

STRUKTUR DAN DINAMIKA KADMIUM(II) DALAM AMONIAK CAIR BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL MEKANIKA KUANTUM/MEKANIKA MOLEKUL (MK/MM)

Oleh: Suwardi, Ardani Hamman, Nuraini Agustina

ABSTRAK

ABSTRAK

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menentukan struktur dan dinamika solvasi ion Cd(II) dalam amoniak cair. Metode yang digunakan adalah simulasi Dinamika Molekul Mekanika Kuantum/Mekanika Molekul (DM MK/MM). Dalam metode tersebut daerah yang terdiri satu ion Cd(II) dan kulit solvasi pertama diinvestigasi melalui pendekatan mekanika kuantum ab initio Born-Openheimer sedangkan sisanya dideskripsikan melalui potensial pasangan dan 3-badan. Sifat-sifat struktur ditunjukkan oleh beberapa parameter seperti fungsi distribusi radial, distribusi bilangan koordinasi dan fungsi distribusi sudut sementara sifat-sifat dinamika dikarakterisasi oleh waktu tinggal ligan rata-rata dan kebolehjadian pertukaran ligan antara kulit solvasi. Bilangan solvasi 6 telah diperoleh melalui metode MK/MM dengan himpunan basis SBKJC VDZ ECP yang dimodifikasi untuk Cd(II) dan DZP dari dunning untuk N dan H, kontras dengan bilangan koordinasi 10 yang diperoleh melalui simulasi klasik dengan potensial pasangan. Tidak terdapat pertukaran ligan amoniak yang diindikasikan antara kulit pertama dengan kulit kedua. Waktu tinggal ligan rata-rata dalam kulit solvasi kedua adalah 4,419 ps

Kata Kunci: *metode DM MK/MM ab initio, potensial 2-badan + 3-badan, ion Cd(II), amoniak cair, solvasi*