

Struktur dan Dinamika Hidrasi ion Golongan IIB menggunakan Simulasi Dinamika Mekanika Molekul

Oleh: Crys Fajar Partana, Agus Salim, dan Marfuatun

ABSTRAK

Proses metabolisme yang berada dalam tubuh makhluk hidup, senantiasa melibatkan berbagai pelarut baik air maupun non air. Tubuh manusia sebagian besar (lebih dari 80%) terdiri atas zat cair, sehingga proses metabolisme dalam tubuh manusia melibatkan interaksi antara zat pelarut (*solvent*) dan zat terlarut (*solute*) baik dalam bentuk ion maupun senyawanya. Interaksi antara zat pelarut dengan zat terlarut dikenal dengan istilah solvasi. Sedangkan interaksi zat terlarut dengan air dikenal dengan nama hidrasi. Golongan IIB merupakan golongan logam transisi yang berisi unsur Cd, Zn, dan Hg. Unsur yang akan diamati hidrasinya terhadap air dibatasi pada unsure Zn dan Cd.

Solvasi Zn dan Cd diamati dengan melakukan simulasi dinamika molekul mekanika molekul. Himpunan basis yang digunakan adalah lanl2dz untuk atom Zn dan Cd, sedangkan untuk molekul air digunakan himpunan basis DZP dunning. Simulasi dilakukan dengan menggunakan potensial pasangan dan potensial 3 badan. Masing masing simulasi Zn dan Cd dilakukan dengan cara mencampurkan 1 atom Cd dan Zn yang dicampur dengan 499 molekul H₂O. Hasil simulasi yang berupa data trajectory diolah lebih lanjut untuk mengetahui struktur dan dinamikannya.

Hasil analisis RDF menunjukkan bahwa jarak atom Zn dan atom O (air) rata-rata adalah 2,18 Å, sedangkan jarak rata-rata atom Cd dengan 2,27 Å. Berdasarkan analisis CN diketahui bahwa bilangan koordinasi solvasi Cd dan Zn dalam air sama yaitu 6. Dengan demikian diketahui bahwa kedua solvasi tersebut membentuk struktur molekul oktahedral. Waktu tinggal ligan (air) dalam Zn berdasarkan analisis dinamika molekul memperlihatkan bahwa solvasi Zn dengan air lebih labil dibandingkan dengan solvasi ion Cd²⁺.

Kata Kunci: *ion Cd, ion Zn, hidrasi, dan DMMM*