

INTISARI

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER *ACTINIUM III*) DALAM AIR DENGAN PENDEKATAN *HYBRID* GAYA *AB INITIO QM/MM*

Oleh
Muhammad Saleh
11/326526/PPA/03740

Sebuah simulasi dinamika molekuler dengan pendekatan gaya *hybrid ab initio QM/MM* telah digunakan untuk menginvestigasi struktur dan dinamika ion Ac^{3+} dalam air. Potensial *2-body* terkoreksi *3-body* digunakan dalam perhitungan untuk melihat fleksibilitas struktur kompleks dibandingkan dengan potensial *2-body*. Aspek struktural dari kompleks yang terbentuk dianalisis menggunakan variasi metode seperti analisis *Radial Distribution Function (RDF)*, *Coordination Number Density (CND)*, and *Angular Distribution Function (ADF)*. Untuk aspek dinamika, digunakan analisis Fungsi Jarak interaksi ion-ligan sebagai alat perhitungan. Karena tidak adanya data eksperimental untuk interaksi aktinida dalam larutan, maka hasil perhitungan ini dibandingkan dengan data-data eksperimental, serta data teoritis untuk unsur-unsur aktinida dan beberapa unsur lantanida. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa terbentuk sebuah struktur yang fleksibel ketika potensial *3-body* digunakan ke dalam perhitungan dengan variasi bilangan koordinasi sebesar 9 dan 10 serta memiliki jarak rata-rata 2,57 Å yang mana hasil ini cukup mendekati data-data eksperimental untuk unsur aktinida maupun lantanida.

Kata kunci: *QM/MM*, solvasi, Ac^{3+}

ABSTRACT

*MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF ACTINIUM(III) IN WATER : AN
HYBRID AB INITIO QM/MM FORCES APPROACH*

By

Muhammad Saleh

11/326526/PPA/03740

A molecular dynamics simulation using ab initio hybrid QM/MM forces has been performed to investigate structure and dynamics of Ac^{3+} ion in water. 3-body corrected 2-body potentials was included in the calculations to compare the flexibility of complex structure's than 2-body potential. The structural aspects of complexes in solutions were analyzed using various methods such as Radial Distribution Function (RDF), Coordination Number Density (CND), and Angular Distribution Function (ADF). For the dynamics aspects, the ion –ligands distance interactions functions were employed. Due to the limitation of experimental result for interaction actinium in aqueous solution, this calculation result were compared with experimental and theoretical results for actinide and several lanthanide elements. The result showed a flexible structure when 3-body potentials was include in calculation with 9 and 10 coordination number and 2,57 Å average distances in which it was agree well with experimental data.

Key words: QM/MM, solvation, Ac^{3+}