

INTISARI

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER MEKANIKA KUANTUM/MEKANIKA MOLEKULER (DM MK/MM) PADA SIFAT STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI KARBON DIOKSIDA DALAM SISTEM NH₃-H₂O

**LA ODE MUHAMAD IQBAL
22/501369/PPA/06387**

Studi solvasi molekul CO₂ dalam pelarut air-amoniak telah dilakukan dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler (DM). Tujuan penelitian ini adalah mempelajari sifat struktur dan dinamika solvasi CO₂ dalam air-amoniak dengan metode MK/MM. Kotak simulasi dinamika molekuler MK/MM dibagi menjadi dua daerah perhitungan, yaitu daerah MK yang dihitung menggunakan mekanika kuantum dan daerah MM yang dihitung menggunakan metode mekanika molekuler. Daerah MK diperpanjang dan dibagi menjadi daerah *core* dan *layer*. Zona *core* diatur sebesar 0 Å, dan zona *layer* sebesar 0,2 Å. Wilayah MK dilakukan perhitungan menggunakan metode Hartree-Fock. Proses ekuilibrasi dilakukan dalam waktu 6,6 ps dan sampling data dilakukan hingga 20 ps. Sifat struktural molekul CO₂ tersolvasi dalam sistem air-amoniak dianalisis menggunakan RDF, ARD, CND, dan ADF. Sifat dinamika molekul CO₂ tersolvasi dalam sistem air-amoniak dianalisis menggunakan waktu tinggal ligan rata-rata.

Simulasi DM MK/MM terhadap sifat struktur molekul CO₂ dalam pelarut air-amoniak menunjukkan struktur yang fleksibel. Hal ini dibuktikan dengan nilai bilangan koordinasi yang bervariasi pada CO₂-air yaitu 9-22 dengan rata-rata 14,51. Pada solvasi CO₂-amoniak bilangan koordinasi berada pada kisaran 1-9 dengan rata-rata 3,39. Hasil analisis ARD menunjukkan molekul pelarut dalam sistem solvasi tidak tersebar secara merata, melainkan hanya di daerah tertentu saja. Waktu rata-rata ligan H₂O mensolvasi molekul CO₂ adalah 1,93 ps, sedangkan waktu rata-rata yang dibutuhkan oleh ligan amoniak untuk mensolvasi CO₂ adalah sebesar 1,39 ps. Data analisis ini memberi informasi bahwa dalam kurun waktu tertentu molekul H₂O lebih banyak mensolvasi CO₂ daripada molekul NH₃.

Kata Kunci: Solvasi, CO₂, *ab initio* MK/MM, air-amoniak

ABSTRACT

SIMULATION OF QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS MOLECULAR DYNAMICS (QM/MM MD) ON THE STRUCTURE AND DYNAMIC PROPERTIES OF CARBON DIOXIDE SOLVATION IN THE NH₃-H₂O SYSTEM

**LA ODE MUHAMAD IQBAL
22/501369/PPA/06387**

Solvation studies of CO₂ molecule in water-ammonia solvents have been carried out using molecular dynamics (MD) simulation. This research aims to study the structural and dynamic properties of CO₂ solvation in water-ammonia using the QM/MM method. The QM/MM molecular dynamics simulation box is divided into two calculation zones, namely the QM zone which is calculated using quantum mechanics, and the MM zone which is calculated using molecular mechanics methods. The QM zone is extended and divided into core and layer zones. The core zone is set at 0 Å, and the layer zone at 0.2 Å. The QM zone was calculated using the Hartree-Fock method. The equilibration process was carried out in 6.6 ps and data sampling was carried out up to 20 ps. The structural properties of solvated CO₂ molecules in the water-ammonia system were analyzed using RDF, ARD, CND, and ADF. The dynamic properties of solvated CO₂ molecules in the water-ammonia system were analyzed using the mean residence time.

QM/MM MD simulations of the structural properties of the CO₂ molecule in a water-ammonia system show a flexible structure. This is proven by the varying coordination number values for CO₂-water, namely 9-22 with an average of 14.51. In CO₂-ammonia solvation the coordination number is in the range 1-9 with an average of 3.39. The results of the ARD analysis show that the solvent molecules in the solvation system are not distributed evenly but only in certain areas. The average time for H₂O ligands to solvate CO₂ molecule is 1.93 ps, while the average time required for ammonia ligands to solvate CO₂ is 1.39 ps. This analysis data provides information that, in a certain period of time H₂O molecules solvate more CO₂ than NH₃ molecules.

Keywords: Solvation, CO₂, ab initio QM/MM, water-ammonia.