

## MODEL SEL SIMULASI *SELF-ASSEMBLED MONOLAYER* REVERSIBEL

Wahyu Dita Saputri

*Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya  
Jl. Veteran Malang 65145*

\*Alamat korespondensi, Tel : +62-341-575838, Fax : +62-341-575835

Email: wditasaputri@gmail.com

### ABSTRAK

Sebuah model sederhana sel simulasi *self-assembled monolayer* (SAM) reversibel dengan deskripsi atomistik dikonstruksi untuk digunakan dalam metode simulasi molekuler. Molekul penyusun SAM direpresentasikan dengan amino alkanatiol (AAT) terprotonasi yang diamobilisasi pada permukaan pendukung berupa tembaga (Cu). Simulasi dinamika molekuler menunjukkan bahwa simulasi SAM dengan model ini berlangsung stabil dan dapat mendeskripsikan reversibilitas konformasi SAM.

**Kata kunci :** *self-assembled monolayer*, amino-alkanatiol, model potensial, simulasi molekuler

### ABSTRACT

A simple model of simulation cell of self-assembled monolayer (SAM) with atomistic description was constructed for molecular simulation method. The SAM consists of protonated amine-alkanethiol immobilized on copper (Cu) as supporting surface. A molecular dynamics simulation was performed using the constructed cell. The results showed that the simulation was stable and can be used to describe the reversibility of SAM conformation.

**Keywords :** self-assembled-monolayer, amino-alkanethiol, potential model, molecular simulation

### PENDAHULUAN

SAM (Self Assembled Monolayer) merupakan lapisan yang tersusun oleh beberapa molekul yang dibentuk dengan media adsorpsi aktif di permukaan yang padat. Teknik micro-patterning memungkinkan untuk mengendalikan sifat dan tekstur SAM di tingkat molekuler pada saat SAM diproduksi [1]. Sebuah model sederhana sel simulasi SAM secara atomistik dapat dikonstruksi untuk mempelajari reversibilitas dan kestabilan SAM menggunakan metode simulasi molekuler.

Pada penelitian Lahann, dkk, senyawa seperti asam (16-merkapt) heksadekanat (MHA) dapat diamobilisasi sebagai *self-assembled monolayer* (SAM) pada permukaan pendukung Au dan bersifat reversibel terhadap perubahan muatan yang diaplikasikan pada permukaan pendukung [2]. Meskipun demikian, belum ada informasi detail dan sistematis

pada tingkat mikroskopik mengenai mekanisme transisi konformasi SAM akibat aplikasi muatan eksternal tersebut. Informasi detail pada tingkat molekuler dapat diselidiki dengan metode simulasi dinamika molekuler. Metode ini memerlukan model sel simulasi yang dapat menggambarkan interaksi antar komponen, yaitu SAM dan permukaan pendukung.

## METODA PENELITIAN

### Model Potensial

Energi potensial sistem dimodelkan sebagai penjumlahan dari energi potensial antar pasangan:

$$\Phi = \sum \sum \phi_{ij}(\vec{r}_{ij})$$

Sedangkan interaksi antar pasangan atom atau molekul dinyatakan dengan penjumlahan dari energi potensial Lennard-Jones dan Coulomb [3]:

$$\phi_{ij} = 4\epsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} + k \frac{q_1 q_2}{r_{ij}}$$

Parameter potensial antar masing-masing atom dideskripsikan berdasarkan medan gaya OPLS-AA yang dijabarkan pada Tabel 1. [4]

**Tabel 1.** Parameter interaksi antar atom

Atom	$\sigma$ (Å)	$\epsilon$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	q (e)
C (CH <sub>2</sub> )	0.395	0.4937	0
S	0.3700	1.046	0
N (NH <sub>3</sub> )	0.3250	0.7113	+1.000
Cu	0.2085	4.769	-1.000
Cl	0.4417	0.4493	-1.000
C (Grafen)	0.3336	0.2092	0

### Simulasi Dinamika Molekuler

Simulasi Dinamika Molekuler dilakukan pada ansambel kanonikal *NVT*. Kondisi batas berulang diaplikasikan pada arah lateral yaitu paralel terhadap bidang permukaan Cu. Persamaan gerak diintegrasikan dengan algoritma *leap frog* dengan langkah waktu

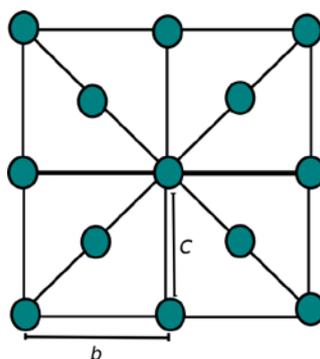
sebesar 2,0 fs dan temperatur sistem dikontrol dengan algoritma termostat Nose-Hoover. Tiap simulasi terdiri dari  $10^7$  langkah (20 ns) dan trayektori sistem direkam tiap 100 langkah waktu.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

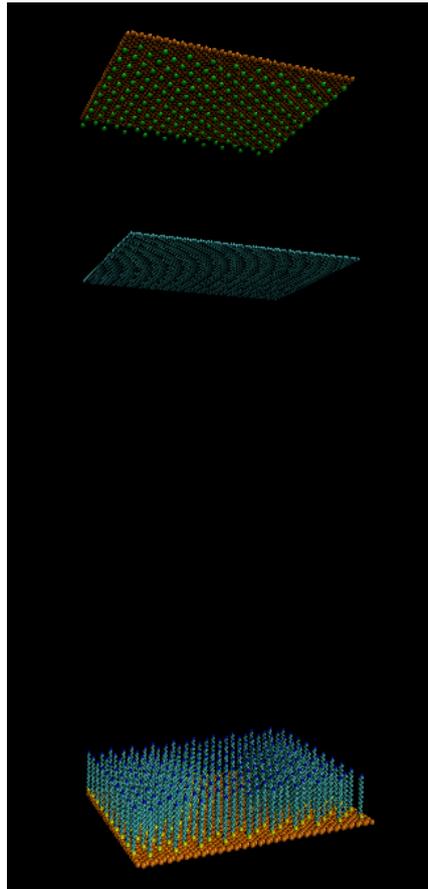
### Model sel simulasi

Senyawa amino alkanatiol (AAT) berpotensi sebagai komponen pembentuk SAM karena memiliki analogi struktur dan gugus fungsi yang sama seperti MHA. Ditinjau dari sudut pandang komputasi, penggunaan gugus amina relatif lebih sederhana karena gugus ini dapat dimodelkan sebagai *united-atom* yang berinteraksi dengan potensial Coulomb dan Lennard-Jones.

Konstruksi sel simulasi diawali dengan pembuatan konfigurasi dua bidang permukaan pendukung Cu dengan indeks miller (111) seperti yang ditunjukkan pada Gambar 1. Selanjutnya salah satu permukaan Cu dimodifikasi dengan penambahan amino alkanatiol (AAT) yang tersusun atas rantai karbon yang terdiri dari 16 atom C, dengan sudut antar ikatan  $109,5^\circ$ . Kedua ujung rantai karbon masing-masing diterminasi oleh gugus fungsi tiol and amina. Ion klorida sebagai *counter ion* terhadap amina terprotonasi diposisikan pada ruang terpisah dan dibatasi oleh grafen dan permukaan Cu. Muatan pada permukaan pendukung Cu diberikan secara eksplisit pada tiap atom, dan perubahan konformasi diamati melalui simulasi dinamika molekuler. Konfigurasi sel simulasi ditunjukkan pada Gambar 2.



**Gambar 1.** Konfigurasi permukaan Cu (111) dengan  $b = \frac{1}{2} a \sqrt{2}$ ,  $c = \frac{1}{2} a \sqrt{6}$ ,  
 $a$  = panjang unit sel pada kristal FCC Cu

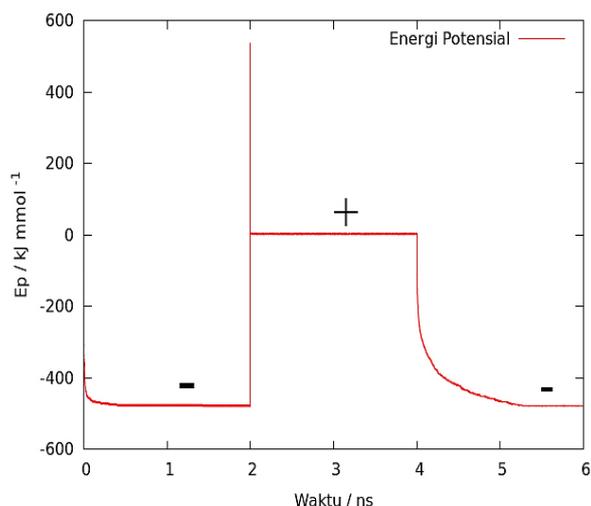


**Gambar 2.** Model sel simulasi

### **Simulasi Dinamika Molekuler AAT**

Simulasi dinamika molekuler dilakukan untuk menginvestigasi reversibilitas dari konformasi molekul penyusun AAT, atau konfigurasi permukaan SAM. Molekul AAT dapat mengalami penekukan saat permukaan pendukung Cu diberi muatan negatif, yaitu gugus amina terprotonasi tertarik ke permukaan dan memaksa permukaan karbon terekspos ke permukaan. Konformasi molekul AAT dapat dipulihkan dengan memberi muatan positif ke permukaan pendukung Cu.

Simulasi dinamika molekuler menunjukkan bahwa sistem bersifat stabil selama simulasi berlangsung dan perubahan konformasi AAT bersifat reversibel. Ketika permukaan pendukung Cu diberikan muatan negatif dan positif secara bergantian pada suatu interval waktu simulasi, sistem menunjukkan pola perubahan energi potensial yang reversibel seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3.



**Gambar 3.** Energi potensial sistem SAM dengan perubahan jenis muatan yang diaplikasikan pada permukaan logam pendukung.

## KESIMPULAN

Model sel simulasi *self-assembled* monolayer (SAM) yang tersusun dari molekul amino-alkanatiol (AAT) terprotonasi dapat dikonstruksi dan digunakan dalam metode simulasi molekuler. Molekul AAT diamobilisasi pada permukaan pendukung Cu, ketika Cu diberi muatan positif dan negatif secara bergantian, simulasi menunjukkan perubahan struktur molekul AAT tersebut bersifat reversibel dan sistem secara keseluruhan stabil ditinjau dari energi potensialnya.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Dr.Sc. Lukman Hakim dan Dr.Sc. Siti Mariyah Ulfa atas diskusi dan bimbingannya dalam penelitian ini.

## DAFTAR PUSTAKA

1. Aizenberg, J., dkk, 1998, **Controlling local disorder in self assembled monolayers by patterning the topography of their metallic supports**, *Nature*, 394, 868871.
2. Lahann, J., dkk, 2003, **A Reversibly Switching Surface**, *Science Journal*, 299, 371-374.
3. Saman, A., dan Woo, T.K., 2006, **How Much Carbon Dioxide Can be Stored in the Structure H Clathrate Hydrates?: A Molecular Dynamics Study**, *J. Phys. Chem*, 126, 044703.
4. Abraham M.J., D. van der Spoel, E. Lindahl, dan B. Hess, 2014, **Gromacs User Manual**, <http://www.gromacs.org> diakses, 13 September 2014.