

# SOLVASI Zn(II) DALAM LARUTAN HIDROTERMAL BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL KLASIK

Oleh: suwardi, crys fajar partana, agus salim

## ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk menginvestigasi struktur dan sifat dinamika solvasi ion Zn(II) dalam larutan hidrotermal melalui simulasi dinamika molekul klasik.

Langkah penelitian mencakup a) pemilihan basis sets yang baik; b) penyusunan potensial 2-badan dan 3-badan yang baru untuk interaksi  $Zn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O dan H<sub>2</sub>O-  $Zn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O, c) simulasi MD klasik pada berbagai temperatur (25, 50, 75, 100, 150, 200, 250, 300, dan 350 °C), yang memperhitungkan pengaruh dua badan (MM 2-badan) dan tiga badan (MM 2-badan + 3-badan). Sistem simulasi terdiri dari sebuah ion  $Zn^{2+}$  dan 499 molekul air, dan d) analisis trajektori hasil simulasi untuk menentukan sifat-sifat struktur dan dinamika solvasi ion dalam larutan hidrotermal.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa pada struktur hidrasi  $Zn^{2+}$ , jarak ion  $Zn^{2+}$ - H<sub>2</sub>O pada kulit hidrasi pertama terpengaruh oleh temperatur simulasi meskipun sangat kecil sedangkan jumlah molekul air yang terkoordinasi pada ion pusat  $Zn^{2+}$  pada T = 25, 50, 75 dan 100 °C adalah 6 tetapi jumlah tersebut berkurang hingga hanya 4 buah molekul H<sub>2</sub>O pada T = 150, 200, 300 dan 350 °C. Struktur hidrasi ion  $Zn^{2+}$  berubah dari oktahedral terdistorsi menjadi tetrahedral terdistorsi. Pengaruh temperatur pada sifat dinamika hidrasi ion  $Zn^{2+}$  ditunjukkan oleh adanya pertukaran ligan H<sub>2</sub>O antara kulit hidrasi pertama dan kedua pada temperatur 150, 200, 250, 300, dan 350 °C sedangkan pada temperatur 25, 50, 75, dan 100 °C pertukaran ligan tersebut tidak teramati. Stabilitas hidrasi pada kulit pertama nampaknya terpengaruh oleh kenaikan temperatur.

Kata Kunci: *solvasi, hidrotermal, Zn(II), simulasi dinamika molekul*