

# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang

Nanoteknologi adalah suatu teknik atau metode, yang digunakan untuk mengontrol bentuk dan struktur suatu material atau bahan pada skala atom, agar diperoleh suatu material baru yang memiliki sifat lebih unggul dari material sebelumnya (Karkare, 2008). Nanoteknologi mengalami perkembangan yang sangat pesat pada sepuluh tahun terakhir. Terbukti dengan pertumbuhan jumlah produk nanoteknologi yang tersedia dipasaran, yang telah mencapai 1814 jenis produk hingga tahun 2014. Nanopartikel perak merupakan salah satu material nano yang paling banyak digunakan, hampir seperlima produk nanoteknologi yang beredar dipasaran mengandung nanopartikel perak (Vance, 2015).

Berbagai metode sintesis telah dikembangkan untuk menghasilkan produk nanopartikel perak. Salah satu metode sintesis nanopartikel perak yang paling berkembang saat ini adalah metode reduksi menggunakan ekstrak tumbuhan (Elizondo, 2014). Berbagai macam ekstrak tumbuhan terbukti mampu menghasilkan nanopartikel perak dengan dengan ukuran partikel yang halus, seperti ; ekstrak *Citrullus colocynthis* (Satyavani, 2011), *Camellia sinensis* (Loo, 2012), *Dioscorea bulbifera* (Ghosh, 2012), *Rumex hymenosepalus* (Leon, 2013) dan *Withania somnifera* (Marslin, 2015). Kemampuan ekstrak tumbuhan sebagai reduktor sekaligus *capping agent* pada proses sintesis nanopartikel, tidak terlepas dari kandungan senyawa metabolit sekunder seperti; fenolik, tanin dan saponin yang ada didalam ekstrak tumbuhan tersebut (Kulkarni, 2014).

*Capping* adalah proses adsorpsi senyawa organik, yang memiliki sifat hidrofobik dan efek *steric hindrance* pada permukaan partikel logam. Senyawa-senyawa organik yang terikat pada permukaan logam akan menyebabkan tolakan antar partikel (*steric exclusion*), yang dapat mengontrol pertumbuhan partikel dan juga dapat mencegah terjadinya aglomerasi partikel logam selama proses sintesis

berlangsung (Daimon, 2015). Mekanisme interdifusi atau yang lebih dikenal sebagai proses adsorpsi senyawa organik pada permukaan logam, saat ini telah banyak dipelajari baik secara eksperimen maupun secara teoritis. Secara teoritis, berbagai metode komputasi telah dilakukan untuk mempelajari proses mekanise interdifusi tersebut dan salah satu metode yang paling banyak digunakan saat ini adalah metode *Density Functional Theory* (Magyar, 2011).

Metode DFT (*Density Functional Theory*) merupakan metode komputasi yang mempelajari sifat-sifat molekul berdasarkan penentuan kerapatan elektron dalam molekul. Dalam perhitungannya metode ini tidak tergantung pada jumlah elektron yang ada dalam sistem tersebut, akan tetapi hanya tergantung pada posisi elektron berada (Tsuneda, 2014). Beberapa penelitian secara teoritis menggunakan metode DFT seperti; adsorpsi oksigen pada permukaan perak (Michaelides, 2003), adsorpsi adenine pada permukaan emas dan perak (Pagliai, 2012), senyawa-senyawa aromatis seperti benzen, piridin dan tiopen pada permukaan emas dan tembaga (Tonigold, 2010) dan kecenderungan asam sitrat terikat pada permukaan perak, berhasil menjelaskan data hasil eksperimen yang telah didapatkan (Kilin, 2008).

Metode DFT merupakan metode komputasi yang tergolong mahal, sehingga metode ini dikembangkan menjadi beberapa metode komputasi yang lebih murah, diantaranya; metode DFT-B dan hibrid DFT/MM. Kedua metode tersebut dikembangkan untuk perhitungan komputasi menggunakan perangkat komputer yang memiliki spesifikasi rendah, akan tetapi untuk sistem tertentu dapat menghasilkan perhitungan yang sama baiknya dengan metode DFT itu sendiri. Selain itu keunggulan menggunakan kedua metode tersebut adalah waktu proses komputasi yang lebih cepat (Zheng, 2009).

Sampai saat ini belum ada laporan tentang kajian teoritis kemampuan *Capping* Katekin, Kateku Tanat dan Quarsetin pada Permukaan Perak, menggunakan metode hibrid DFT/MM dan DFT-B.

## B. Masalah penelitian

Dari latar belakang diatas dirumuskan masalah penelitian sebagai berikut;

1. Apakah metode hibrid DFT/MM dan DFT-B dapat digunakan untuk mempelajari interaksi Katekin, Kateku tanat dan Quarsetin pada permukaan perak
2. Bagaimana proses dan interaksi molekul Katekin, Kateku tanat dan Quarsetin ketika dijatuhkan pada permukaan perak.

## C. Tujuan penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk;

1. Mempelajari tata cara penggunaan metode hibrid DFT/MM dan DFT-B untuk melihat interaksi Katekin, Kateku tanat dan Quarsetin pada permukaan perak.
2. Mempelajari kemungkinan posisi jatuh dan energi adsorpsi Katekin, Kateku tanat dan Quarsetin pada permukaan perak.

## D. Manfaat penelitian

Penelitian ini memiliki manfaat untuk;

1. Memberikan informasi tentang penggunaan metode hibrid DFT/MM dan DFT-B untuk melihat interaksi Katekin, Kateku tanat dan Quarsetin pada permukaan perak.
2. Memberikan informasi tentang pola jatuh dan energi adsorpsi ketekin, kateku tanat dan quarsetin pada permukaan perak sehingga dapat dilihat peranannya sebagai *capping agent* untuk sintesis nanopartikel logam-logam lainnya.