

Preferensial Solvasi Ion Zr(IV) Dan Zn(II) Dalam Larutan Amoniak 18,6% Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekul Mekanika Kuantum/Mekanika Molekul (MK/MM)

Oleh: suwardi, crys fajar partana, agus salim

ABSTRAK

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk menginvestigasi preferensial solvasi ion Zr(IV) dan Zn(II) dalam larutan amoniak 18,6% melalui simulasi dinamika molekul mekanika kuantum/mechanika molekul (MD MK/MM).

Langkah penelitian mencakup a) pemilihan basis sets yang baik; b) penyusunan potensial 2-badan dan 3-badan yang baru untuk interaksi ion-H₂O dan ion-NH₃ maupun H₂O-ion-H₂O, NH₃-ion-NH₃ dan H₂O-ion-NH₃; c) simulasi MD klasik dan MD MK/MM.

Dalam Simulasi dinamika molekul dilakukan dengan memperhitungkan pengaruh dua badan (MM 2-badan), tiga badan (MM 2-badan + 3-badan) dan banyak badan (MK/MM). Tiga Sistem simulasi terdiri dari sebuah ion, dengan 499 molekul air, 215 molekul amoniak dan larutan amoniak 18,6%; dan d) analisis trajektori hasil simulasi untuk menentukan sifat-sifat struktur dan dinamika solvasi ion dalam larutan amoniak 18,6%.

Hasil penelitian menunjukkan struktur solvasi [Zn(NH₃)₄]²⁺ teramati dalam campuran larutan amoniak 18,6% dan Zn²⁺ lebih mudah terkoordinasi dengan ligan amoniak daripada ligan H₂O. Demikian juga karena perbandingan jumlah ligan NH₃ dan H₂O dalam kompleks [Zr(NH₃)₃(H₂O)₅]⁴⁺ dalam kulit pertama adalah 3/5 (0,60) sedangkan dalam sistem campuran amoniak-air sebesar 92/407 (0,22). Fraksi mol amoniak (komposisi lokal) lebih besar daripada fraksi mol air dalam kulit pertama dibandingkan dengan fraksi molnya dalam fasa ruah (komposisi fasa ruah) sehingga ion Zr⁴⁺ dan Zn²⁺ lebih mudah (*preferentially*) terkoordinasi oleh ligan amoniak daripada ligan air dan preferensial tersebut sesuai dengan konsep interaksi asam-basa Lewis.

Kata Kunci: *preferensial ion, simulasi QM/MM, larutan amoniak 18,6%*