

## STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI ION $Mn^{2+}$ DALAM AIR BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL MEKANIKA MOLEKUL (DM MM)

### STRUCTURE AND DYNAMICS SOLVATION ION $Mn^{2+}$ IN WATER BASED ON SIMULATION DYNAMICS MOLECULES MECHANICS MOLECULES (DM MM)

Oleh: Yuda Prakasa Mahendra & Dr. Crys Fajar Partana, M.Si.  
Jurusan Pendidikan Kimia, FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta  
Email : [yudaprksa@gmail.com](mailto:yudaprksa@gmail.com) & [fajar\\_partana@uny.ac.id](mailto:fajar_partana@uny.ac.id)

#### Abstrak

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk mempelajari struktur dan dinamika solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul. Langkah yang dilakukan dalam penelitian ini yaitu menentukan himpunan basis set yang terbaik. Kemudian menentukan potensial 2-badan dan 3-badan dengan menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul yang akan menghasilkan *file trajectory* yang kemudian diolah lagi dan menghasilkan data berupa grafik FDR, FDS, DBK, dan pertukaran ligan air dengan ion  $Mn^{2+}$ . Berdasarkan analisis yang dilakukan diketahui bahwa struktur dari sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air dengan simulasi DM MM2bd dan MM3bd jumlah ligan airnya adalah sama-sama 8. Sedangkan sifat dinamika dari sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dengan molekul air tidak menunjukkan terjadinya perpindahan air pada simulasi DM MM2bd yang berarti bahwa ligan air yang berikatan dengan ion  $Mn^{2+}$  adalah stabil dan pada simulasi DM MM3bd menunjukkan adanya pertukaran ligan air dari kulit pertama ke kulit kedua lalu kembali lagi dari kulit kedua menuju kulit pertama yang berarti bahwa ligan air yang berikatan dengan ion  $Mn^{2+}$  juga stabil.

**Kata kunci:** Simulasi dinamika molekul, potensial 2-badan, potensial 3-badan, air,  $Mn^{2+}$

#### Abstract

*This study was conducted with the aim to study the structure and dynamics of solvation of  $Mn^{2+}$  ions in water using molecular mechanics molecular dynamics simulation. The steps taken in this research is to determine the best set of base sets. Then determine the 2-body and 3-body potentials by using molecular mechanics molecular dynamics simulations which will generate trajectory files which are then processed again and produce data in the form of RDF, ADF, CND, and water ligand graphs with  $Mn^{2+}$  ions. Based on the analysis, it is known that the structure of the  $Mn^{2+}$  ion solvation system in water with the simulation of DM MM2bd and MM3bd the number of ligands is the same 8. While the dynamic nature of the  $Mn^{2+}$  ion solvation system with water molecule does not show the occurrence of water displacement in the simulation of DM 2-bodyMM which means that the water ligand binding to  $Mn^{2+}$  ions is stable and in the DM 3-bodyMM simulation shows the exchange of water ligand from the first skin to the second skin then back again from the second skin to the first shell meaning that the water ligand binding to the  $Mn^{2+}$  ion is also stable.*

**Keywords:** Molecular dynamics simulation, 2-body potential, 3-body potential, water,  $Mn^{2+}$

#### PENDAHULUAN

Struktur dan dinamika solvasi dapat ditentukan melalui dua cara, yaitu dengan eksperimen dan simulasi komputer. Penentuan struktur dan dinamika solvasi melalui eksperimen memerlukan beberapa peralatan, antara lain: difraksi sinar-X, difraksi sinar neutron, difraksi elektron, spektroskopi, NMR dan beberapa peralatan yang berdasarkan metode hamburan

yang lain, sedangkan melalui simulasi komputer dapat dilakukan dengan dua cara yang terkenal, yaitu: simulasi *Monte Carlo* (MC) dan *Molecular Dynamics* (MD) (Pranowo dan Hetadi, 2011).

Simulasi dengan metode dinamika molekuler selain dapat memberikan informasi bentuk struktur molekul, juga dapat memberikan informasi dinamika molekul, karena metode ini

menggambarkan sifat struktur molekul sebagai fungsi waktu (Armunanto, dkk. 2004).

Penelitian tentang solvasi ion logam dengan simulasi DM MK/MM menjadi penting, karena simulasi tersebut dapat mengakses informasi tentang dinamika solvasi dalam skala femtodetik, dimana instrumen dan eksperimen belum mencapainya (Rode dan Hofer, 2006).

Salah satu logam transisi yang sampai saat ini belum banyak dipelajari proses solvasinya adalah logam Mangan (Mn), sehingga sangat perlu untuk mempelajari proses solvasi dari ion mangan dalam air. Pengetahuan tentang struktur dan dinamika proses solvasi dari ion mangan merupakan salah satu petunjuk untuk mengetahui pola proses solvasi yang melibatkan pelarut air yang terjadi dalam tubuh makhluk hidup.

## METODE PENELITIAN

### Penentuan Koordinat $Mn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O dalam Koordinat Kartesian

Geometri awal  $Mn^{2+}$  dalam H<sub>2</sub>O dimodelkan dalam koordinat kartesian tiga dimensi dengan mengatur besar sudut dan jarak antar atom dalam sistem. Dengan bantuan *Gauss View*, dapat dihasilkan bentuk struktur berupa sistem koordinat  $Mn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O. Geometri sudut H-O-H berdasarkan data eksperimen sebesar 104,5° dan panjang ikatan O-H sebesar 0,9601 Å (Armunanto, 2004). Dengan bantuan *Gauss View*, jika dituliskan dalam koordinat kartesian, geometri awal  $Mn^{2+}$  dalam H<sub>2</sub>O terlihat pada tabel 1.

Tabel 1. Koordinat  $Mn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O dalam sistem koordinat kartesian

Atom	X(Å)	Y(Å)	Z(Å)
Mn	0,000	0,000	0,478
O	0,000	0,000	0,000
H	0,000	0,000	0,960

H	0,937	0,000	0,206
---	-------	-------	-------

### Pemilihan Himpunan Basis Terbaik

Berdasarkan beberapa himpunan basis yang disarankan untuk diuji coba pasangan himpunan basis yang tidak menimbulkan perubahan muatan yang signifikan terhadap ion  $Mn^{2+}$  dan memiliki profil kurva energi ikatan terhadap jarak  $Mn^{2+}$ -O dan  $Mn^{2+}$ -H sesuai dengan profil kurva potensial *Lennard-Jones*. Selain yang digunakan juga harus memiliki nilai kesalahan superposisi himpunan basis (basis set superposition error, BSSE) yang relatif kecil. Selanjutnya pasangan himpunan basis yang terbaik digunakan sebagai acuan untuk menghitung persamaan pasangan fungsional potensial pasangan dan 2-badan.

### Penyusunan Potensial Pasangan dan Potensial 3-badan

Potensial pasangan yang akan ditentukan dalam penelitian ini yaitu potensial pasangan  $Mn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O. Jenis potensial pasangan ini disusun dengan langkah-langkah kerja sebagai berikut : Dalam penyusunan persamaan potensial pasangan  $Mn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O diperlukan titik-titik energi pada berbagai sudut theta ( $\theta$ ) dan phi ( $\phi$ ) serta pada berbagai variasi jarak kation dan ligan. Sudut theta( $\theta$ ) di variasi mulai dari 0° sampai 90° dengan interval tertentu (0, 5, 10, 15, 20, 30, 50, 70, 80, 90), sedangkan sudut phi ( $\phi$ ) divariasi mulai sudut nol (0) derajat sampai 180° (0, 30, 50, 70, 90, 120, 150, dan 180). Jarak kation dan ligan diatur mulai dari 1,4 Å sampai 15 Å. Titik-titik energi tersebut digunakan untuk menyusun fungsi potensial pasangan. Pengumpulan titik energi ini dilakukan dengan bantuan perangkat lunak Turbomole.

Data titik-titik energi pada berbagai sudut theta ( $\theta$ ) dan phi ( $\phi$ ) serta jarak yang diperoleh, selanjutnya diolah melalui fitting 2-badan. Fitting energi dilakukan untuk memperoleh suatu bentuk fungsi persamaan matematika yang mewakili energi tersebut dengan algoritma. Algoritma yang digunakan dalam penyusunan fungsi potensial secara analitis dengan metode kuadrat terkecil dari Lavenberg-Marguart. Bentuk persamaan potensial 2-badan ion  $Mn^{2+}$ - $H_2O$  adalah sebagai berikut.

$$\Delta E_{Fit}^{2bd} = \sum_{i=1}^n \frac{q_M q_i}{r_{Mi}} + \frac{A_i}{r_{Mi}^a} + \frac{B_i}{r_{Mi}^b} + \frac{C_i}{r_{Mi}^c} + \frac{D_i}{r_{Mi}^d}$$

a,b,c,d,  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$  dan  $D_i$  adalah parameter fitting,  $r_{Mi}$  jarak atom ke-i dari ion  $Mn^{2+}$  dan  $H_2O$ ,  $q_i$  dan  $q_M$  adalah muatan atom dari  $Mn^{2+}$  dan  $H_2O$ .

Tabel 2. Parameter akhir untuk interaksi atom O dan H dalam air dengan  $Mn^{2+}$  untuk 2-badan

Atom	$A_i$ (kcal $\text{\AA}^5/\text{mol}$ )	$B_i$ (kcal $\text{\AA}^9/\text{mol}$ )	$C_i$ (kcal $\text{\AA}^{11}/$ mol)	$D_i$ (kcal $\text{\AA}^{12}/\text{mol}$ )
O	-3756,857	120810,919	-489592,58	403507,371
H	187,883	-52,741	-3,181	0,0086

Bentuk persamaan fungsi koreksi badan tiga ( $H_2O$ - $Mn^{2+}$ - $H_2O$ ) yang akan diperoleh adalah sebagai berikut.

$$\Delta E_{corr}^{3bd} = (E_{WMW}^{ab} - E_M^{ab} - 2E_W^{ab}) - \Delta E_{MW}^{2bd}(r_1) - \Delta E_{MW}^{2bd}(r_2) - \Delta E_{MW}^{2bd}(r_3)$$

dengan  $ab$  menyatakan  $Ab$  *initio*, 2bd merupakan energi potensial pasangan, MW dan WW menyatakan interaksi ion-air dan air-air;  $r_1$ ,  $r_2$  dan  $r_3$  adalah jarak ion-air<sub>1</sub>, ion-air<sub>2</sub> dan air<sub>1</sub>-air<sub>2</sub>. Nilai parameter akhir terdapat dalam Tabel 3.

Tabel 3. Parameter akhir untuk fungsi koreksi 3-badan

a1	a2	a3
1,7958	3,3103	-2,2605

### Simulasi DM MM

Simulasi solvasi ion  $Mn^{2+}$  dengan air, diawali dengan simulasi menggunakan simulasi molekuler MM 2-badan. Kemudian simulasi MM 3-badan. Tahap konfigurasi akhir hasil dari simulasi MM 2-badan dijadikan sebagai konfigurasi awal dari simulasi MM 3-badan. Dengan melihat grafik RDF hasil analisis trajectory simulasi mekanika molekuler (MM) tersebut, maka wilayah solvasi lapisan pertama dan lapisan kedua dapat ditentukan.

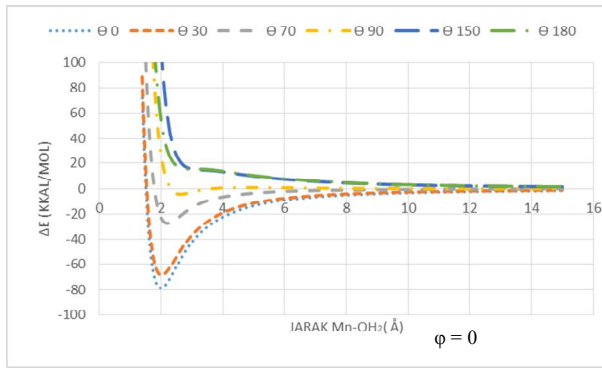
### Analisis Data

Data yang diperoleh dalam simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler berupa file *trajectory*. File tersebut diolah lebih lanjut untuk memperoleh informasi sifat struktur dan dinamika solvasi antara ion  $Mn^{2+}$  dengan air. Pengolahan file *trajectory* dilakukan terhadap struktur meliputi fungsi distribusi radial (RDF), distribusi bilangan koordinasi (CND), dan fungsi distribusi sudut (ADF) serta sifat dinamikanya seperti waktu tinggal ligan.

## HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

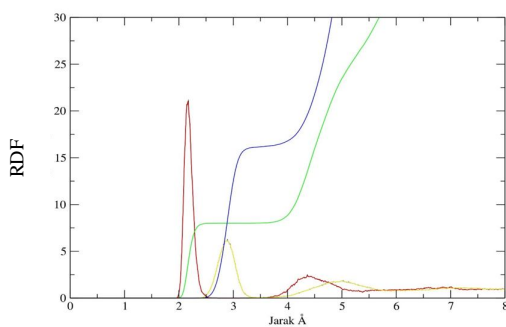
### Penentuan Himpunan Basis Terbaik

Berdasarkan uji coba beberapa himpunan basis set, didapatkan himpunan basis set yang paling sesuai dengan sistem hidrasi yang akan diteliti dan himpunan basis yang sesuai tersebut membentuk kurva potensial *Lennard-Jones* seperti yang terlihat pada gambar 1. Himpunan basis set yang cocok tersebut adalah ATZP untuk atom  $Mn^{2+}$  dan DZP untuk atom O dan H.



Gambar 1. Kurva potensial sistem ion  $Mn^{2+}$  dalam  $H_2O$  dengan himpunan basis ATZP-DZP **Radial Distribution Function (RDF)**

Radial Distribution Function (RDF) atau fungsi distribusi jarak dalam sistem solvasi ion dalam air ini untuk menyatakan fungsi distribusi jarak molekul air ( $H_2O$ ) terhadap ion  $Mn^{2+}$ . Jarak ion pusat  $Mn^{2+}$  dengan atom oksigen dari molekul air dilambangkan dengan  $Mn^{2+}-O$ , sedangkan jarak ion  $Mn^{2+}$  dengan atom hidrogen dilambangkan dengan  $Mn^{2+}-H$ . Bilangan integrasi masing-masing atom juga digambarkan dalam grafik RDF. Fungsi distribusi jarak (RDF) untuk sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dengan molekul air dalam simulasi dinamika molekul mekanika molekul (DM MM) disajikan pada Gambar 2 dan Gambar 3.

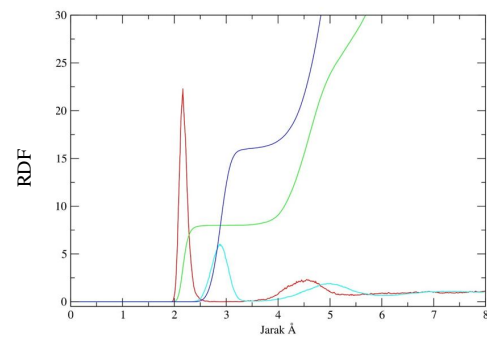


Gambar 2. RDF  $Mn^{2+}-O$  dan  $Mn^{2+}-H$  solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air hasil simulasi MM2bd

Gambar 2 adalah grafik RDF hasil dari kalkulasi simulasi dinamika molekul dengan metode mekanika molekul (MM2bd) dari sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air ( $Mn^{2+}-H_2O$ ). Gambar

tersebut menunjukkan bahwa kurva mulai naik pada jarak 1,9 Å dan mencapai puncak pada jarak 2,1 Å serta berakhir pada jarak 2,5 Å. Informasi ini menunjukkan bahwa interaksi antara ion  $Mn^{2+}$  dengan atom O dari molekul air ( $H_2O$ ) pada lapisan pertama terjadi pada jarak 2,1 Å. Dalam gambar juga terlihat bilangan integrasi dari atom O adalah 8. Hal ini menunjukkan bahwa pada lapisan kulit pertama terdapat sebanyak 8 atom O yang terikat sebagai ligan oleh ion  $Mn^{2+}$ .

Pada Gambar 2 tersebut ion pusat  $Mn^{2+}$  pada jarak 2,9 Å terlihat berinteraksi dengan atom hidrogen (H) dari molekul air ( $H_2O$ ). Jarak tersebut terlihat lebih jauh jika dibandingkan dengan jarak atom O dengan ion  $Mn^{2+}$ , hal tersebut menunjukkan bahwa puncak pertama dari RDF ion  $Mn^{2+}-O$  dan ion  $Mn^{2+}-H$  tidak terjadi tumpang tindih. Bilangan integrasi atom H terlihat pada angka 16. Bilangan tersebut menunjukkan bahwa atom H yang berada disekitar ion  $Mn^{2+}$  pada kulit pertama berjumlah 16. Pada lapisan kedua puncak grafik terlihat pada jarak 4,3 Å untuk atom O dan 5 Å untuk atom H.



Gambar 3. RDF  $Mn^{2+}-O$  dan  $Mn^{2+}-H$  solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air simulasi MM3bd

Gambar 3 merupakan grafik RDF hasil simulasi DM MM3bd dari sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air. Gambar tersebut menunjukkan bahwa kurva mencapai puncak pada jarak 2,1 Å

dan turun pada 2,5 Å. Pada puncak 2,1 Å menjadi interaksi antara atom O dengan molekul air pada kulit pertama. Dalam gambar terlihat bahwa bilangan integrasinya adalah 8, yang menunjukkan jumlah ligan yang diikat pada kulit pertama. Pada grafik RDF yang dilakukan terhadap Mn<sup>2+</sup>-O dan Mn<sup>2+</sup>-H baik pada simulasi MM2bd maupun MM3bd menghasilkan grafik yang hampir sama. Pada kulit kedua jarak atom oksigen dengan ion Mn<sup>2+</sup> berada pada puncak 4,5 Å yang menunjukkan terjadinya interaksi atom oksigen dengan ion Mn<sup>2+</sup>.

Gambar 3 juga menunjukkan mengenai jarak atom H dari molekul air dengan ion Mn<sup>2+</sup> yang puncaknya berada pada jarak 2,8 Å dan bilangan integrasi dari atom hidrogen (H) adalah 16. Dari grafik tersebut pada jarak 2,8 Å terjadi interaksi antara atom H dari molekul dengan ion Mn<sup>2+</sup> dengan 16 atom H. Dalam grafik juga diperlihatkan bahwa pada kulit kedua puncak kurva terjadi pada jarak 5 Å. Baik pada kulit pertama maupun kulit kedua jarak atom oksigen dan hidrogen dari molekul air (H<sub>2</sub>O) tidak terjadi tumpang tindih. Perbandingan nilai karakterisasi RDF untuk MM2bd dan MM3bd dapat dilihat pada Tabel.

Tabel 4. Nilai karakterisasi dari RDF pada ion Mn<sup>2+</sup> dalam air simulasi dinamika molekul MM2bd dan MM3bd

Simulasi	α-β	r <sub>M1</sub> (Å)	r <sub>m1</sub> (Å)	N <sub>1</sub>	r <sub>M2</sub> (Å)	r <sub>m2</sub> (Å)
MM2bd	Mn <sup>2+</sup> -O	2,1	2,5	8	4,3	5
	Mn <sup>2+</sup> -H	2,9	3,3	16	5	5,7
MM3bd	Mn <sup>2+</sup> -O	2,1	2,5	8	4,5	5
	Mn <sup>2+</sup> -H	2,8	3,3	16	5	5,6

Keterangan:

α-β :atom pusat – atom ligan

r<sub>M1</sub>/r<sub>M2</sub> :puncak maksimum lapisan kulit pertama/kedua (Å)

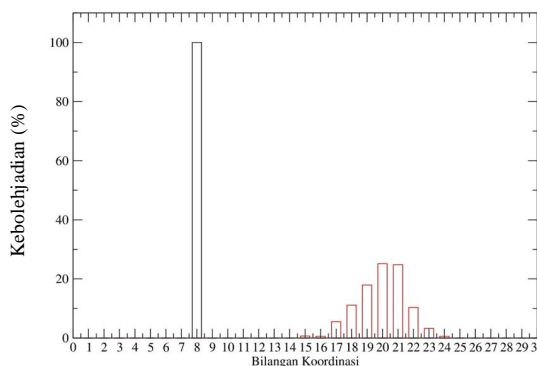
r<sub>m1</sub>/r<sub>m2</sub> :puncak minimum lapisan kulit pertama/kedua (Å)

N<sub>1</sub>/N<sub>2</sub> :jumlah ligan lapisan kulit pertama/kedua

**Coordination Number Distribution (CND)**

*Coordination Number Distribution (CND)*

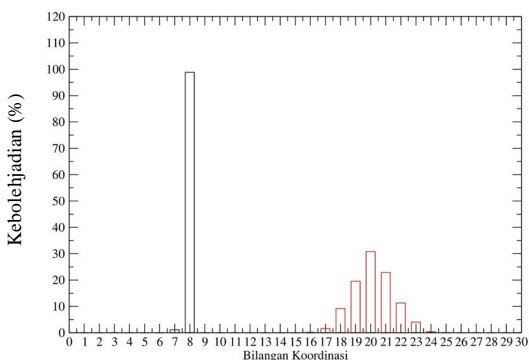
atau distribusi bilangan koordinasi digunakan untuk menentukan bilangan koordinasi yang dimiliki ion pusat dengan ligan pada kulit pertama dan kedua. Jumlah ligan atau bilangan koordinasi pada sistem solvasi ion Mn<sup>2+</sup> dengan atom oksigen dan hidrogen dalam molekul air dengan menggunakan mekanika molekul MM2bd maupun MM3bd, dalam grafik yang dihasilkan juga memberikan informasi dari kulit pertama dan kulit kedua dari ligan oksigen dan hidrogen yang diikat oleh ion Mn<sup>2+</sup>, ditunjukkan pada Gambar 4 dan Gambar 5.



Gambar 4. CND solvasi ion Mn<sup>2+</sup> dalam air MM2bd

Gambar 4 adalah grafik CND dari hasil kalkulasi simulasi mekanika molekul ion Mn<sup>2+</sup> dalam air. Grafik tersebut memberikan informasi bahwa jumlah ligan yang mengiilingi atom pusat untuk sistem solvasi ion Mn<sup>2+</sup> dalam air berjumlah 8 dengan probabilitas 100%. Oleh karena itu dapat dikatakan bahwa ligan pada kulit

pertama telah stabil karena hasil dari kalkulasi menunjukkan probabilitasnya telah mencapai 100%. Jumlah ligan pada kulit kedua terlihat bervariasi mulai dari 15 sampai 24 dengan probabilitas yang juga bervariasi, fakta tersebut menunjukkan bahwa ligan yang berada dikulit kedua sangat dinamik dan bersifat fleksibel.



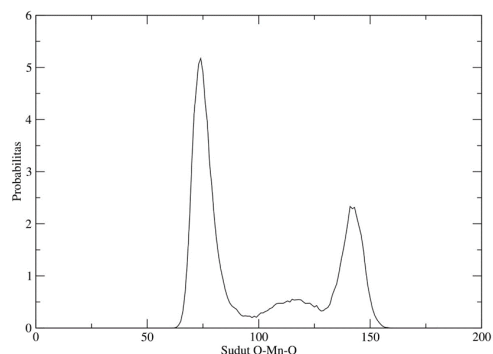
Gambar 5. CND solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air simulasi MM3bd

Grafik CND pada simulasi MM3bd memberikan hasil yang berbeda dengan grafik pada simulasi MM2bd. Grafik CND pada simulasi MM3bd memberikan informasi bahwa jumlah bilangan koordinasi pada kulit pertama adalah 7 dan 8 dengan probabilitas 1% dan 99% bisa dikatakan bahwa ligan pada kulit pertama sedikit kurang stabil karena bilangan koordinasinya tidak mencapai 100%. Sedangkan pada kulit kedua bilangan koordinasinya dimulai dari 16 sampai 25 dengan probabilitas yang bervariasi dan bisa dikatakan bahwa ligan yang berada dilapisan kedua bersifat sangat dinamik dan fleksibel.

**Angular Distribution Function (ADF)**

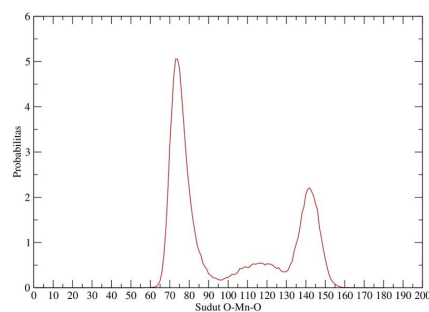
Angular distribution function (ADF) atau fungsi distribusi sudut merupakan fungsi yang menggambarkan distribusi sudut selama simulasi dinamika molekul berlangsung. Fungsi ADF

memberikan informasi tentang distribusi sudut ikatan yang terbentuk antara ligan 1 (atom  $O_1$ ) – ion pusat (Mn) – ligan 2 (atom  $O_2$ ). Grafik ADF dalam sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air dari simulasi ini ditunjukkan pada Gambar 6 dan Gambar 7.



Gambar 6. ADF sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air dengan sudut  $O_1-Mn-O_2$  simulasi MM2bd

Gambar 6 merupakan grafik yang diperoleh dari hasil kalkulasi ADF dari simulasi MM2bd solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air. Pada ADF hasil simulasi yang didapat atau yang terbentuk oleh atom  $O_1-Mn-O_2$  berkisar antara  $60^\circ$  sampai  $158^\circ$ . Dalam grafik menunjukkan bahwa terdapat dua puncak sudut utama, puncak pertama terjadi pada sudut  $74^\circ$  dan puncak kedua terjadi pada sudut  $141^\circ$ .



Gambar 7. ADF sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air dengan sudut  $O_1-Mn-O_2$  simulasi MM3bd

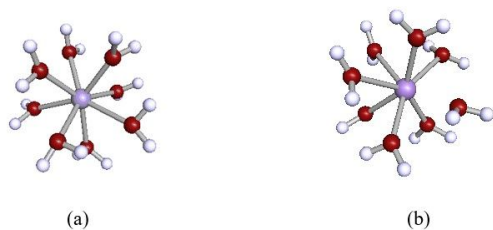
Gambar 7 merupakan grafik ADF dari simulasi MM3bd solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air. Terlihat sudut yang dibentuk oleh atom  $O_1-Mn-O_2$  berkisar antara  $57^\circ$  sampai  $163^\circ$ . Dalam



Gambar 7 terdapat dua puncak sudut utama, puncak pertama terjadi pada sudut  $73^\circ$  dan puncak kedua terjadi pada sudut  $141^\circ$ .

### Struktur solvasi ion $Mn^{2+}$ dalam air dari simulasi MM2bd dan MM3bd

Struktur solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air dianalisis dengan melihat hasil kalkulasi RDF, CND, dan ADF. Struktur dari sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dengan molekul air bisa didapatkan atau dilihat dari hasil *snapshot* yang membentuk *square – antiprismatic geometry*. Berdasarkan hasil RDF, CND, ADF, dan *snapshot* dari geometri *hotspot\_coords* dengan menggunakan TMOLEX, rumus struktur sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam molekul airnya dari simulasi MM2bd dan MM3bd sebagaimana ditunjukkan dalam Gambar 8.

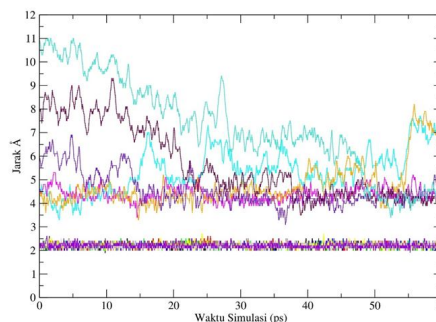


Gambar 8. Hasil *snapshot* ion  $Mn^{2+}$  dalam air dari (a) simulasi MM2bd dan (b) simulasi MM3bd.

### Dinamika solvasi ion $Mn^{2+}$ dalam air dari simulasi MM2bd dan MM3bd

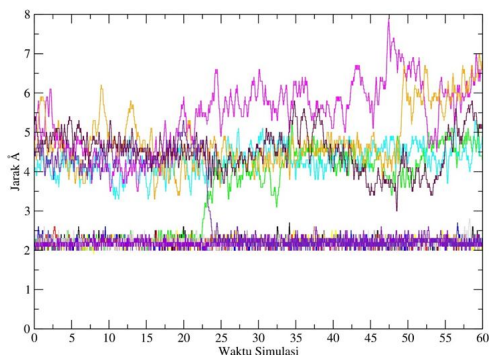
Dinamika solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam molekul air diperoleh dengan mengolah data dari *trajectory* menggunakan kalkulasi dari fungsi *Distcalc* untuk kedua simulasi MM2bd dan MM3bd. Dengan mengolah dari data *Trajectory* tersebut akan didapatkan hasil yang berupa grafik yang memberikan informasi mengenai dinamika ligan pada kulit pertama dan kulit kedua selama proses simulasi berlangsung. Grafik dinamika ligan ini juga dapat memperlihatkan ada atau

tidaknya perpindahan ligan air dari kulit pertama menuju kulit kedua dan sebaliknya dari kulit yang lebih luar menuju kulit yang lebih dalam. Ada tidaknya pertukaran ligan selama simulasi berlangsung ditunjukkan pada Gambar 9. dan Gambar 10.



Gambar 9. Pertukaran ligan solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air simulasi MM2bd

Gambar 9 Merupakan gambar grafik yang menunjukkan terjadinya pertukaran ligan dari ion  $Mn^{2+}$  dalam air yang didapatkan dari simulasi MM2bd. Lapisan kulit kedua dinamika ligan air dengan ion dalam grafik ditunjukkan pada jarak  $4,5 \text{ \AA}$ . Dalam grafik menunjukkan bahwa molekul air (ligan air) selama simulasi ada yang berusaha untuk berpindah dari kulit luar ke kulit terdalam tetapi tidak sampai berpindah ke kulit terdalam. Hal ini membuktikan bahwa dinamika dari ligan air dengan ion  $Mn^{2+}$  sudah stabil dikarenakan tidak ada yang berhasil berpindah dari kulit kedua menuju kulit pertama. Selama simulasi dinamika antara ligan air dengan ion  $Mn^{2+}$  pada kulit pertama terjadi pada jarak  $2,4 \text{ \AA}$  dan untuk kulit kedua terjadi pada jarak antara  $4$  sampai  $11 \text{ \AA}$ .



Gambar 10. Pertukaran ligan solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air simulasi MM3bd

Gambar 10. menunjukkan grafik pertukaran ligan solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air dari simulasi MM3bd. Dalam grafik menunjukkan bahwa simulasi ligan air mengalami perpindahan menuju kulit kedua pada waktu 22 ps dan kembali lagi menuju kulit pertama pada waktu 28 ps, hal ini menunjukkan bahwa ligan air dengan ion  $Mn^{2+}$  tetap stabil. Selama simulasi dinamika antara ligan air dengan ion  $Mn^{2+}$  pada kulit pertama terjadi pada jarak 2,2 Å dan untuk kulit kedua terjadi pada jarak antara 4 sampai 7,8 Å.

Perbedaan dari grafik pertukaran ligan dari simulasi MM2bd dan MM3bd ini terletak pada adanya pertukaran ligan. Pada simulasi MM2bd sama sekali tidak terjadi perpindahan dari kulit kedua ke kulit pertama yang membuktikan bahwa simulasi MM2bd telah stabil sedangkan pada simulasi MM3bd terjadi pertukaran ligan pada waktu 22 ps dan 28 ps yang membuktikan bahwa simulasi MM3bd stabil.

## SIMPULAN DAN SARAN

### Simpulan

Berdasarkan penelitian simulasi dinamika molekul MM2bd dan MM3bd yang telah dilakukan diperoleh hasil sebagai berikut :

1. Berdasarkan hasil RDF, CND, ADF, dan *snapshot* dari geometri *hotspot\_coords* dengan menggunakan TMOLEX, struktur sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam air menunjukkan bahwa pada simulasi MM2bd dan MM3bd sama-sama mengikat 8 molekul air sebagai ligan dan membentuk *square – antiprismatic geometry*.
2. Dinamika dari proses simulasi ini melibatkan ion  $Mn^{2+}$  dalam air sebagai ligan yang menunjukkan hasil dari simulasi MM2bd tidak terjadi pergerakan sama sekali yang menunjukkan bahwa ligan air yang berikatan dengan ion  $Mn^{2+}$  stabil. Sedangkan pada MM3bd terjadi pertukaran ligan air dari kulit pertama menuju kulit kedua dan kembali lagi dari kulit kedua menuju kulit pertama yang menunjukkan bahwa ligan air yang berikatan dengan ion  $Mn^{2+}$  juga stabil.

### Saran

1. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut tentang sistem solvasi ion  $Mn^{2+}$  dalam pelarut selain air seperti amoniak atau campuran amoniak – air untuk mengetahui struktur dinamika jika berbeda pelarut.
2. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut menggunakan simulasi atau metode baru seperti misalnya QMCF agar mengetahui keakuratan penelitian yang telah dilakukan.
3. Perlu dilakukan pembaruan pada *software* pendukung penelitian agar data yang dimasukkan sebelum dilakukan simulasi bisa lebih akurat.



## DAFTAR PUSTAKA

- Armunanto, R., Schwenk, C.F., Bambang Setiaji, A.H., and Role, B.M., (2003). Classical and QM/MM Molecular Dynamics Simulations of  $\text{Co}^{2+}$  in water, *J.Chem. Phys.* 295, 63-73.
- Cotruvo, J. Dr., et al. (2011). *Cadmium in Drinking-water*. World Health Organization/SDE/WSH/03/04/80/Rev/1
- Cramer, C.J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. Wiley.
- Darmono. (2004). *Toksiologi Logam Berat*. Artikel. Suara Merdeka. 4 Mei 2009.
- Fatmi M.Q., Hofer T.S., Randolf B.R., Rode B.M. (2005). *An Extended ab initio QM/MM MD Approach to Structure and Dynamics of Zn(II) in Aqueous Solution*. *The Journal of Chemical Physics*. 122(5), 054514-054522.
- Georgescu, Bogdan., Georgescu, Carmen., et al. (2011). *Heavy Metals Acting as Endocrine Disrupters*. *Animal Science and Biotechnologies*, 44(2).
- Hirata, F. (2003). *Molecular Theory of Solvation*. New York: Kluwer Academic Publishers.
- Jorge Iglesias Yagüe, Ahmed M. Mohammed†, Hannes Loeffler, and Bernd M. Rode.(2001). *Classical and Mixed Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Simulation of Hydrated Manganous Ion*. *J. Phys. Chem. A*, 105 (32), pp 7646–7650
- Markham, G.D., Glusker, J.P., Bock, C.L., Trachtman, M., Bock, C.W. (1996). *Hydration energies of divalent beryllium and magnesium ions: an ab initio molecular orbital study*. *Journal of Physical Chemistry* 100, 3488–3497.
- Poulikakos, D., Arcidiacono, S., and Maruyama, S. (2003). *Molecular Dynamics Simulation in Nanoscale Heat Transfer: A Review*. *Microscale Thermophysical Engineering*, 7, 181–206.
- Pranowo, Harno Dwi. (2011). *Pengantar Kimia Komputasi*. Penerbit Lubuk Agung: Bandung.
- Pranowo, H.D. (2002). *Pengantar Kimia Komputasi, Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC)*. Yogyakarta: Universitas Gajah Mada.
- Rode, B.M., and Hofer, T.S. (2006). *How to Access Structure and Dynamics of Solutions: the Capabilities of Computational Methods*, *Pure Applied Chemistry*, 78, 525–539.