

STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI Ba²⁺ DALAM AIR: STUDI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER MP2-DKH2/MM

Seruni Gita Anjani
20/462248/PA/20220

INTISARI

Penelitian struktur dan dinamika solvasi Ba²⁺ dalam air menggunakan simulasi dinamika molekuler MP2-DKH2/MM telah dilakukan. Tujuan penelitian ini adalah melakukan kajian teoritis pembentukan kompleks [Ba(H₂O)_n]^{x+} dan kestabilannya dalam larutan berair serta mempelajari sifat struktur dan dinamika solvasi ion Ba²⁺ dalam air menggunakan simulasi MP2-DKH2/MM-MD. Analisis trajektori dilakukan untuk mempelajari sifat struktur dan dinamika solvasi ion Ba²⁺ antara lain fungsi distribusi radial (RDF), distribusi bilangan koordinasi (CND), fungsi distribusi sudut (ADF), *local density corrected three-body distribution function*, waktu tinggal rata-rata ligan (MRT), dan vibrasi ulur Ba²⁺-H₂O.

Simulasi dinamika molekul MP2-DKH2/MM menggunakan metode *ab-initio* MP2. Himpunan basis *triple zeta* diberlakukan untuk ion Ba²⁺ dan himpunan basis 6-31G** untuk molekul air. Metode DKH2 digunakan untuk menghitung koreksi efek relativistik untuk ion Ba²⁺. Ekuilibrisasi sistem dilakukan selama 10 ps dan dilakukan *sampling* data selama 200 ps. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa kulit solvasi pertama bersifat fleksibel dengan molekul H₂O yang terikat terdapat 4 hingga 8 ligan dan waktu tinggal ligan yang cukup singkat sebesar 5,28 ps. Bilangan koordinasi dengan probabilitas tinggi yang diperoleh penelitian ini membentuk kompleks [Ba(H₂O)₆]²⁺ yang tertata dalam geometri *trigonal antiprism* (TAP) dan kompleks [Ba(H₂O)₇]²⁺ dengan geometri *monocapped trigonal antiprism* (MTAP) yang terdapat 6 hingga 7 molekul H₂O. Sudut ikatan yang diperoleh sebesar 77,09° dan 139,64° pada jarak 2,80 Å. Kulit solvasi kedua bersifat lebih labil yang dibuktikan dengan waktu tinggal rata-rata ligan yang sangat singkat sebesar 2,78 ps.

Kata kunci: Ba²⁺, MP2-DKH2/MM, relativistik, solvasi.

STRUCTURE AND DYNAMICS OF Ba²⁺ SOLVATION IN WATER: AN MP2-DKH2/MM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY

Seruni Gita Anjani
20/462248/PA/20220

ABSTRACT

Research on the structure and dynamics of Ba²⁺ solvation in water using MP2-DKH2/MM molecular dynamics simulation has been conducted. The purpose of this study is to conduct theoretical studies of complex formation [Ba(H₂O)_n]^{x+} and its stability in aqueous solution and study the structural properties and dynamics of Ba²⁺ ion solvation in water using MP2-DKH2/MM-MD simulation. Trajectory analysis was performed to study the structural properties and solvation dynamics of Ba²⁺ ions, including radial distribution functions (RDF), coordination number distribution (CND), angular distribution function (ADF), local density corrected three-body distribution function, ligand mean residence time (MRT), and Ba²⁺-H₂O extended vibration.

MP2-DKH2/MM molecular dynamics simulation using ab-initio MP2 method. The base set of triple zeta is applied to the ion Ba²⁺ and 6-31G** for the water molecule. The DKH2 method is used to calculate the correction of relativistic effects for Ba²⁺ ions. System equilibration was carried out for 10 ps and data sampling for 200 ps. The results of this study showed that the first solvation shell was flexible with bound H₂O molecules to 4 to 8 ligands and a fairly short ligand residence time of 5.28 ps. The coordination number with high probability obtained by this study forms a complex [Ba(H₂O)₆]²⁺ arranged in trigonal antiprism (TAP) geometry and complex [Ba(H₂O)₇]²⁺ with monocapped trigonal antiprism (MTAP) geometry containing 6 to 7 H₂O molecules. The bond angles obtained are 77.09° and 139.64° at a distance of 2.80 Å. The second solvation skin is more labile as evidenced by a very short average ligand residence time of 2.78 ps.

Keyword: Ba²⁺, MP2-DKH2/MM, relativistic, solvation.