

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

#### 1.1.1 Gold Nanopartikel

Nanoteknologi menjadi topik yang hangat dalam perkembangan sains terkini dan tema tentang nanoteknologi banyak menjadi judul di banyak penelitian. Nanoteknologi memiliki domain yang luas mencakup berbagai lintas disiplin ilmu. Dalam bidang medis nanoteknologi dapat dimanfaatkan sebagai *fluorescent biolabeling*, biodeteksi patogen, deteksi protein dan plasma sejenis dalam sel, kajian struktur DNA, rekayasa jaringan, deteksi tumor, deteksi dan perlakuan kanker, *drug delivery*, *gen delivery*, serta pemisahan dan pemurnian sel, dan lain sebagainya [Rajiv, 2012].

Dalam bidang elektronik nanomaterial telah diteliti untuk digunakan dalam superkapasitor yang mampu mengganti fungsi daya listrik eksternal [Westover, 2014], baterai fleksibel yang bebas merkuri [Yang, 2014], serta *nanowires bridging transistor* [Oh, 2014]. Dalam bidang pertahanan Naval Research Laboratory meneliti keramik yang sangat keras untuk *armor window* kapal selam namun tetap transparan [Wallmershauser, 2014]. Aplikasi nanomaterial juga banyak dikembangkan dalam berbagai bidang selain tersebut di atas.

Sebagai teknologi terbaru, riset nanoteknologi ini menyedot perhatian banyak pihak untuk berinvestasi. Data yang didapat dari website *National Nano*

*Institute*, institusi yang fokus pada nanoteknologi, diketahui bahwa Amerika Serikat menginvestasikan dana besar untuk riset nanoteknologi yakni senilai US\$ 3,7 Miliar, Uni Eropa menginvestasikan US\$ 1,2 Miliar, sedangkan Jepang US\$ 750 Juta. Fakta ini menegaskan bahwa topik tentang nanoteknologi sangat menarik dan akan tetap menjadi arah utama perkembangan teknologi beberapa dekade mendatang.

Dikarenakan nanoteknologi adalah pendayagunaan dan manipulasi material pada skala nano maka nanomaterial adalah fondasi utama dari nanoteknologi. Sebuah nanomaterial atau material dalam skala nano memiliki sifat kimia dan sifat fisis yang berbeda dari material tersebut ketika masih ditinjau dalam skala makro [Lue, 2007]. Sifat-sifat ini unik dan dapat diatur sesuai kebutuhan aplikasi.

Di antara beragam nanomaterial, emas berskala nano diyakini sebagai nanopartikel tertua yang paling dahulu dikenal dalam peradaban manusia. Sejak zaman Romawi Kuno (510 SM – 530 M) koloid emas telah digunakan dalam perhiasan gelas untuk mengatur intensitas warna kuning dan merah berdasarkan tingkat konsentrasi emas berskala nano dalam koloid tersebut.

Kini topik tentang *gold nanoparticles* (GNP) dijadikan judul di banyak riset nanopartikel. Salah satu bidang yang sangat menarik dari penelitian yang melibatkan GNP adalah dalam diagnosis dan perlakuan sel kanker. Metode yang umum digunakan dalam diagnosis kanker membutuhkan biaya mahal dan tidak aman bagi sel di sekitar kanker yang masih normal. Hadirnya GNP diperuntukkan sebagai generasi baru diagnosis dengan biaya murah dan akurasi perlakuan yang

spesifik hanya pada sel kanker dan membiarkan sel normal di sekitarnya tak terganggu [Abdelhalim, 2012].

Li mempelajari sifat *fluorescent* GNP kaitannya dengan aplikasi DNA *biosensing* [Li, 2005]. Huang meneliti GNP sebagai material yang dapat diimplementasikan untuk terapi fototermal [Huang, 2010]. Han memanfaatkan GNP untuk aplikasi *drug delivery* [Han, 2007]. Giovannozzi memanfaatkan fenomena hamburan *surface enhanced raman* pada GNP sebagai pendeteksi kandungan melamine dalam susu [Giovannozzi, 2014]. Xinmai memanfaatkan *gold nanocages* sebagai *contrast agent* di otak *cerebral cortex* tikus dalam fotoakustik tomografi [Xinmai, 2012]. Adapun Bindhu meneliti GNP sebagai sensor antibakteri [Bindhu, 2014].

Penelitian-penelitian terkait *bioimaging* dan *biodetection* tersebut menunjukkan bahwa GNP cukup populer dewasa ini. Hal ini disebabkan sifat yang dimiliki logam mulia ini yang biokompatibel. Sifat-sifat tersebut seperti inert secara biologis, memiliki kemampuan biokonjugasi, kaya sifat optis yang terkontrol, ukuran yang sesuai dengan skala struktur biologis (virus dan bakteri) dan molekul (protein dan DNA) [Chui, 2007].

### 1.1.2 Struktur dan Sifat Elektrik

Kajian tentang struktur dari nanopartikel menjadi penting karena bentuk dan jenisnya sangat beragam. Bentuk nanopartikel ini ada yang *nanosphere*, *nanocage*, *nanorice*, *nanocube*, *bipyramids*, *nanoshell*, ada pula yang *nanocluster*. *Nanocluster* sendiri adalah kumpulan dari beberapa nanopartikel yang membentuk

struktur tersendiri. Jenis dari nanopartikel ada yang *quantum dots*, semikonduktor nanopartikel, metal nanopartikel, dan magnetik nanopartikel.

Lebih dari itu, fakta bahwa pengaturan sifat nanopartikel ditentukan oleh jenis, ukuran, dan medium sekitar [Zhang, 2009], semakin menegaskan pentingnya studi terhadap struktur. Dalam upaya pendayagunaan aplikasi GNP, kajian terhadap struktur harus didahulukan karena dengan inilah dapat dibangun kerangka kerja *molecular dynamics* (MD) dari sebuah GNP.

Riset terkait karakterisasi struktural dari GNP telah dikembangkan terus menerus. Williams mempelajari struktur gold nanokristal. Ia menelaah orientasi struktur dari kristal saat dalam keadaan temperatur tinggi. Distribusi populasi dari morfologi GNP disajikan dalam fungsi ukuran (*size*) dengan mengumpulkan sejumlah besar pencitraan *high-resolution electron microscopy* (HERM) [Williams, 2003]. O'Malley menyelidiki kristalisasi dalam sistem *hard sphere* melalui MD [O'Malley, 2001]. Hernandez menjabarkan struktur permukaan GNP gold *nanorods* melalui kebiasaan dari reaksi elektrokimia sensitif dan kemudian membandingkan hasilnya dengan hasil karakterisasi dengan metode lain [Hernandez, 2006]. Chui dalam thesis doctoralnya melakukan kajian MD terhadap struktur dan stabilitas GNP. Ia melakukan kajian MD terhadap tiga struktur GNP; *icosahedral*, *icosahedral-like*, dan *amorph* [Chui, 2007]

Dalam fisik zat padat, termasuk GNP, tinjauan sifat elektrik yang sering dibahas adalah tentang *band gap* atau celah pita energi. Celah pita merupakan rentang energi dalam zat padat di mana tidak ada status elektron bisa eksis di situ. Dalam grafik dari susunan pita elektronik, celah pita umumnya mengacu pada

perbedaan energi (dalam eV) antara bagian atas pita valensi dengan bagian bawah pita konduksi. Kajian tentang celah pita ini penting karena merupakan faktor utama yang menentukan tingkat konduktivitas listrik.

Menyelidiki interaksi dua atom saja membutuhkan perhitungan analitis yang lama dan sulit. Perhitungan analitis benda banyak (*many body*) hampir tidak mungkin dilakukan secara analitis karena terlalu sulitnya. Oleh karena itu perhitungannya perlu dilakukan secara numerik dibantu komputer melalui simulasi MD. Metode MD terbaru yang digabungkan dengan *density functional theory* (DFT) disebut *Ab Initio Molecular Dynamic* (AIMD).

Perangkat lunak untuk kajian AIMD yang sering digunakan adalah SIESTA. Kelebihan SIESTA adalah perangkat yang dikembangkan oleh banyak ilmuwan dari beberapa negara sehingga dapat menghasilkan berbagai luaran, banyak pengguna dan sekaligus komunitas atau forumnya di dunia maya yang dapat dimanfaatkan, serta perangkat ini tidak berbayar. SIESTA dapat digunakan untuk menghitung banyak hal diantaranya seperti *radial distribution function* (RDF), distribusi sudut ikat, statistik cincin, dan celah pita. Penelitian ini hendak mengkaji struktur GNP serta sifat elektriknya dengan tinjauan AIMD.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, masalah yang hendak dibahas dalam penelitian ini adalah kajian *AIMD* terhadap struktur dan sifat termodinamik *GNP* yang meliputi:



1. Bagaimana karakteristik struktur GNP melalui kajian jumlah ikatan, distribusi sudut ikat, dan FDR?
2. Bagaimana sifat elektrik GNP melalui kajian rapat keadaan dan struktur pita?

### 1.3 Batasan Masalah

Sejumlah batasan masalah dipilih untuk menyederhanakan penelitian ini.

Masalah disini dibatasi dengan:

1. Tiga sampel yang diteliti adalah likuid sebanyak 80 atom, amorf sebanyak 80 atom, dan icosahedral sebanyak 147 atom.
2. Analisis dilakukan secara numerik menggunakan perangkat lunak utama SIESTA dibantu RINGS, AtomEye, dan GNU Plot.

### 1.4 Tujuan

Memperhitungkan aspek epistemologi sejak awal direncanakannya, tujuan penelitian ini adalah:

1. Mengetahui karakteristik struktur GNP melalui kajian jumlah ikatan, distribusi sudut ikat, dan FDR?
2. Mengetahui sifat elektrik GNP melalui kajian rapat keadaan dan struktur pita?

## 1.5 Manfaat

Penelitian ini dapat dimanfaatkan sebagai:

1. Dasar teoritis untuk mengerti struktur dan sifat elektrik GNP
2. Dasar teoritis untuk sintesis dan aplikasi GNP
3. Pijakan untuk riset berkelanjutan di masa mendatang

