapsulasi Si atau Ge mengalami penurunan jika dibandingkan dengan BNNT murni. Jadi BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si dan Ge tidak dapat digunakan sebagai bahan semikonduktor khususnya perangkat memori magnetik karena BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge mempunyai medan magnet yang lebih rendah daripada BNNT murni.

### Simpulan

Nilai NMR pada struktur BNNT yang mengenkapsulasi dengan Si menunjukkan perubahan, nilai isotropi untuk atom nitrogen dan boron mengalami penurunan dan nilai anisotropi juga mengalami penurunan jika dibandingkan dengan struktur BNNT. Besar medan magnet BNNT adalah 489,47913 T. Medan magnet BNNT murni lebih besar daripada medan magnet untuk BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge sehingga BNNT yang mengenkapsulasi unsur Si atau Ge tidak dapat dijadikan sebagai bahan pembuatan semikonduktor, khususnya perangkat memori magnetik.

Energi pada struktur BNNT yang mengenkapsulasi dengan unsur Si atau Ge lebih stabil daripada struktur BNNT awal yaitu energi optimasi BNNT -4150338,591 kJ/mol sedangkan energi optimasi BNNT yang mengenkapsulasi Si -4901393,759 kJ/mol dan energi optimasi BNNT mengenkapsulasi Ge -9543412.112 kJ/mol.

### Daftar Pustaka

- Ahmadi, Temer, Ahmad Seif dan Goodarz M. R. 2010. The Pristine and Carbon, Silikon or Germanium-Substituted (10, 0) BN nanotube: A Computational DFT Study of NMR Parameters. *Jurnal. Arabian journal of Chemistry*. 3:121-126
- Cohen, Marvin L dan Alex Zettl. 2010. The Physics of Boron Nitride Nanotube.

- Artikel. *Physics of Today*. 34-38.
- Fessenden R. J. dan J. S. Fessenden. 1982. *Kimia Organik*. Edisi 3. Jakarta: Erlangga.
- Ishigami, Masa, Shaul Aloni dan A. Zettl. 2003. Properties of Boron Nitride Nanotubes. *Jurnal*. USA: University of California.
- James, Thomas L. 1998. *Fundamental of NMR*. *Jurnal*. U.S.A: University of California.
- Li, Feng, Zhonghua Zhu, Xiangdong Yao, Gaoqing Lu, Mingwen Zhao, Yueyuan Xia dan Ying Chen. 2008. Fluorination-induced magnetism in boron nitride nanotubes from ab initio calculations. *Jurnal*. Amerika : American Institute of Physics.
- Xiang, H.J, Jinlong Yang, J.G Hou dan Qingshi Zhu. 2005. Half-Metallic Ferromagnetism in Transition-Metal Encapsulated Boron Nitride Nanotube. *Jurnal*. China: University of Science and Technology.