

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_2O dan H_2O - Zn^{2+} - H_2O , 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_2O 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_2O 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_2O 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*