

RINGKASAN

Teknik Simulasi komputer dinamika molekuler (DM) sebagai metode atau alat telah terbangun dengan baik dalam kimia komputasi maupun dalam bidang sains yang lain. Hasil dari simulasi DM menghasilkan sifat-sifat struktur seperti fungsi distribusi radial (FDR), distribusi bilangan koordinasi (DBK), dan fungsi distribusi sudut (FDS). Namun demikian kesuksesan simulasi sangat tergantung pada model potensial yang digunakan dalam sistem.

Penelitian ini terutama bertujuan untuk menentukan fungsi potensial 2-badan dan 3-badan dan struktur dan dinamika solvasi ion Hf^{4+} dan Zr^{4+} dalam air dan amoniak cair. Simulasi DM klasik dilakukan melalui beberapa tahap. Tahapan tersebut meliputi penentuan *basis sets* yang tepat, perhitungan energi untuk penentuan potensial 2-badan dan 3-badan untuk sistem Hf^{4+} -air, Hf^{4+} -amoniak cair, Zr^{4+} -air, dan Zr^{4+} -amoniak cair. Fungsi potensial 2-badan dan 3-badan tersebut diperlukan dalam simulasi DM klasik. Sistem simulasi terdiri kotak elementer kubik dengan panjang sisi 24.6 yang berisi 1 Zr^{4+} dan 499 molekul air yang sesuai dengan denits 0,997 g/cm^3 . Sebuah ensemble NVT kanonik pada 298.16 K digunakan dengan kondisi batas berkala, dan temperature dipertahankan melalui algoritma Berendsen. Model air BJH-CF2 fleksibel yang memasukkan potensial intramolekular telah digunakan. Akibatnya, tahapan waktu simulasi ditetapkan 0,2 fs yang mengijinkan gerakan hydrogen secara eksplisit. Batas cut-off 12 Å telah ditetapkan kecuali untuk interaksi non-coulombik O-H dan H-H masing-masing ditetapkan 5,0 dan 3,0 Å. Metode medan reaksi digunakan untuk memperhitungkan interaksi elektrostatik jarak jauh. Metode yang mirip diterapkan untuk simulasi dinamika molekuler ion Hf^{4+} dan Zr^{4+} dalam pelarut air dan amoniak cair.

Hasil penelitian membuktikan bahwa basis sets yang tepat untuk digunakan dalam simulasi dinamika molekuler klasik adalah LANL2DZ ECP yang dimodifikasi untuk ion Hf^{4+} dan Zr^{4+} serta DZP untuk atom H, N, dan O. Struktur hidrasi kulit pertama ion Hf^{4+} dan Zr^{4+} yang ditentukan berdasarkan *Radial distribution function* (RDF), *Angular distribution function* (ADF), dan *Coordination Number* (CN) menunjukkan bujur sangkar antiprismatik sedangkan struktur solvasi kedua ion dalam amoniak cair menunjukkan trigonal bipramida. Aspek dinamika yang diperoleh berdsarkan *Mean residence Time* (MRT) dan grafik jarak ion-ligan lawan waktu simulasi menunjukkan bahwa fleksibilitas ligan pada kulit pertama sangat kecil.