



## Pengaruh Dopan Logam Scandium dan Vanadium pada *Carbon Nanotube* terhadap Energi Adsorpsi Hidrogen Menggunakan Metode *Density Functional Theory*

Arida Nurdiani , Kasmui, dan Ella Kusumastuti

Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang  
Gedung D6 Kampus Sekaran Gunungpati Telp. (024)8508112 Semarang 50229

### Info Artikel

Diterima Juni 2019

Disetujui Juli 2019

Dipublikasikan Agustus  
2019

#### Keywords:

CNT

dopan

energi adsorpsi

DFT

### Abstrak

Penggunaan hidrogen dalam *fuell cell* sebagai bahan bakar alternatif memiliki kendala pada penyimpanannya. Salah satu caranya yaitu mengadsorpsi hidrogen pada permukaan *carbon nanotube*, namun kapasitas penyimpanan hidrogen belum maksimal dan perlu dilakukan *doping* logam untuk meningkatkan penyimpanannya sehingga penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk mengetahui pengaruh dopan logam Sc dan V pada CNT terhadap *bandgap* dan energi adsorpsi hidrogen sehingga dapat digunakan untuk penyimpanan hidrogen. *Density Functional Theory* digunakan sebagai metode perhitungan dengan fungsi B3LYP dan *basis set* 6-31G\*. Perangkat lunak NWChem digunakan untuk perhitungan energi. Hasil perhitungan menunjukkan *bandgap* dari CNT, CNT-Sc dan CNT-V berturut-turut sebesar 1,5530595770 eV, 1,1867661186 eV dan 1,5053155447 eV, namun *bandgap* mengalami sedikit kenaikan ketika struktur mengadsorpsi hidrogen. Energi adsorpsi hidrogen pada CNT, CNT-Sc dan CNT-V berturut-turut sebesar -0,0108127215 eV, -0,0459859037 eV, dan -0,3491878286 eV, hal ini menunjukkan adsorpsi pada CNT-V lebih kuat dibandingkan CNT-Sc dan CNT. Dari hasil penelitian ini dapat disimpulkan bahwa *doping* logam Sc dan V dapat menurunkan *bandgap* dan meningkatkan energi adsorpsi hidrogen pada CNT.

### Abstract

The use of hydrogen in *fuell cell* as an alternative fuel has problems in its storage. One way is to adsorb hydrogen on the surface of carbon nanotubes, but the hydrogen storage capacity is not maximal and metal doping needs to be done to increase its storage so that the research was conducted to determine the effect of Sc and V metal dopants on CNT on hydrogen *bandgap* and adsorption energy so that it can be used for hydrogen storage. *Density Functional Theory* is used as a calculation method with B3LYP functions and base set 6-31G\*. NWChem software is used for energy calculations. The calculation results show *bandgap* from CNT, CNT-Sc and CNT-V respectively at 1.5530595770 eV, 1.1867661186 eV and 1.5053155447 eV, but *bandgap* has a slight increase when the structure adsorbs hydrogen. Hydrogen adsorption energy in CNT, CNT-Sc and CNT-V are -0.0108127215 eV, -0.0459859037 eV, and -0.3491878286 eV respectively, this shows that adsorption on CNT-V is stronger than CNT-Sc and CNT. From the results of this study it can be concluded that the doping of Sc and V metals can reduce *bandgap* and increase hydrogen adsorption energy in CNT.

© 2019 Universitas Negeri Semarang

 Alamat korespondensi:  
Gedung D6 Lantai 2 Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229  
E-mail: aridanurdiani04@gmail.com

p-ISSN 2252-6951

e-ISSN 2502-6844

## Pendahuluan

Salah satu tantangan besar untuk pengembangan era baru hemat energi adalah penggunaan *fuel cell* sebagai bahan bakar alternatif. *Fuel cell* merupakan alat elektrokimia yang mereaksikan hidrogen ( $H_2$ ) dan oksigen ( $O_2$ ) untuk menghasilkan listrik dengan produk samping panas dan air tanpa ada proses pembakaran sehingga meminimalkan adanya polusi (Lavanya *et al.*, 2014). Dengan hadirnya *fuel cell*, hidrogen menjadi bahan utama untuk dielektrolisis sehingga menghasilkan aliran listrik untuk menggerakkan motor listrik. Namun permasalahannya yaitu belum ditemukan tempat penyimpanan yang sesuai untuk hidrogen (Kurniady *et al.*, 2014). Cara yang dilakukan untuk penyimpanan  $H_2$  yaitu dengan mengadsorpsi  $H_2$  pada permukaan atau antar lapisan media pada ukuran molekuler (Gunawan *et al.*, 2010).

Adsorpsi  $H_2$  dapat dilakukan pada permukaan suatu *nanomaterial*. *Nanomaterial* merupakan material atau partikel dengan ukuran kurang dari 100 nanometer. Material berukuran nanometer ini memiliki sifat lebih unggul dibandingkan dengan sifat yang dimiliki oleh material yang berukuran besar. Sifat-sifat ini mudah dikontrol dengan melakukan perubahan pada ukuran, segi penggulangan, ataupun interaksi antar molekul (Abdullah, 2009). Jenis adsorben berbasis karbon yang diusulkan sebagai penyimpanan hidrogen yaitu *carbon nanotube* (CNT) yang telah mendapat banyak perhatian dalam beberapa tahun terakhir, karena luas permukaannya yang tinggi, pori berukuran nanometer dengan distribusi ukuran pori yang sempit dan kepadatan massa rendah (Barghi *et al.*, 2013). Faktor utama yang dapat meningkatkan kapasitas penyimpanan hidrogen antara lain: tingkat kemurnian unsur karbon dalam adsorben, struktur mikro adsorben dan adanya unsur katalis (umumnya dari jenis logam) sebagai unsur *doping* yang diharapkan dapat menyerap lebih banyak hidrogen pada permukaan CNT (Reyhani *et al.*, 2010). Diantara alotrop karbon, CNT dipertimbangkan sebagai calon untuk aplikasi penyimpanan hidrogen karena struktur pori, rasio permukaan terhadap volume tinggi, massa ringan dan stabilitas kimia tinggi. Logam transisi dapat mengikat tipe *Single-Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) dengan cara *doping* dan akan meningkatkan energi adsorpsi SWCNT (Seenithurai *et al.*, 2013).

Energi adsorpsi  $H_2$  dari nanotube jenis *armchair* menunjukkan sedikit lebih besar dari pada *nanotube* jenis *zigzag* dengan diameter yang sama. Selain itu didapatkan bahwa *nanotube zigzag* kurang stabil dibanding *nanotube armchair* (Cheng, 2005). Kestabilan ini dipengaruhi oleh letak atom-atom pada struktur *armchair* yang berada pada jarak paling jauh antar atomnya dan tolakan antar elektron pada orbital-orbitalnya kecil sehingga menghasilkan energi yang kecil dan lebih stabil dibandingkan struktur *zigzag* (Supardi dan Luhbandjono, 2008).

Nanomaterial berikatan dengan logam transisi yang sengaja diikatkan pada CNT seperti Ti dan V dapat menghasilkan energi adsorpsi yang lebih tinggi, karena interaksi yang dihasilkan dari hibridisasi orbital sigma dan sigma\* dari  $H_2$  dengan orbital d pada logam transisi (Mananghaya *et al.*, 2017). Orbital atom hidrogen berisi satu elektron yang jika digabung terbentuk orbital molekuler *bonding*  $\sigma_{1s}$  dan orbital molekuler *antibonding*  $\sigma^*_{1s}$ , sehingga molekul  $H_2$  lebih stabil dari atom-atomnya karena kedua elektron menempati orbital dengan energi yang lebih rendah (Sukardjo, 1985). Metode DFT melakukan perhitungan dengan pendekatan elektronik atom dan molekuler. Teori *Hartree-Fock* dan DFT sama-sama mempertimbangkan fungsi elektron tunggal, tetapi teori *Hartree-Fock* menghitung jumlah elektron dalam molekul fungsi gelombang elektron, sedangkan DFT menghitung secara global energi elektronik dan distribusi kerapatan elektron (Pranowo, 2011).

Telah dilakukan penelitian dengan menggunakan *doping* logam selain transisi yaitu logam Li, Mg, Pt dan Pd, namun logam tersebut bukan merupakan kandidat yang baik untuk penyerapan molekuler. Hal ini dikarenakan sisi molekuler hidrogen tidak terikat dan meninggalkan CNT yang telah di *doping* logam tersebut (Yildirim & Ciraci, 2005). *Doping* Boron terhadap atom dan adsorpsi hidrogen dalam SWCNT pernah diselidiki melalui DFT. Energi adsorpsi hidrogen dan struktur elektronik dihitung untuk SWCNT murni dan yang telah di *doping* logam. Hasil *doping* Boron pada SWCNT dapat meningkatkan energi adsorpsi atom hidrogen baik dalam bentuk *zigzag* dan *armchair* (Zhou *et al.*, 2006). Selain itu *doping* dengan logam Ni menghasilkan energi ikatan adsorpsi sebesar -48,60 eV (Seenithurai *et al.*, 2013).

Logam transisi blok 3d, Sc, Ti, V, Fe, Co dan Ni menunjukkan energi ikatan yang lebih tinggi sehingga lebih kuat dalam mengadsorpsi. Namun hanya Scandium (Sc), Titanium (Ti) dan Vanadium (V) yang memenuhi syarat untuk penyimpanan hidrogen dengan energi adsorpsi sekitar 0,16 eV/ $H_2$  (Mananghaya *et al.*, 2016). Logam Sc dan V juga mempunyai kesamaan pada orbital-orbital yang terisi dan kosong dengan potensi ionisasi yang serupa dengan Ti (Yildirim & Ciraci, 2005). Penelitian CNT dengan di *doping* Sc dan V perlu dilakukan untuk mengetahui perubahan struktur elektronik dan energi adsorpsi hidrogen.

## Metode

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Kimia Komputasi FMIPA UNNES. Peralatan yang digunakan pada penelitian ini adalah komputer dengan spesifikasi sebagai berikut: Processor Intel Core i5-6400 CPU @2.70 GHz, *Random acces memory* (RAM) 4 GB DDR4, *Hard Disk* 1TB, dan IntelHD 530 1024 MB. Sampel yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Single Walled Carbon nanotube* (SWCNT) yang dibuat secara komputasi.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode DFT. Metode ini dipilih karena memiliki keakuratan yang tinggi dan cocok untuk perhitungan pada molekul CNT. DFT diperlukan untuk pengukuran energi adsorpsi suatu gas pada CNT, karena pada metode ini mengarah pada perhitungan struktur elektron. Dalam penelitian ini akan digunakan metode DFT dengan fungsi B3LYP serta *basis set* 6-31G\*. Penggunaan *basis set* ini dipilih karena cocok dan memiliki keakuratan yang tinggi serta sering digunakan.

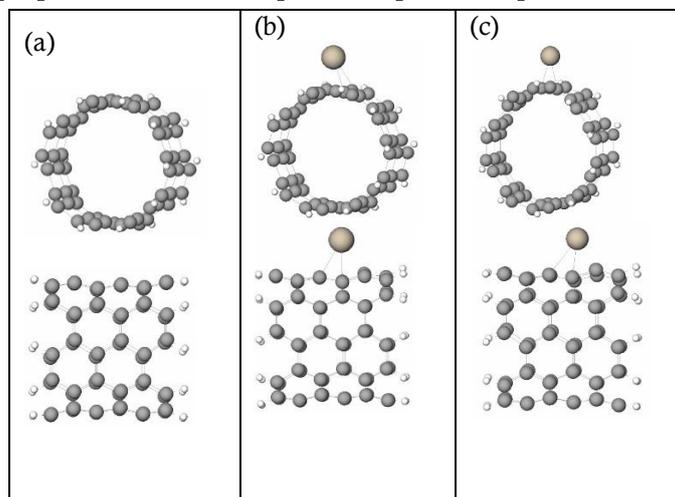
Prosedur dalam penelitian ini adalah dengan membuat pemodelan struktur CNT dengan menggunakan Avogadro. Struktur CNT memiliki *chirality* 5,5 dengan kemudian disimpan dalam *format basic Cartesian* (x,y,z). Struktur CNT yang telah dibuat, dibuka menggunakan perangkat lunak Avogadro. Selanjutnya di *doping* logam Sc atau V berjumlah 1 atom dengan cara memutuskan ikatan atom C dengan nomor 30 dan 31 lalu mengikatkan logam pada kedua atom C, kemudian disimpan dalam *file* baru dengan *format basic Cartesian* (x,y,z). *File .xyz* yang dibuat dari perangkat lunak Avogadro di *import* ke perangkat lunak ECCE Builder dengan ditambahkan parameter yang sudah ditentukan antara lain metode DFT, fungsi B3LYP, *basis set* 6-31G\* dan tipe perhitungan optimasi geometri.

Pemodelan struktur CNT, CNT-Sc dan CNT-V yang mengadsorpsi H<sub>2</sub> dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak ECCE Builder. Melalui menu *import chemical molecule*, dipilih *file* yang telah disimpan. Selanjutnya ditambahkan molekul hidrogen didekat *nanotube*. Sedangkan pemodelan molekul H<sub>2</sub> untuk perhitungan energinya dilakukan dengan ECCE Builder. Setelah itu seluruh struktur ditambahkan parameter yang sudah ditentukan antara lain metode DFT, fungsi B3LYP, *basis set* 6-31G\* dan tipe perhitungan optimasi geometri.

Optimasi geometri dan pengukuran energi dilakukan menggunakan NWChem melalui ECCE Builder. Hasil *output* berupa *text file* dapat dianalisa secara langsung atau dengan menggunakan ECCE Builder dapat dilihat rekapan *file output* sehingga lebih mudah dalam melakukan analisa.

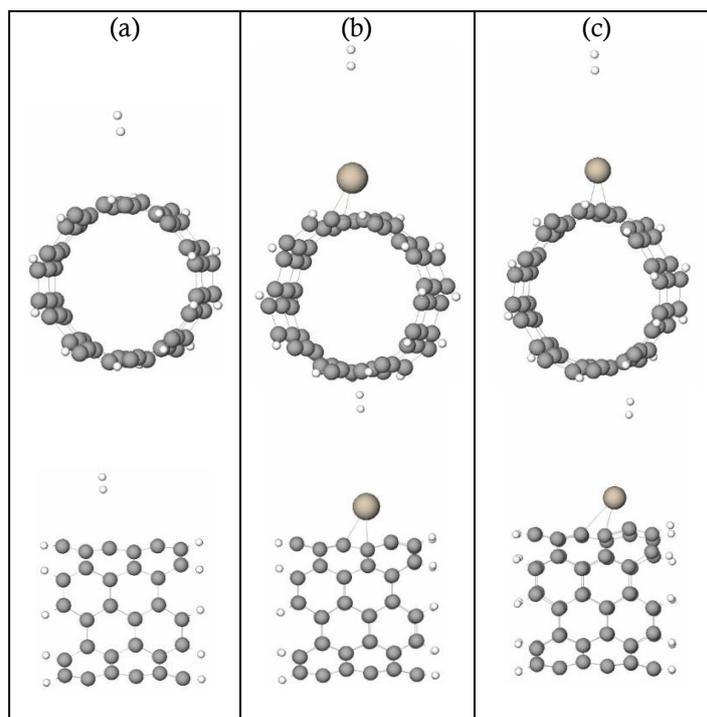
## Hasil dan Pembahasan

Pemodelan struktur CNT(5,5) memiliki panjang 7,903 Å dan diameter sebesar 6,871 Å. Struktur *doping* diletakkan dengan memutuskan salah satu ikatan antar C dan mengikatkannya dengan logam baru. Kedua ujung tabung ditambahkan atom hidrogen untuk penjenuhan atom C pada bagian terluar. Hal ini untuk menghindari efek batas pada perhitungan molekular dan untuk menyeimbangkan efek dari valensi bebas, sehingga diperlukan penjenuhan oleh atom hidrogen pada ujung *nanotube* (Ghasemi & Molla, 2012). Struktur yang telah dibuat perlu dilakukan optimasi geometri agar struktur lebih stabil. Optimasi geometri menyebabkan perubahan struktur geometri seperti diameter, panjang ikatan, sudut ikatan dan sudut dihedral. Struktur sampel penelitian setelah dioptimasi dapat dilihat pada Gambar 1.



**Gambar 1.** Struktur (a) CNT, (b) CNT-Sc dan (c) CNT-V

Struktur yang mengadsorpsi hidrogen perlu dilakukan optimasi geometri juga untuk mendapatkan struktur yang stabil. Hasil optimasi geometri struktur yang telah mengadsorpsi hidrogen dapat dilihat pada Gambar 2.

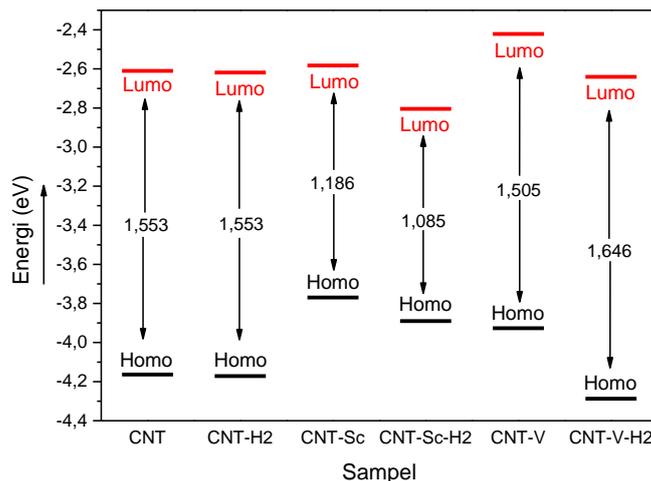


**Gambar 2.** Struktur (a) CNT-H<sub>2</sub>, (b) CNT-Sc-H<sub>2</sub> dan (c) CNT-V-H<sub>2</sub>

Struktur yang telah dioptimasi geometri tidak hanya menghasilkan kestabilan, namun juga dihasilkan HOMO LUMO yang digunakan untuk menghitung *bandgap*. Besarnya energi celah pita dapat ditentukan berdasarkan data HOMO dan LUMO dengan menghitung selisihnya. Selisih energi HOMO-LUMO atau yang disebut *bandgap* akan menggambarkan kemudahan suatu sistem molekul untuk mengalami eksitasi ke keadaan elektronik yang lebih tinggi. *Bandgap* yang lebih rendah akan mencerminkan kemudahan dalam proses terjadinya eksitasi elektron. Nilai *bandgap* dapat dilihat pada Tabel 1.

**Tabel 1.** Data HOMO, LUMO dan *Bandgap*

Sampel	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Bandgap (eV)
CNT	-4,1634501715	-2,6103905945	1,5530595770
CNT-H <sub>2</sub>	-4,1717959075	-2,6185765997	1,5532193078
CNT-Sc	-3,7696794588	-2,5829133402	1,1867661186
CNT-Sc-H <sub>2</sub>	-3,8901252742	-2,8044557615	1,0856695127
CNT-V	-3,9264089536	-2,4210934089	1,5053155447
CNT-V-H <sub>2</sub>	-4,2874878915	-2,6407759311	1,6467119604
H <sub>2</sub>	-11,8085716340	2,7235372240	14,5321088580



**Gambar 3.** Diagram tingkat energi LUMO dan *bandgap* dari sampel sebelum dan setelah adsorpsi hidrogen

Tabel 1 menunjukkan bahwa CNT mengalami perubahan tingkat energi dari pita valensi yang bergeser keatas mendekati pita konduksi. Perubahan ini juga dapat disebut perubahan HOMO. CNT yang semula memiliki tingkat energi pada HOMO sebesar -4,1634501715 eV, setelah dilakukan doping logam Sc pada CNT mengalami perubahan energi HOMO menjadi sebesar -3,7696794588 eV. Hal ini dikarenakan logam menyediakan lebih banyak lubang/*hole* pada pita konduksi dengan adanya kekosongan ruang pada valensi yaitu pada orbital d. Struktur CNT mengalami perubahan *bandgap* dari 1,5530595770 eV menjadi 1,1867661186 eV setelah dilakukan doping logam Sc.

Perubahan juga terjadi saat dilakukan doping logam V pada CNT. Energi HOMO pada CNT yang awalnya sebesar -4,1634501715 eV mengalami perubahan setelah dilakukan doping logam yaitu sebesar -3,9264089536 eV. Hal ini menunjukkan bahwa doping logam V menyebabkan adanya pergeseran tingkat energi pada pita valensi dan pita konduksi. Perubahan ini menyebabkan nilai *bandgap* yang semula 1,5530595770 eV, ketika dilakukan doping logam V menjadi sebesar 1,5053155447 eV. Hal ini dikarenakan logam menyediakan lebih banyak lubang/*hole* pada pita konduksi dengan adanya kekosongan ruang pada valensi yaitu pada orbital d.

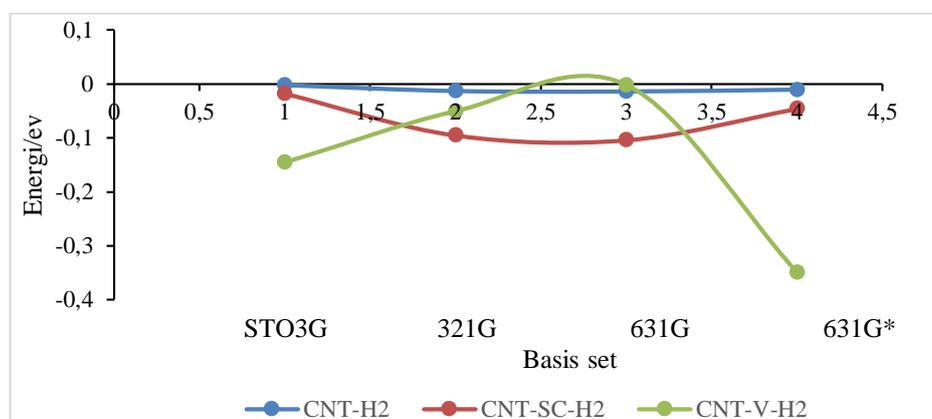
Nilai *bandgap* pada CNT doping logam Sc dan V yaitu lebih rendah daripada CNT murni. Hasil ini mengindikasikan bahwa CNT mengalami perubahan yang tidak signifikan ketika dilakukan doping logam Sc atau V. Penelitian Tabtimsai *et al.* (2012) dihasilkan nilai *bandgap* pada CNT murni sebesar 2,014 eV menjadi 1,605 eV setelah dilakukan doping Fe. Hal ini menunjukkan bahwa CNT yang telah dilakukan doping Fe memiliki *bandgap* yang lebih kecil dibanding CNT murni.

*Bandgap* pada struktur yang telah mengadsorpsi hidrogen dapat dilihat pada Tabel 1. Struktur CNT, CNT-Sc dan CNT-V yang telah mengadsorpsi hidrogen berturut-turut memiliki *bandgap* sebesar 1,5532193078 eV; 1,0856695127 eV dan 1,6467119604 eV. Nilai *bandgap* dari struktur yang mengadsorpsi hidrogen mengalami sedikit kenaikan dibandingkan struktur sebelum mengadsorpsi hidrogen. Hal ini menandakan bahwa penambahan hidrogen untuk adsorpsi hanya memiliki pengaruh yang kecil. Kenaikan yang terjadi diakibatkan adanya penambahan molekul hidrogen untuk adsorpsi yang diketahui hidrogen memiliki *bandgap* yang besar yaitu 14,5321088580 eV. Hasil ini sesuai dengan penelitian Tabtimsai *et al.* (2012) dimana SWCNT murni yang memiliki *bandgap* sebesar 2,014 eV mengalami kenaikan *bandgap* setelah mengadsorpsi hidrogen yaitu menjadi sebesar 2,204 eV. Secara keseluruhan nilai *bandgap* struktur CNT mengalami penurunan dengan semakin tinggi *basis set* yang digunakan, namun *bandgap* untuk struktur yang telah dilakukan doping mengalami fluktuasi seiring bertambahnya *basis set*.

Optimasi geometri juga menghasilkan energi total yang digunakan untuk menghitung energi adsorpsi dari struktur tersebut. Kestabilan suatu struktur dapat dilihat dari energinya, semakin kecil energi total yang dihasilkan maka struktur tersebut semakin stabil. Data energi adsorpsi sebelum dan setelah di doping logam dapat dilihat pada Tabel 2.

**Tabel 2.** Energi adsorpsi sebelum dan setelah di *doping* logam

Sampel	Energi (eV)	Eads (eV)
CNT	-62543,4178703954	-
CNT-H <sub>2</sub>	-62575,4151697065	-0,0108127215
CNT-Sc	-83240,4212929049	-
CNT-Sc-H <sub>2</sub>	-83272,3617935908	-0,0459859037
CNT-V	-88226,2847826571	-
CNT-V-H <sub>2</sub>	-88257,9220814181	-0,3491878286
H <sub>2</sub>	-31,9864865896	-

**Gambar 4.** Energi adsorpsi CNT, CNT-Sc dan CNT-V

Berdasarkan Tabel 2, energi total yang didapatkan dari penelitian dengan menggunakan DFT/B3LYP/6-31G\* pada CNT sebesar -62543,4178703954 eV, sedangkan energi total CNT-Sc sebesar -83240,4212929049 eV dan energi total CNT-V sebesar -88226,2847826571 eV. Hal ini menunjukkan bahwa interaksi antara logam V dengan CNT lebih besar dibandingkan dengan logam Sc. Menurut Alberty (1992), salah satu faktor yang dapat mempengaruhi kekuatan interaksi antara adsorben dan adsorbatnya adalah jari-jari logam. Semakin kecil jari-jari logam maka semakin besar kekuatannya. Gambar 4 menunjukkan energi total yang dihasilkan dari beberapa *basis set* pada masing-masing struktur mengalami penurunan. Penurunan energi total juga ditunjukkan pada struktur CNT yang telah dilakukan *doping*. Hal ini menunjukkan bahwa penambahan logam menyebabkan energi total pada struktur mengalami penurunan. Kestabilan struktur setelah optimasi geometri ditandai dengan dihasilkannya energi minimum pada struktur, semakin kecil energi yang dihasilkan maka struktur semakin stabil (Ramachandran *et al.*, 2008).

Penelitian ini juga menghitung energi adsorpsi hidrogen pada CNT, CNT-Sc dan CNT-V. Adsorpsi terjadi pada permukaan *nanotube* karena proses ini bertujuan untuk penyimpanan hidrogen dan suatu saat hidrogen tersebut perlu dilepaskan jika digunakan sehingga dilakukan adsorpsi secara fisika agar mudah pelepasannya. Adsorpsi pada CNT terjadi dikarenakan adanya interaksi antara H<sub>2</sub> dengan nanotube, namun adsorpsi pada struktur yang telah dilakukan *doping* diakibatkan adanya interaksi H<sub>2</sub> dengan orbital d pada logam. Dari data yang didapatkan dilakukan perhitungan energi adsorpsi dari CNT yaitu sebesar -0,0108127215 eV, sedangkan energi adsorpsi pada CNT-Sc dan CNT-V masing-masing sebesar -0,0459859037 eV dan -0,3491878286 eV. Tanda negatif dari energi tersebut menandakan bahwa proses adsorpsi melalui proses eksotermis. Hal ini dikarenakan pada saat molekul hidrogen berinteraksi dengan permukaan adsorben terjadi pembebasan sejumlah energi sehingga adsorpsi bersifat eksoterm. Hasil ini sesuai dengan penelitian Tabtimsai *et al.* (2012) menyatakan adsorpsi molekul hidrogen pada SWCNT murni dan di *doping* logam Fe terjadi melalui proses eksotermis sehingga hasilnya negatif.

Hasil energi adsorpsi pada CNT-V jika dibandingkan dengan CNT-Sc memiliki energi adsorpsi yang lebih besar, hal ini dikarenakan efek dari *doping* logam yang menyebabkan terjadinya interaksi yang kuat antara logam V dengan molekul hidrogen. Semakin kecil jari-jari logam maka semakin besar kekuatan interaksinya. Besarnya energi adsorpsi pada CNT-Sc lebih kecil dari energi adsorpsi CNT-V namun ternyata terlalu jauh selisih energi adsorpsinya dan kurang sesuai harapan. Hal ini disebabkan oleh logam Sc yang memiliki jari-jari lebih besar dari logam V menyebabkan interaksinya semakin lemah sehingga energi adsorpsinya semakin kecil. Faktor lain yang menyebabkan ketidaksesuaian yaitu kemampuan perangkat yang tidak sesuai sehingga running CNT-Sc-H<sub>2</sub> tidak bisa selesai. Seperti penelitian

Buasaeng *et al.* (2017) menyatakan energi adsorpsi gas NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub> dan AsH<sub>3</sub> pada SWCNT-V memang lebih besar dibandingkan SWCNT-Sc karena terjadi interaksi lebih besar antara V dan SWCNT dari pada logam Sc dengan SWCNT. Hal ini disebabkan jari-jari V yang lebih kecil sehingga adsorpsinya semakin kuat. Jadi meskipun dalam penelitian ini running CNT-Sc-H<sub>2</sub> tidak selesai, hasilnya sesuai yaitu lebih rendah dari energi adsorpsi CNT-V.

Hasil yang didapat menunjukkan bahwa energi adsorpsi CNT yang telah dilakukan *doping* logam Sc dan V lebih kuat daripada CNT murni. Hal ini menunjukkan bahwa *doping* atom Sc dan V meningkatkan kemampuan adsorpsi hidrogen serta CNT murni memiliki sensitivitas yang lemah terhadap molekul gas hidrogen. Penelitian Abdullah (2016) menyatakan bahwa *doping* pada permukaan CNT memiliki adsorpsi yang lebih kuat daripada CNT. Selain itu *doping* logam menyebabkan struktur menjadi kurang stabil daripada struktur CNT murni. Hal ini diakibatkan adanya tarikan dari logam yang berikatan dengan nanotube, namun struktur masih cukup stabil untuk adsorpsi hidrogen. Hasil ini juga sesuai dengan penelitian Tabtimsai *et al.* (2012) yang menyatakan bahwa adsorpsi hidrogen menggunakan CNT yang telah dilakukan *doping* logam transisi yaitu Fe dinyatakan lebih kuat daripada CNT yang tidak dilakukan *doping* logam. Sehingga dapat disimpulkan CNT yang dilakukan *doping* logam lebih cocok untuk penyimpanan hidrogen.

### Simpulan

Dopan logam Sc dan V pada CNT menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G\* dapat mempengaruhi struktur elektronik yaitu menurunkan nilai *bandgap*. *Bandgap* dari struktur CNT semula 1,5530595770 eV, setelah dilakukan *doping* logam Sc nilai *bandgap* menjadi 1,1867661186 eV dan *doping* logam V mengubah *bandgap* menjadi 1,5053155447 eV. Struktur yang telah mengadsorpsi hidrogen mengalami sedikit kenaikan pada nilai *bandgap* dibandingkan sebelum adsorpsi. Selain itu dopan logam Sc maupun V pada CNT juga menyebabkan energi adsorpsi hidrogen lebih besar dibandingkan energi adsorpsi hidrogen pada CNT murni. Energi adsorpsi hidrogen pada CNT, CNT-Sc dan CNT-V berturut-turut sebesar -0,0108127215 eV, -0,0459859037 eV dan -0,3491878286 eV. Hasil energi adsorpsi CNT-V lebih besar dibanding CNT-Sc dan CNT dikarenakan interaksi yang kuat antara logam V dengan molekul hidrogen, sehingga dapat disimpulkan CNT *doping* logam lebih cocok untuk penyimpanan hidrogen.

### Daftar Pustaka

- Abdullah, H.Y. 2016. Theoretical Study of the Binding Energy of Some Gases on Al-doped Carbon Nanotube. *Result in Physics*, 6: 1146-1151
- Abdullah, M. 2009. *Pengantar Nanosains*. Bandung: Penerbit ITB
- Barghi, S.H., T.T. Tsotsis. & M. Sahimi. 2013. Chemisorption, Physisorption and Hysteresis during Hydrogen Storage in Carbon Nanotubes. *Journal of Hydrogen Energy*, 39: 1390-1397
- Buasaeng, P., W. Rakrai, B. Wannoo & C. Tabtimsai. 2017. DFT Investigation of NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, and AsH<sub>3</sub> Adsorptions on Sc-, Ti-, V-, and Cr-doped Single-Walled Carbon Nanotubes. *Applied Surface Science*, 400: 506-514
- Cheng, H. 2005. Molecular Dynamics Simulations on the Effects of Diameter and Chirality on Hydrogen Adsorption in Single Walled Carbon Nanotubes. *Journal Physics and Chemistry*, 109(9): 3780-3786
- Ghasemi, A. & M. Molla. 2012. Highly Sensitive Single-Walled Carbon Nanotube (5,0) for Adsorption Gases CO<sub>2</sub>, CO and N<sub>2</sub> : A DFT Study. *International Journal Pharmaceutical Technology Research*, 4(4): 1302-1308
- Gunawan, R., C.L. Radiman, M.A. Martoprawiro & H.K. Dipojono. 2010. Studi Ab Initio Grafit Batu Bara Sebagai Materi Penyimpan Hidrogen. *Jurnal Kimia Mulawarman*, 8(1): 16-22.
- Kurniady, A., Y.S. Putra & I.D. Faryuni. 2014. Studi Analisis Pengaruh Suhu, Tekanan dan Ukuran Pori Graphene Terhadap Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen. *Prisma Fisika*, II(2): 49-56.
- Lavanya, R., V.J. Surya, I. Lakshmi, K. Iyakutti, V. Vasu, H. Mizuseki & Y. Kawazoe. 2014. Hydrogen Storage in TiO<sub>2</sub> Functionalized (10, 10) Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT) - First Principles Study. *Hydrogen Energy*, 39: 4973-4980
- Mananghaya, M., L.P. Belo & A. Beltran. 2016. Adsorption of Hydrogen in Scandium/Titanium Decorated Doped Carbon Nanotube. *Material Chemistry and Physics*, 180: 357-363

- Mananghaya, M.R., D.Y.G.N. Santos & C. Stampfl. 2017. Hydrogen Adsorption on Nearly Zigzag-Edge Nanoribbons: A Density Functional Theory Study. *Scientific Reports*, 7(15727): 1-11
- Pranowo, H.D., 2011. *Pengantar Kimia Komputasi*. I ed. Bandung: Lubuk Agung
- Ramachandran, K., G. Deepa & K. Namboori. 2008. *Computational Chemistry and Molecular Modelling*. Coimbatore: Springer-Verlag Berlin Heidelberg
- Reyhani, A., A.N. Golikand, S.Z. Mortazavi, L. Irannejad & A.Z. Moshfegh. 2010. The Effect of Multi-walled Carbon Nanotubes Graphitization Treated With Different Atmospheres and Electrolyte Temperatures on Electrochemical Hydrogen Storage. *Electrochimica Acta*, 55(16): 4700-4705
- Seenithurai, S., R.K. Pandyan, S.V. Kumar & M. Mahendran. 2013. H<sub>2</sub> Adsorption in Ni and Passivated Ni Doped 4Å Single Walled Carbon Nanotube. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38: 7376-7381
- Supardi, K.I. dan G. Luhbandjono. 2008. *Kimia Dasar II*. Semarang: Universitas Negeri Semarang
- Sukardjo. 1985. *Kimia Koordinasi*. Jakarta: PT Bina Aksara
- Tabtimsai, C., S. Keawwangchai, N. Nunthaboot, V. Ruangpornvisuti & B. Wannoo. 2012. Density Functional Investigation of Hydrogen Gas Adsorption on Fe-doped Pristine and Stone Wales Defect Single-Walled Carbon Nanotubes. *Journal of Molecular Modeling*, 18: 3941-3949
- Yildirim, T. & S. Ciraci. 2005. Titanium-Decorated Carbon Nanotubes as a Potential High-Capacity Hydrogen Storage Medium. *The American Physical Society*, 94: 1-4
- Zhou, Z., X. Gao, J. Yan & D. Song. 2006. Doping Effects of B and N on Hydrogen Adsorption in Single-Walled Carbon Nanotubes Through Density Functional Calculations. *Carbon*, 44: 939-947