

STRUKTUR HIDRASI DAN DINAMIKA ION Ga³⁺ DALAM PELARUT AIR : SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD (QMCF)

Fadhiah Sarita Rustam
23/527030/PPA/06674

INTISARI

Struktur hidrasi dan sifat dinamika ion Ga³⁺ dalam pelarut air pada 298,15 K telah dikaji menggunakan simulasi dinamika molekular *quantum mechanical charge field* (DM QMCF). Simulasi ini dilakukan dengan memfokuskan pada sifat struktural dan dinamika hidrasi ion Ga³⁺ dalam pelarut air model *rigid body* atau kaku dengan sudut antara atom hidrogen dan oksigen tetap, panjang ikatan O-H tetap dan molekul air tidak bergetar atau berubah bentuk, hanya bergerak dan berputar sebagai satu kesatuan. Metode simulasi DM QMCF memiliki dua daerah simulasi, yaitu daerah mekanika kuantum (QM) dan mekanika molekul (MM). Daerah QM diperpanjang dan dibagi menjadi daerah inti yang terdiri dari ion Ga³⁺ sebagai atom pusat (QM_{core}) dan daerah *layer* yang terdiri dari H₂O sebagai pelarut (QM_{layer}). Metode Hartree-Fock (HF) dengan himpunan basis DZP untuk air dan himpunan basis SBKJC-VDZ untuk Ga digunakan untuk menghitung energi dan gaya partikel di daerah QM. Validasi metode dilakukan dengan menghitung nilai *basis set superposition error* (BSSE). Pengambilan data trajektori dilakukan setelah ekuilibrisasi kemudian dianalisis untuk mempelajari struktur dan dinamika hidrasi Ga³⁺ dalam air.

Sistem ion Ga³⁺ dalam air membentuk kompleks oktahedral [Ga(H₂O)₆]³⁺ yang stabil tanpa ada perpindahan ligan H₂O di kulit hidrasi pertama selama proses simulasi berlangsung. Jarak Ga³⁺-H₂O sebesar 1,95 Å. Pada sistem ion Ga³⁺ dalam air membentuk kompleks berkoordinasi 6 dengan probabilitas 100% pada kulit hidrasi pertama. Waktu tinggal rata-rata ligan kulit hidrasi pertama tidak dapat ditentukan dengan 0 kali pertukaran ligan yang sukses. Waktu tinggal rata-rata ligan 4,83 ps dengan 82 kali pertukaran ligan yang menunjukkan proses pertukaran ligan H₂O yang sangat cepat pada kulit hidrasi kedua. Struktur kulit hidrasi pertama dari hasil simulasi menunjukkan kemiripan dengan hasil eksperimen.

Kata kunci: Dinamika Molekular, Ga³⁺, H₂O, QMCF, Hidrasi

HYDRATION STRUCTURE AND DYNAMICAL PROPERTIES OF Ga³⁺ ION IN WATER: QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD (QMCF) MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Fadhiah Sarita Rustam
23/527030/PPA/06674

ABSTRACT

The hydration structure and dynamical properties of the Ga³⁺ ion in aqueous solution at 298.15 K were investigated via quantum mechanical charge field molecular dynamics (QMCF MD) simulation. This simulation was carried out to study the dynamical properties of Ga³⁺ in water using a rigid body model where the angle between hydrogen and oxygen atoms remains fixed, the O-H bond length is constant, and the water molecules do not vibrate or change shape, but only translate and rotate as a single unit. The QMCF MD method employs two simulation regions: quantum mechanics (QM) and molecular mechanics (MM). The QM region was extended and divided into core and layer areas. The QM region is extended and divided into a core region consisting of Ga³⁺ ion as the central atom (*QM_{core}*), and a layer region consisting of H₂O molecules as the solvent (*QM_{layer}*).

The Hartree–Fock (HF) method was applied for both the core and layer regions, using the DZP-Dunning basis set for water molecules and the SBKJC-VDZ basis set for Ga. The method was validated by calculating the basis set superposition error (BSSE) energy. After equilibration, simulation trajectories were collected and further analyzed to examine the structure and hydration dynamics of Ga³⁺ in water.

The Ga³⁺ ion in aqueous solution formed a stable octahedral complex, [Ga(H₂O)₆]³⁺, with no ligand exchange in the first hydration shell during the simulation. The Ga³⁺–H₂O distance was found to be 1.950 Å. In the first hydration shell, Ga³⁺ coordinated exclusively with six water molecules with 100% probability. The first hydration shell exhibited no ligand exchange, and mean residence time could not be determined. In contrast, the second hydration shell had a mean residence time of 4.83 ps with 82 H₂O ligand exchange events, indicating a rapid exchange process. The obtained first-shell hydration structure showed excellent agreement with experimental data.

Keywords: : Ga³⁺, H₂O, Molecular Dynamics, QMCF, Hydration