

## INTISARI

### **STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI ION NATRIUM DALAM AMONIA CAIR MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL QMCF (*QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD*)**

Oleh

YONATAN EDEN  
13/355649/PPA/04367

Simulasi dinamika molekul *quantum mechanical charge field* (QMCF) telah digunakan untuk mempelajari struktur dan dinamika solvasi ion natrium dalam amonia. Metode dinamika molekul QMCF membagi daerah simulasi menjadi dua. Daerah pertama terdapat ion natrium dan molekul-molekul amonia pada kulit solvasi pertama dan kedua. Daerah tersebut dihitung dengan mekanika kuantum. Daerah kedua adalah daerah di luar daerah pertama. Daerah ini dihitung dengan mekanika molekul. Pengumpulan data dilakukan per 5 langkah selama waktu simulasi 12 ps. Temperatur dibuat konstan pada 235,15 K.

Struktur solvasi ion natrium dalam amonia cair memiliki dua bentuk dominan yang tersusun dari 6 dan 5 molekul amonia yaitu oktahedral (48,84%) dan piramida segiempat (42,20%). Kulit solvasi pertama dan kedua memiliki sifat yang labil. Lama waktu tinggal rata-rata amonia pada kulit solvasi pertama dan kedua berturut-turut adalah 3,89 ps dan 2,03 ps. Hasil simulasi memiliki kesamaan yang baik dengan data eksperimen yang ada.

Kata kunci: solvasi, Natrium, amonia, QMCF, simulasi dinamika molekul.

## ABSTRACT

### STRUCTURE AND DYNAMICS OF SOLVATED SODIUM ION IN LIQUID AMMONIA USING QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD (QMCF) MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

by

YONATAN EDEN  
13/355649/PPA/04367

The quantum mechanical charge field molecular dynamics (QMCF MD) simulation has been applied to investigate the solvation structure and dynamics of sodium ion in liquid ammonia. The QMCF MD method divides the chemical system into two regions. The first region is treated by quantum mechanics, consists of a sodium ion and ammonia molecules in the first and second solvation shells. The second region is the outside of first region which treated by molecular mechanics. The sampling data was collected every fifth step during simulation time of 12 ps and temperature was kept constant at 235.15 K.

The solvation of sodium ion in liquid ammonia shows two dominant structure, an octahedron of six ammonia molecules 48.84% and square pyramid of five ammonia molecules 42.20%. The first and second solvation shell form unstable structure. Mean residence time of ammonia molecules in the first and second solvation shell was 3.89 ps and 2.03 ps. The simulation result has a good agreement with the experiments.

Keywords: solvation, sodium, ammonia, QMCF, molecular dynamics simulation.