

**ANALISIS TERMODINAMIK DAN STRUKTUR KRISTAL
NANOPARTIKEL EMAS DAN PERAK YANG DIBERI
PERLAKUAN PANAS**

SKRIPSI

Disusun untuk memenuhi persyaratan
memperoleh gelar Sarjana Sains



**Lydia Nurkumalawati
1306619018**

Intelligentia - Dignitas

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2025**

ABSTRAK

LYDIA NURKUMALAWATI. Analisis Termodinamik dan Struktur Kristal Nanopartikel Emas dan Perak yang diberi Perlakuan Panas. Dibawah Bimbingan RISER FAHDIRAN, ERFAN HANDOKO.

Penelitian tentang nanopartikel emas dan perak berkembang pesat karena aplikasinya dalam berbagai bidang, termasuk kesehatan. Dalam *nanomedicine*, *drug delivery*, dan nanobot, kedua nanopartikel ini digunakan karena sifatnya yang inert dan relatif aman. Simulasi dinamika molekuler dengan LAMMPS dilakukan untuk menganalisis perilaku termodinamik dan struktur kristal nanopartikel emas dan perak saat dipanaskan dari 300 K hingga 1,400 K. Setelah relaksasi awal pada 300 K dan 0 GPa selama 20 ps, hasil simulasi menunjukkan bahwa emas mengalami peningkatan suhu yang stabil hingga 1,400 K, sedangkan perak mencapai titik lelehnya pada 1,300 K dalam 20 ps. Analisis *Common Neighbor Analysis* (CNA) menggunakan OVITO mengungkap transformasi fase dari struktur FCC dominan ke bentuk lain. Nanopartikel emas menunjukkan stabilitas termal tinggi dengan perubahan struktur yang lebih terkontrol, sementara nanopartikel perak lebih rentan terhadap fluktuasi strukturnya, mengalami transformasi fase lebih cepat dan kurang stabil selama pemanasan.

Kata Kunci: Simulasi dinamika molekuler, LAMMPS, FCC, CNA, OVITO.

Intelligentia - Dignitas

ABSTRACT

LYDIA NURKUMALAWATI. Thermodynamic Analysis and Crystal Structure of Gold and Silver Nanoparticles Given Heat Treatment. Supervised of RISER FAHDIRAN, ERFAN HANDOKO.

Research on gold and silver nanoparticles has rapidly advanced due to their wide-ranging applications in fields such as optics, electronics, biology, catalysis, and medicine. In health-related applications, these nanoparticles are developed for nanomedicine, drug delivery, and nanobots, owing to their inert properties and relative safety at certain in vivo doses. Molecular dynamics simulations using LAMMPS were performed to investigate the thermodynamic behavior and crystalline structure of gold and silver nanoparticles when heated from 300 K to 1,400 K. The system was relaxed at 300 K and 0 GPa for 20 ps before heating. Simulation results indicate that gold nanoparticles exhibit a gradual and stable temperature increase up to 1,400 K, while silver nanoparticles reach their melting point at 1,300 K within 20 ps of heating. Common Neighbor Analysis (CNA) using OVITO revealed a phase transformation from the dominant FCC structure to other phases. Gold nanoparticles demonstrate high thermal stability, with a slow and steady increase in temperature and internal pressure, and a more controlled phase transformation marked by a gradual decrease in the FCC percentage. In contrast, silver nanoparticles exhibit lower thermal stability, with rapid and unstable increases in temperature and internal pressure, leading to significant fluctuations in their crystalline structure and a faster, less stable phase transformation.

Keywords: Molecular dynamics simulation, LAMMPS, FCC, CNA, OVITO.


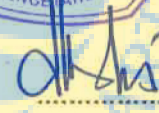
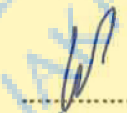

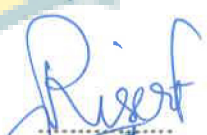
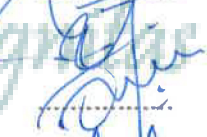

Intelligentia - Dignitas

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

ANALISIS TERMODINAMIK DAN STRUKTUR KRISTAL NANOPARTIKEL EMAS DAN PERAK YANG DIBERI PERLAKUAN PANAS

Nama : Lydia Nurkumalawati

No. Registrasi : 1306619018

| | Nama | Tanda Tangan | Tanggal |
|-------------------------------|---|---|----------|
| Penanggung Jawab | | | |
| Dekan | : Dr. Hadi Nasbey, S.Pd., M.Si. NIP. 19790916 200501 1 001 |  | |
| Wakil Penanggung Jawab | | | |
| Wakil Dekan I | : Dr. Meiliasari, S.Pd., M.Sc. NIP. 19790504 200912 2 002 |  | |
| Ketua | : Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si. NIP. 19820526 200812 1 001 |  | 17/02/25 |
| Sekretaris | : Haris Suhendar, S.Si., M.Sc. NIP. 19940203 202321 1 015 |  | 17/02/25 |
| Anggota | | | |
| Pembimbing I | : Riser Fahdiran, M.Si. NIP. 19830717 200912 1 008 |  | 17/02/25 |
| Pembimbing II | : Prof. Dr. Erfan Handoko, M.Si. NIP. 19730201 200312 1 002 |  | 17/02/25 |
| Penguji | : Ahmad Zatnika Purwalaksana, M.Si. NIP. 19940428 202203 1 006 |  | 18/02/25 |

Dinyatakan lulus ujian skripsi pada tanggal 12 Februari 2025.

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini, mahasiswa Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Jakarta :

Nama : Lydia Nurkumalawati

No. Registrasi : 1306619018

Program Studi : Fisika

Menyatakan bahwa skripsi yang saya buat dengan judul “**Analisis Termodinamik dan Struktur Kristal Nanopartikel Emas dan Perak yang diberi Perlakuan Panas**” adalah :

1. Dibuat dan diselesaikan oleh saya sendiri dengan arahan dosen Pembimbing dan berdasarkan data yang diperoleh dari hasil penelitian.
2. Sumber informasi yang termuat dalam karya dikutip dari penulis lain telah dicantumkan dalam Daftar Pustaka yang berada pada bagian akhir skripsi sesuai dengan kaidah penulisan ilmiah.

Pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya dan bersedia menanggung segala akibat yang timbul sesuai dengan perundang-undangan yang berlaku jika pernyataan yang saya buat tidak benar.

Jakarta, Februari 2025



Intelligentia - Dignitas
Lydia Nurkumalawati
NIM. 1306619018



KEMENTERIAN PENDIDIKAN TINGGI, SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
UPT PERPUSTAKAAN

Jalan Rawamangun Muka Jakarta 13220
Telepon/Faksimili: 021-4894221
Laman: lib.unj.ac.id

LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademika Universitas Negeri Jakarta, yang bertanda tangan di bawah ini, saya:

Nama : LYDIA NURKUMALAWATI
NIM : 1306619018
Fakultas/Prodi : FMIPA
Alamat email : 91.lydianur@gmail.com

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif atas karya ilmiah:

Skripsi Tesis Disertasi Lain-lain (.....)

yang berjudul :

ANALISIS TERMODINAMIK DAN STRUKTUR KRISTAL EMAS DAN PERAK YANG DIBERI
PERLAKUAN PANAS.

Dengan Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif ini UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta berhak menyimpan, mengalihmediakan, mengelolanya dalam bentuk pangkalan data (*database*), mendistribusikannya, dan menampilkan/mempublikasikannya di internet atau media lain secara *fulltext* untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan atau penerbit yang bersangkutan.

Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Jakarta, 25 FEBRUARI 2025

Penulis

(LYDIA NURKUMALAWATI)
nama dan tanda tangan

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah Subhanahu Wa Ta'ala berkat rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi berjudul **“Analisis Termodinamik dan Struktur Kristal Nanopartikel Emas dan Perak yang diberi Perlakuan Panas.”**

Penulis menyadari bahwa selama penyusunan skripsi ini, banyak mendapat bantuan dan bimbingan serta pengarahan dari berbagai pihak. Oleh karenanya, pada kesempatan ini penulis mengucapkan banyak terima kasih terutama kepada Bapak Riser Fahdiran, M.Si sebagai Dosen Pembimbing Akademik, sekaligus Dosen Pembimbing Pertama skripsi, dan kepada Bapak Prof. Dr. Erfan Handoko, M.Si selaku Dosen Pembimbing Kedua yang telah mengerahkan dan memberikan pengetahuan terhadap penelitian skripsi ini hingga selesai. Selanjutnya penulis mengucapkan terima kasih kepada Dr. Hadi Nasbey, S.Pd., M.Si selaku dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, juga kepada Dr. Meiliasari, S.Pd., M.Sc selaku Wakil Dekan I, serta Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si. selaku Koordinator Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Jakarta, yang telah memberikan bimbingan akademik selama proses perkuliahan di Universitas Negeri Jakarta. Tidak lupa penulis haturkan beribu-ribu terima kasih kepada kedua orang tua, keluarga, dan handai taulan yang telah memberikan dukungan dan semangat dalam menyelesaikan skripsi ini.

Tiada gading yang tak retak, demikian pula pada skripsi ini. Tentu masih jauh dari kata sempurna. Oleh karenanya, penulis menerima kritik dan saran yang bersifat membangun sehingga dapat menjadi acuan perbaikan pada penelitian yang akan datang. Besar harapan penulis semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi kita semua.

Jakarta, Februari 2025



Lydia Nurkumalawati

DAFTAR ISI

| | |
|--|------|
| LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI | i |
| SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI | ii |
| KATA PENGANTAR | iii |
| ABSTRAK | iv |
| ABSTRACT | v |
| DAFTAR ISI | vi |
| DAFTAR TABEL | viii |
| DAFTAR GAMBAR | ix |
| DAFTAR SINGKATAN | x |
| BAB I | 11 |
| A. Latar Belakang | 11 |
| B. Perumusan Masalah | 13 |
| C. Tujuan Penelitian | 13 |
| D. Manfaat Penelitian | 13 |
| BAB II | 15 |
| A. Nanopartikel Emas dan Perak | 15 |
| a. Nanopartikel Emas | 15 |
| b. Nanopartikel Perak | 16 |
| A. Perlakuan Panas (<i>Heat Treatment</i>) | 18 |
| a. <i>Hardening</i> | 18 |
| b. <i>Case Hardening</i> | 18 |
| c. <i>Quenching</i> | 19 |
| d. <i>Annealing</i> | 19 |
| e. <i>Tempering</i> | 19 |
| f. <i>Normalizing</i> | 20 |
| B. Simulasi Dinamika Molekuler | 20 |
| a. Potensial Interaksi antar Atom | 20 |
| b. Metode Simulasi DM | 21 |
| c. Termodinamik | 23 |
| d. Struktur Kristal | 23 |
| BAB III | 24 |

| | |
|-------------------------------------|----|
| A. Tempat dan Waktu Penelitian..... | 24 |
| A. Metode Penelitian..... | 24 |
| b. Alat dan Bahan..... | 24 |
| c. Prosedur Penelitian..... | 24 |
| d. Analisis Struktur Kristal..... | 25 |
| BAB IV..... | 26 |
| BAB V..... | 32 |
| A. Kesimpulan..... | 32 |
| B. Saran..... | 33 |
| DAFTAR PUSTAKA..... | 34 |
| DAFTAR LAMPIRAN..... | 36 |
| RIWAYAT HIDUP..... | 44 |



Intelligentia - Dignitas

DAFTAR TABEL

| | |
|---|----|
| Tabel 2. 1. Sifat Termal Emas..... | 16 |
| Tabel 2. 2. Sifat Termal Perak..... | 18 |
| Tabel 3. 1. Jadwal Kegiatan Penelitian..... | 24 |



Intelligentia - Dignitas

DAFTAR GAMBAR

| | |
|---|----|
| Gambar 2. 1. Satuan Sel Kristal Emas..... | 15 |
| Gambar 2. 2. Nanopartikel Emas. | 16 |
| Gambar 2. 3. Satuan Sel Kristal Perak..... | 17 |
| Gambar 2. 4. Nanopartikel Perak. | 17 |
| Gambar 4. 1. Perubahan Tekanan Nanopartikel Emas dan Perak..... | 26 |
| Gambar 4. 2. Perubahan Suhu Nanopartikel Emas dan Perak. | 27 |
| Gambar 4. 3. Struktur Kristal Nanopartikel Emas..... | 28 |
| Gambar 4. 4. Struktur Kristal Nanopartikel Perak. | 29 |
| Gambar 4. 5. Perubahan Struktur Kristal Nanopartikel Emas dan Perak. | 30 |



Intelligentia - Dignitas

DAFTAR SINGKATAN



| | |
|--------|---|
| CNA | : Common Neighbor Analysis |
| CPU | : Central Processing Unit |
| Dt | : Delta time |
| FCC | : Face-Centered Cubic |
| GPa | : Gigapascal |
| HCP | : Hexagonal Close-Pac |
| ICO | : Ikosahedralked |
| K | : Kelvin |
| LAMMPS | : Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator |
| MSD | : Mean Square Displacement |
| Ni | : Jumlah atom dalam bola lokal |
| Nm | : Nanometer |
| OS | : Operating System |
| OVITO | : Open Visualization Tool |
| RDF | : Radial Distribution Function |
| Ti | : Temperatur lokal |
| TM | : Temperature Melting. |

Intelligentia - Dignitas