

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
DAFTAR PUBLIKASI	xv
INTISARI	xvi
ABSTRAK	xvii
BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang Penelitian	1
1.2 Tujuan Penelitian	4
1.3 Manfaat Penelitian	4
1.4 Keaslian dan Kebaruan Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 <i>Carbon nanotube</i> (CNT)	9
2.1.1 Struktur dan klasifikasi CNT	9
2.1.2 Penggulungan dan penamaan CNT	12
2.1.3 Kiralitas CNT	15
2.1.4 Unit sel CNT	16
2.1.5 Sifat elektronik CNT	16
2.1.6 Sifat termal CNT	21
2.1.7 Sifat mekanik CNT	21
2.1.8 Kegunaan CNT	23
2.1.9 Sintesis CNT	26
2.2 Teori Pita Padatan	30
2.2.1 Konduktivitas listrik	33
2.2.2 Energi orbital	35
2.2.3 Parameter sifat elektronik berdasarkan perhitungan orbital molekul	36
2.3 Kimia Komputasi	39
2.4 Metode Struktur Elektronik	42
2.4.1 Teori fungsi kerapatan/ <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	43
2.4.2 <i>Basis set</i>	46
2.4.3 Optimasi geometri	48
BAB III LANDASAN TEORI	
3.1 Landasan Teori	50
3.2 Hipotesis	53

BAB IV	METODE PENELITIAN	
4.1	Tempat Penelitian	56
4.2	Model Sistem dan Peralatan Penelitian	56
4.2.1	Model sistem	56
4.2.2	Peralatan penelitian	58
4.3	Prosedur Penelitian	59
4.3.1	Pemilihan <i>basis set</i>	59
4.3.2	Pemodelan pengaruh panjang tabung terhadap sifat elektronik CNT	60
4.3.3	Pemodelan pengaruh kiralitas dan diameter tabung terhadap sifat elektronik CNT	61
4.3.4	Pemodelan <i>doping</i> nitrogen pada CNT (6,0) murni membentuk CNT ter- <i>doping</i> nitrogen	61
a.	Pemodelan dan optimasi struktur 3 dimensi dari CNT murni	61
b.	Pemodelan CNT ter- <i>doping</i> nitrogen (CNT-1gN, CNT-2gN, CNT-1pN dan CNT-2pN)	62
c.	Perhitungan parameter struktur CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	64
d.	Perhitungan parameter sifat elektronik CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	65
BAB V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	
5.1	Penentuan Metode Perhitungan dan <i>Basis set</i>	68
5.2	Pengaruh Panjang Tabung Terhadap Sifat Elektronik CNT	72
5.3	Pengaruh Kiralitas dan Diameter Terhadap Sifat Elektronik CNT	78
5.4	Pemodelan dan Optimasi Struktur CNT Murni dan Ter- <i>doping</i> Nitrogen	81
5.4.1	Hasil optimasi geometri CNT murni dan CNT ter- <i>doping</i> nitrogen	81
5.4.2	Hasil perhitungan parameter struktur CNT murni dan CNT ter- <i>doping</i> nitrogen	87
a.	Panjang dan sudut ikatan antar atom dalam CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	87
b.	Diameter CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	92
c.	Momen dipol CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	93
d.	Energi kohesif CNT murni dan CNT ter- <i>doping</i> nitrogen	94
5.4.3	Hasil perhitungan parameter sifat elektronik CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	95
a.	<i>Density of State</i> (DOS) untuk CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	96
b.	Energi HOMO, energi LUMO dan celah energi untuk CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	105

c.	Energi Fermi dan fungsi kerja CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	109
d.	Potensial ionisasi CNT murni dan CNT ter- <i>doping</i> nitrogen	113
e.	Afinitas elektron CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	114
f.	<i>Hardness</i> CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	115
g.	Perhitungan frekwensi vibrasi ikatan dalam CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	116
h.	Perhitungan energi eksitasi elektron dalam CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	122
5.4.4	Pengaruh <i>doping</i> nitrogen terhadap sifat elektronik CNT	130
5.4.5	Perbandingan struktur dan sifat elektronik CNT murni dan ter- <i>doping</i> nitrogen	131
5.4.6	Pengaruh konsentrasi dopan nitrogen dalam CNT terhadap celah energi	134
5.4.7	Pengaruh <i>doping</i> nitrogen terhadap energi vibrasi ikatan dan eksitasi elektron dalam CNT	134
BAB VI	KESIMPULAN DAN SARAN	137
6.1	Kesimpulan	137
6.2	Saran	138
DAFTAR PUSTAKA		140
LAMPIRAN		150