

STRUKTUR DAN DINAMIKA HgCl₂ DALAM AIR: KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR HIBRID GAYA MEKANIKA KUANTUM/MEKANIKA MOLEKULAR

Muhammad Cahyo Palwawiguna

20/459316/PA/19977

INTISARI

Penelitian mengenai struktur dan dinamika solvasi HgCl₂ dalam air menggunakan simulasi dinamika molekular MP2/MM telah dilakukan. Tujuan penelitian ini adalah melakukan kajian teoritis sifat struktur dan dinamika solvasi HgCl₂ dalam air menggunakan simulasi MP2/MM MD. Analisis trajektori dilakukan untuk mempelajari sifat struktur dan dinamika solvasi HgCl₂ antara lain fungsi distribusi radial (RDF), distribusi bilangan koordinasi (CND), distribusi angular-radial (ARD), fungsi distribusi sudut (ADF), dan waktu rata-rata ligan (MRT).

Simulasi dinamika molekul MP2/MM menggunakan metode *ab initio* MP2. Himpunan basis Stuttgart RLC diberlakukan untuk molekul HgCl₂ dan himpunan basis 6-31G** untuk molekul air. Metode MP2 digunakan untuk menghitung efek korelasi antar elektron dalam molekul HgCl₂. Ekuilibrisasi sistem dilakukan hingga suhu 298,15 K dan dilakukan *sampling* data selama 30 ps. Hasil menunjukkan bahwa HgCl₂ hanya memiliki satu kulit solvasi yang fleksibel dengan terdapat 1 hingga 7 ligan molekul H₂O yang berinteraksi dengan atom pusat HgCl₂. Bilangan koordinasi dengan probabilitas paling tinggi diperoleh membentuk interaksi 3 dan 4 molekul H₂O dengan sudut O-Hg-O dan O-Hg-Cl berturut-turut sebesar 78,54° pada 94,50°, sehingga menghasilkan struktur ikatan Hg-Cl pada posisi aksial dan interaksi Hg-O pada posisi ekuatorial. Waktu tinggal ligan cukup singkat sebesar 1,84 ps.

Kata kunci: dinamika solvasi, HgCl₂, dan simulasi dinamika molekular, QM/MM

STRUCTURE AND DYNAMICS OF HgCl₂ IN WATER: A STUDY MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION QUANTUM MECHANIC/MOLECULAR MECHANIC HYBRID FORCE

Muhammad Cahyo Palwawiguna

20/459316/PA/19977

ABSTRACT

Research on the structure and dynamics of HgCl₂ solvation in water using MP2/MM has been carried out. The aim of this research is to conduct a theoretical study of the structural and dynamics properties of HgCl₂ solvation in water using the MP2/MM MD simulation. Trajectory analysis was carried out to study the structural properties and dynamics of HgCl₂ solvation, including the radial distribution function (RDF), coordination number distribution (CND), angular-radial distribution (ARD), angular distribution function (ADF), and the average residence time of the ligand (MRT).

MP2/MM molecular dynamics simulation used the MP2 ab initio method. The Stuttgart RLC basis set is applied to the HgCl₂ molecule and the 6-31G** basis set applied to the water molecule. The MP2 method is used to calculate the effect of relativistic corrections for the HgCl₂ molecule. System equilibration was carried out to a temperature of 298.15 K and data sampling process for 30 ps. The results show that HgCl₂ has only one flexible solvation shell with 1 to 7 ligands of H₂O molecules interacting with the central atom of HgCl₂. The coordination numbers with the highest probability are obtained to form interactions of 3 and 4 H₂O molecules with O-Hg-O and O-Hg-Cl angles of 78.54° and 94.50°, respectively, resulting in a Hg-Cl bond structure in the axial position and Hg-O interactions in the equatorial position. The ligand residence time is quite short at 1.84 ps.

Keywords: HgCl₂, molecular dynamic simulation, dan solvation dynamic, QM/MM