

STRUKTUR DAN DINAMIKA ION Hg^{2+} DALAM AIR, AMONIAK CAIR DAN CAMPURAN AMONIAK-AIR BERDASARKAN KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL MEKANIKA KUANTUM/MEKANIKA MOLEKUL (MK/MM)

Oleh: Crys Fajar Partana, Suwardi, dan Agus salim

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 hidrasi. Sedangkan interaksi zat terlarut dengan air dikenal dengan nama hidrasi. Merkuri merupakan unsur logam transisi yang terletak dalam golongan IIB periode ke 6. Logam merkuri merupakan logam yang bersifat toksis, dapat menyebabkan keracunan. Keracunan kronis oleh merkuri dapat terjadi akibat kontak kulit, makanan, minuman, dan pernapasan. Toksisitas kronis berupa gangguan sistem pencernaan dan sistem saraf, gangguan lensa mata serta dapat menyebabkan kerusakan pada otak janin sehingga mengakibatkan kecacatan pada bayi yang dilahirkan.

Solvasi ion merkuri diamati dengan melakukan simulasi dinamika molekul mekanika molekul. Himpunan basis yang digunakan adalah DEF2-ECP untuk atom Hg, sedangkan untuk molekul air dan amoniak digunakan himpunan basis DZP dunning. Simulasi dilakukan dengan menggunakan potensial pasangan dan potensial 3 badan. Simulasi dilakukan dengan cara mencampurkan 1 ion Hg^{2+} dicampur dengan 499 molekul H_2O serta yang kedua dengan mencampurkan 1 ion Hg^{2+} dicampur dengan 215 molekul NH_3 . Hasil simulasi yang berupa data trajectory yang diolah lebih lanjut untuk mengetahui struktur dan dinamikanya.

Berdasarkan analisis RDF menunjukkan bahwa jarak atom Hg dan atom O (air) rata-rata adalah 2,22 Å sedangkan Hg dan atom N (amoniak) rata-rata adalah 2,35 Å. Berdasarkan analisis CND diketahui bahwa bilangan koordinasi hidrasi Hg dalam air sama sebanyak 6 molekul air sedangkan bilangan koordinasi Hg dalam amoniak sebanyak. Dengan demikian diketahui bahwa hidrasi ion Hg dalam air membentuk struktur molekul oktahedral terdistorsi dan solvasi ion Hg dalam amoniak membentukkan struktur tetrahedral. Analisis grafik perpindahan ligan menunjukkan bahwa waktu tinggal ligan amoniak lebih lama dibanding air.

Kata Kunci: *Solvasi, merkuri QM/MM MD*