

# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang.

Pada zaman sekarang, nanoteknologi adalah sebuah bidang bersifat penting dalam fisika, kimia, biologi, dan teknik. Salah satu perkembangan dalam nanoteknologi adalah nanopartikel. Penelitian nanopartikel berkembang pesat, jenis nanopartikel yang banyak menarik perhatian adalah nanopartikel logam karena banyak digunakan dalam bidang optik, elektronika, biologi, katalisis dan kedokteran. Salah satu logam yang paling banyak dipelajari adalah emas (Au) dan perak (Ag). Nanopartikel perak dan emas dapat ditemukan di berbagai barang rumah tangga yang relevan dengan hampir setiap aspek kehidupan sehari-hari. Barang-barang tersebut antara lain tambalan, perban, cat, pakaian olahraga, produk perawatan pribadi, peralatan penyimpanan makanan, kosmetik, disinfektan, dan digunakan juga sebagai antibakteri dan antijamur pada berbagai produk seperti kaus kaki, tisu basah, makanan, dan lain-lain (Nur Aifah dkk, 2020).

Simulasi dinamika molekuler merupakan metode komputasi material berfungsi untuk memprediksi sifat fisis termodinamik zat padat, cair, dan gas. Hal ini sangat bermanfaat dalam pembuatan peralatan. Simulasi dinamika molekuler mensimulasikan gerak partikel, atom, molekul sampai untuk obyek berukuran besar seperti planet dalam galaksi sehingga dapat mengetahui reaksi jika diberi perlakuan seperti pemanasan (Farisatul, 2015).

Metode dinamika molekuler memerlukan informasi koordinat awal atom; kondisi simulasi seperti temperatur, tekanan, rapat partikel, dan lainnya; fungsi potensial interaksi antar atom untuk material tersebut dan spesifikasi obyek yang disimulasikan. Semakin akurat fungsi potensial, maka hasil simulasi semakin akurat (Widiasih, 2013). Informasi yang disajikan dari hasil simulasi berupa besaran statis dan dinamis pada skala atomik selama periode tertentu berdasarkan hukum fisika. Simulasi dinamika molekuler digunakan karena memiliki banyak kelebihan dibandingkan dengan simulasi skala atomik lainnya. Bahkan simulasi dinamika molekuler disebut menjadi metode simulasi terbaik untuk mempelajari

deformasi dari suatu material kristal (Ayu Triwardani, 2019). Hal ini menjadi landasan menggunakan simulasi dinamika molekuler pada penelitian ini.

Simulasi dinamika molekuler pada penelitian ini dilakukan menggunakan program LAMMPS. LAMMPS merupakan kode dinamika molekular klasik yang berfokus pada pemodelan material. LAMMPS memiliki kemampuan berjalan pada prosesor tunggal atau paralel menggunakan teknik penyampaian pesan dan dekomposisi spasial dari domain simulasi partikel paralel pada skala atomistik, skala kasar, skala meso, atau skala kontinu. Pengembangan LAMMPS dimulai pada pertengahan 1990-an sebagai kemitraan Laboratorium Nasional Sandia, Laboratorium Nasional Lawrence Livermore, Perusahaan Cray, Perusahaan DuPont, dan Perusahaan Bristol-Myers Squibb dengan tujuan untuk membuat kode MD paralel yang dapat memanfaatkan algoritma paralelisme spasial. LAMMPS memungkinkan fleksibilitas bagi pengguna atau pengembang untuk menyesuaikan model yang mereka simulasikan, memperluas kode dengan fitur baru yang dibutuhkan dan bersedia untuk menerapkannya, dan memasang kode lain untuk aplikasi multifisika dan multiskala (Thompson, 2022). Simulasi dilakukan berdasarkan skema dinamika molekular menggunakan Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator.

Nanopartikel emas dan perak diberi perlakuan panas dari suhu ruangan, sebesar 300 K, hingga 1400 K dimana sedikit di atas suhu leleh nanopartikel emas dan perak. Sebelum perlakuan panas dilakukan, sistem direlaksasi terlebih dahulu selama 20 ps pada suhu ruangan, sebesar 300 K, dan tekanan 0 GPa. Perlakuan tersebut menyebabkan evolusi sistem dimana sistem merata dengan struktur FCC mendominasi pada suhu awal kemudian sistem benar-benar meleleh dengan struktur tidak teridentifikasi karena suhu di atas ambang leleh dengan struktur FCC mendominasi (R Fahdiran, dkk. 2019). Evolusi tekanan sistem menunjukkan pola osilasi yang khas untuk kasus pelelehan yang diinduksi termal. Tekanan tarik mampu merusak material bahkan untuk nilai yang lebih tinggi pada nilai tekan dan tarik, tekanan tersebut bertanggung jawab dalam pemutusan ikatan antar atom yang menyebabkan terjadinya pelelehan (R Fahdiran, dkk. 2019).

Nanopartikel saat ini dikembangkan dalam bidang kesehatan, seperti

nanomedicine, drug delivery, bahkan nanobot sebagai media pengobatan penyakit secara spesifik. Nanopartikel berasal dari logam mulia seperti emas dan perak lebih banyak dikembangkan karena bersifat inert dan relatif aman dalam penggunaan secara in vivo pada dosis tertentu. Nanopartikel emas diterapkan sebagai bahan kosmetik, biosensor, biomedis, katalis, dan sebagai pengantar obat (drug delivery agent) untuk penyakit kanker (H Setiawan, 2014). Nanopartikel perak digunakan dalam bidang nanomedicine, farmasi, biosensing, dan rekayasa biomedis (S Hun Lee, 2019).

#### B. Perumusan Masalah.

Berdasarkan latar belakang di atas, rumusan masalah yang diidentifikasi adalah:

1. Bagaimana menerapkan simulasi dinamika molekuler untuk nanopartikel emas dan perak?
2. Bagaimana perubahan sifat termodinamik nanopartikel emas dan perak yang diberi perlakuan panas?
3. Bagaimana perubahan struktur kristal nanopartikel emas dan perak yang diberi perlakuan panas?
4. Bagaimana perbandingan perubahan sifat termodinamik dan struktur kristal nanopartikel emas dan perak yang diberi perlakuan panas?

#### C. Tujuan Penelitian.

Setelah diketahui permasalahan yang akan dianalisa melalui penelitian, maka tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Menganalisis penerapan simulasi dinamika molekuler untuk nanopartikel emas dan perak.
2. Menganalisis perubahan sifat termodinamik nanopartikel emas dan perak yang diberi perlakuan panas.
3. Menganalisis perubahan struktur kristal nanopartikel emas dan perak yang diberi perlakuan panas.
4. Menganalisis perbandingan perubahan sifat termodinamik dan struktur kristal nanopartikel emas dan perak yang diberi perlakuan panas.

#### D. Manfaat Penelitian.

Penelitian ini bermanfaat untuk memberikan pemahaman terkait reaksi nanopartikel emas dan perak terhadap perubahan suhu; membantu para ilmuwan untuk merancang material baru lebih tahan panas yang diaplikasikan dalam bidang elektronik, optik, dan material komposit; menghasilkan pengetahuan untuk pengembangan perangkat elektronik nano yang tahan panas dan lebih tahan lama; membantu menciptakan sensor lebih sensitif dan stabil berdasarkan pemahaman efek panas pada nanopartikel.



*Intelligentia - Dignitas*