

KARAKTERISASI STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI ION STRONSIUM(II) DALAM AMONIAK CAIR: SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD (QMCF)

Ika Nur Fitriani
14/372707/PPA/04738

INTISARI

Solvasi ion stronsium dalam amoniak cair telah dilakukan dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler *quantum mechanical charge field* (QMCF) untuk mendapatkan sifat struktur dan dinamika. Metode simulasi dinamika molekuler QMCF membagi daerah simulasi menjadi dua bagian yaitu daerah mekanika kuantum (MK) dan mekanika molekuler (MM). Perhitungan Hartree-Fock digunakan untuk daerah MK dengan basis set DZP-dunning untuk amoniak dan basis set SV(P) untuk Sr. Validasi metode *ab initio* HF/SV(P) dan DZP-dunning dilakukan dengan menghitung nilai *basis set superposition error* (BSSE). Pengambilan data trajektori setiap 5 tahapan selama 14 ps dilakukan setelah ekuilibrasi 4 ps pada suhu 235,15 K. Data trajektori yang dihasilkan selama 14 ps kemudian dianalisis lebih lanjut untuk mempelajari struktur dan dinamika solvasi Sr^{2+} dalam amoniak cair.

Hasil penelitian dari analisis fungsi distribusi radial menunjukkan kemungkinan terbesar menemukan amoniak berada pada jarak 2,78 Å. Kulit solvasi pertama bersifat labil dengan struktur solvasi 7 molekul amoniak dengan bentuk geometri *monocapped* trigonal prisma, 8 molekul amoniak dengan geometri *square antiprism*, dan 9 molekul amoniak dengan bentuk geometri *tricapped* trigonal prisma. Waktu tinggal rata-rata ligan kulit solvasi pertama 18,49 ps dengan 6 kali pertukaran ligan yang sukses. Waktu tinggal rata-rata ligan kulit solvasi kedua yaitu 1,88 ps menunjukkan terjadi proses pertukaran ligan dalam waktu yang sangat cepat. Struktur kulit solvasi pertama dari hasil simulasi menunjukkan kedekatan data dengan hasil eksperimen dari XRD.

Kata kunci: amoniak cair, ion Sr^{2+} , QMCF, simulasi dinamika molekuler, solvasi

***STRUCTURE AND DYNAMICS CHARACTERIZATION OF STRONTIUM(II)
ION IN LIQUID AMMONIA: A QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD
(QMCF) MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY***

Ika Nur Fitriani
14/372707/PPA/04738

ABSTRACT

A quantum mechanical charge field (QMCF) molecular dynamics (MD) simulation of Sr(II) ion in liquid ammonia was carried out in order to gain insight into its solvation behavior, for both structural and dynamics properties. The QMCF-MD method is a framework based on partitioning scheme, which effectively divide the system of study into two region, a quantum mechanics (QM) and molecular mechanics (MM). Hartree–Fock level was used for the core and layer region with the DZP-dunning basis set for ammonia and SV(P) basis set for Sr. *Ab initio* HF/SV(P) and DZP Dunning method was validated by calculating BSSE energy. The simulation trajectory was collected every fifth step for 14 ps after 4 ps of equilibration at 235.15 K.

The radial distribution function showed the maximum probability of the Sr-N bond length at 2.78 Å. A monocapped trigonal prismatic of seven ammonia molecules, a square antiprism structure composed of eight ammonia molecules, and a tricapped trigonal prismatic of nine ammonia molecules surrounding strontium(II) ion were obtained from the QMCF simulation including trajectory analysis exhibiting a rather labile first solvation shell. First solvation shell showing mean residence times of 18.49 ps with six ligand exchange. Mean residence time of 1.88 ps was observed to the second solvation shell indicating too fast exchanges process in the solvation shell. The obtained structure of the first solvation shell are in excellent agreement with experiments.

Keywords: liquid ammonia, Sr^{2+} ion, QMCF, MD simulation, solvation