UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian Struktur dan Dinamika Hidrasi Ion Np4+ Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler HF-DKH2/MM
Shaffa Dalih Zulihasmi, Drs. Iqmal Tahir, M.Si.; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

KAJIAN STRUKTUR DAN DINAMIKA HIDRASI ION Np^{4+} MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER HF-DKH2/MM

Shaffa Dalih Zulihasmi
22/499499/PA/21540

INTISARI

Penelitian struktur dan dinamika hidrasi ion Np^{4+} menggunakan simulasi dinamika molekuler MM dan HF-DKH2/MM telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan mengkaji struktur dan dinamika hidrasi ion Np^{4+} serta membandingkan kemampuan kedua metode simulasi dalam merepresentasikan sifat hidrasi ion Np^{4+}. Analisis trajektori dilakukan melalui analisis fungsi distribusi radial, distribusi bilangan koordinasi, fungsi distribusi sudut, *local density corrected three-body distribution function*, muatan parsial Mulliken, waktu tinggal rata-rata ligan, dan vibrasi ulur.

Simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM menggunakan metode *ab initio* Hartree-Fock. Himpunan basis relativistik SARC-DKH-TZVP diberlakukan untuk Np^{4+} dan 6-31G* untuk H_2O. Koreksi efek relativistik untuk ion Np^{4+} dihitung menggunakan metode DKH2. Ekuilibrasi sistem dilakukan selama 10 ps kemudian dilanjutkan dengan *sampling* data selama 800 ps untuk simulasi dinamika molekuler MM dan 22 ps untuk HF-DKH2/MM. Hasil penelitian menunjukkan bahwa ion Np^{4+} membentuk tiga kulit hidrasi pada kedua metode. Kulit hidrasi pertama simulasi HF-DKH2/MM menunjukkan sifat *rigid* dengan bilangan koordinasi 9, yang membentuk kompleks stabil $[Np(H_2O)_9]^{4+}$ bergeometri *Gyroelongated Square Antiprism* dengan sudut ikatan sebesar 70,43° dan 136,57° pada jarak 2,45 Å. Kulit pertama simulasi dinamika molekuler MM menunjukkan sifat yang *rigid*, menghasilkan bilangan koordinasi 12 dengan sudut ikatan sebesar 63,42°, 116,35°, dan 176,52° pada jarak Np^{4+}–O sebesar 2,65 Å, dan geometri yang tidak teridentifikasi. Kulit hidrasi kedua dan ketiga kedua metode bersifat labil ditandai dengan MRT yang menurun dari 100,75 ps menjadi 3,77 ps pada simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM dan dari 8,57 ps menjadi 3,24 ps pada simulasi dinamika molekuler MM.

Kata kunci: dinamika molekuler, HF-DKH2/MM, hidrasi, Np^{4+}, mekanika molekuler.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian Struktur dan Dinamika Hidrasi Ion Np4+ Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler HF-DKH2/MM
Shaffa Dalih Zulihasmi, Drs. Iqmal Tahir, M.Si.; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

STUDY OF THE STRUCTURE AND DYNAMICS OF Np^{4+} ION HYDRATION USING HF-DKH2/MM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Shaffa Dalih Zulihasmi
22/499499/PA/21540

ABSTRACT

A study of the structure and hydration dynamics of the Np^{4+} ion using MM and HF-DKH2/MM molecular dynamics simulations has been conducted. This study aims to examine the structure and hydration dynamics of the Np^{4+} ion and to compare the ability of the two simulation methods to represent the hydration properties of the Np^{4+} ion. Trajectory analysis was performed using the radial distribution function, coordination number distribution, angular distribution function, local density-corrected three-body distribution function, Mulliken partial charges, average ligand residence time, and stretching vibrations.

Molecular dynamics simulations of HF-DKH2/MM were performed using the ab initio Hartree-Fock method. The relativistic SARC-DKH-TZVP basis set was applied for Np^{4+} and the 6-31G* basis set for H_2O. Relativistic corrections for the Np^{4+} ion were calculated using the DKH2 method. The system was equilibrated for 10 ps, followed by data sampling for 800 ps for the MM molecular dynamics simulation and 22 ps for the HF-DKH2/MM simulation. The results show that the Np^{4+} ion forms three hydration shells in both methods. The first hydration shell in the HF-DKH2/MM simulation exhibits rigid behavior with a coordination number of 9, forming a stable $[Np(H_2O)_9]^{4+}$ complex with a gyroelongated square antiprism geometry, featuring bond angles of 70.43° and 136.57° at a distance of 2.45 Å. The first layer in the MM molecular dynamics simulation exhibits rigid behavior, resulting in a coordination number of 12 with bond angles of 63.42°, 116.35°, and 176.52° at a Np^{4+}–O distance of 2.65 Å, and an unidentified geometry. The second and third hydration shells for both methods were unstable, as indicated by a decrease in MRT from 100.75 ps to 3.77 ps in the HF-DKH2/MM molecular dynamics simulation imulation and from 8.57 ps to 3.24 ps in the MM molecular dynamics simulation.

Keywords: molecular dynamics, HF-DKH2/MM, hydration, Np^{4+}, molecular mechanics.