

**SOLVASI PREFERENSIAL DAN SIFAT DINAMIKA ION  $\text{Cu}^+$   
DALAM LARUTAN AMONIAK 18,6% : STUDI SIMULASI  
DINAMIKA MOLEKULER AB INITIO QUANTUM  
MECHANICAL CHARGE FIELD (QMCF)**

Wahyu Dita Saputri  
15/391207/PPA/05008

**INTISARI**

Solvasi preferensial dan sifat dinamika ion  $\text{Cu}^+$  telah dipelajari menggunakan metode simulasi dinamika molekuler QMCF (DM-QMCF). Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari sifat dinamika dan solvasi preferensial ion  $\text{Cu}^+$  terhadap ligan  $\text{NH}_3$  dan  $\text{H}_2\text{O}$  dalam larutan amoniak 18,6%. Metode DM-QMCF membagi dua daerah simulasi, yaitu daerah mekanika kuantum (MK) dan mekanika molekuler (MM). Daerah MK diperpanjang dan dibagi menjadi daerah inti (*core*) dan daerah *layer*. Metode perhitungan pada tingkat Hartree-Fock (HF) digunakan pada daerah MK, dengan himpunan basis yang digunakan yaitu LANL2DZ-ECP untuk ion  $\text{Cu}^+$  dan DZP-Dunning untuk ligan  $\text{NH}_3$  dan  $\text{H}_2\text{O}$ . Validasi metode HF/LANL2DZ-ECP dan DZP-Dunning dilakukan dengan menghitung nilai *basis set superposition error* (BSSE). Sistem kotak simulasi diekuilibrasi pada suhu 298,15 K selama 4 ps. Pengambilan data dilakukan setelah proses ekulibrasi setiap 5 tahapan selama 12 ps. Data trajektori dianalisis lebih lanjut untuk mempelajari solvasi preferensial dan sifat dinamika ion  $\text{Cu}^+$  dalam larutan amoniak 18,6%

Hasil analisis trajektori menunjukkan bahwa preferensial ligan  $\text{NH}_3$  lebih tinggi dibandingkan  $\text{H}_2\text{O}$  di kulit solvasi pertama. Hal ini ditandai dengan adanya dominasi 4 ligan  $\text{NH}_3$  dan membentuk kompleks stabil  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^+$  dengan bentuk geometri tetrahedral. Analisis fungsi distribusi radial menunjukkan probabilitas tertinggi menemukan molekul  $\text{NH}_3$  berada pada jarak 2,19 Å. Hasil analisis solvasi preferensial ion  $\text{Cu}^+$  di kulit solvasi pertama ini menunjukkan kedekatan data dengan hasil eksperimen. Berbeda dengan  $\text{NH}_3$ , ligan  $\text{H}_2\text{O}$  tidak ditemukan di kulit solvasi pertama. Ligan  $\text{H}_2\text{O}$  hanya ditemukan di kulit solvasi kedua dengan jumlah yang besar dan sifat labilitasnya tinggi. Waktu tinggal rata-rata (MRT) ligan  $\text{H}_2\text{O}$  dan  $\text{NH}_3$  di kulit solvasi kedua adalah masing-masing sebesar 3,13 ps dan 2,57 ps. Data MRT ini menunjukkan bahwa terdapat proses pertukaran ligan dalam waktu yang sangat cepat.

Kata kunci: larutan amoniak 18,6%, ion  $\text{Cu}^+$ , DM-QMCF, preferensial

## **PREFERENTIAL SOLVATION AND DYNAMICAL PROPERTIES OF $\text{Cu}^+$ ION IN 18,6% AQUEOUS AMMONIA SOLUTION : AB INITIO QUANTUM MECHANICAL CHARGE FIELD (QMCF) MOLECULAR DYNAMICS STUDY**

Wahyu Dita Saputri  
15/391207/PPA/05008

### **ABSTRACT**

Preferential solvation and dynamical properties of  $\text{Cu}^+$  ion have been studied using quantum mechanical charge field molecular dynamics (QMCF-MD) simulation. This study aimed to gain insight into preferential solvation of  $\text{Cu}^+$  ion to the  $\text{NH}_3$  and  $\text{H}_2\text{O}$  ligand in a 18.6% aqueous ammonia solution. The QMCF-MD method divides the system into two regions, which were quantum mechanics (QM) and molecular mechanics (MM) region. QM region was extended and divided into core and layer region. Hartree-Fock (HF) level was performed in QM region with LANL2DZ-ECP basis set for  $\text{Cu}^+$  ion and DZP-Dunning for  $\text{NH}_3$  and  $\text{H}_2\text{O}$  molecule. Ab initio HF/LANL2DZ-ECP and DZP-Dunning were validated by calculating *basis set superposition error* (BSSE) with MP2 level of theory calculation. Simulation system was equilibrated at 298,15 K for 4 ps. Sampling data was collected every fifth step during simulation time of 12 ps. Simulation trajectories were analyzed further to investigate preferential solvation and dynamical properties of  $\text{Cu}^+$  ion in 18,6% aqueous ammonia solution

The trajectory analysis showed the preferential of  $\text{NH}_3$  ligand was higher than  $\text{H}_2\text{O}$  ligand in the first solvation shell. Four  $\text{NH}_3$  molecules dominated and formed  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^+$  complex with tetrahedral geometry. The radial distribution function showed the maximum probability of the  $\text{Cu}^+-\text{NH}_3$  bond length at 2,19 Å in the first solvation shell. It was different with preferential of  $\text{H}_2\text{O}$  molecule,  $\text{H}_2\text{O}$  ligand was not present in the first solvation shell. The large number of  $\text{H}_2\text{O}$  ligand occupied in the second solvation shell and having high lability. Mean residence time of  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NH}_3$  ligand in the second solvation shell were 3,13 ps and 2,57 ps respectively indicating for high intensity of ligand exchange processes.

Keywords: 18,6% ammonia solution,  $\text{Cu}^+$  ion, QMCF-MD, preferential