

**SIMULASI MONTE CARLO  
UNTUK PENENTUAN STRUKTUR SOLVASI ION Ni(II)  
DALAM AIR  
MENGUNAKAN DUA MACAM TWO-BODY POTENTIALS  
YANG BERBEDA**

**SKRIPSI**

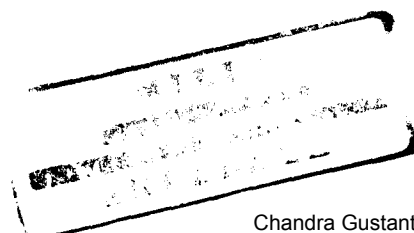
MSK 2006

6.2

**CHANDRA GUSTANTO**



**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS AIRLANGGA  
SURABAYA  
2006**



**SIMULASI MONTE CARLO  
UNTUK PENENTUAN STRUKTUR SOLVASI ION Ni(II)  
DALAM AIR  
MENGUNAKAN DUA MACAM TWO-BODY POTENTIALS  
YANG BERBEDA**

**SKRIPSI**

**Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh  
Gelar Sarjana Sains Bidang Kimia  
Pada Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Universitas Airlangga**

Oleh :


**CHANDRA GUSTANTO**

**NIM. 080212467**

**Tanggal Lulus : 20 Juli 2006**

**Disetujui Oleh :**

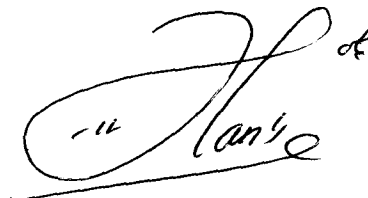
**Pembimbing I,**



**Drs. Faidur Rochman, MS.**

**NIP. 131 406 601**

**Pembimbing II,**



**Drs. Handoko Darmokoesoemo, M.Si**

**NIP. 131 801 399**

## LEMBAR PENGESAHAN NASKAH SKRIPSI

Judul : SIMULASI MONTE CARLO UNTUK PENENTUAN STRUKTUR SOLVASI ION Ni(II) DALAM AIR MENGGUNAKAN DUA MACAM TWO-BODY POTENTIALS YANG BERBEDA

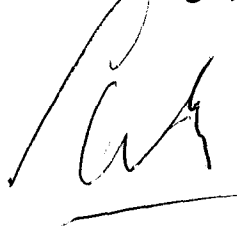
Penyusun : CHANDRA GUSTANTO

NIM : 080212467

Tanggal Ujian : 20 Juli 2006

Disetujui Oleh :

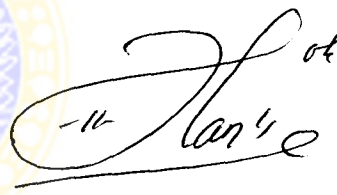
Pembimbing I,



Drs. Faidur Rochman, MS.

NIP. 131 406 601

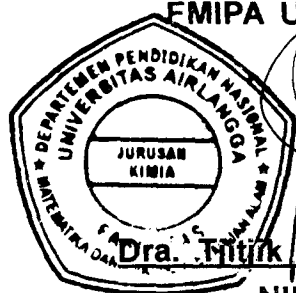
Pembimbing II,



Drs. Handoko Darmokoesoemo, M.Si

NIP. 131 801 399

Mengetahui,  
Ketua Jurusan Kimia  
FMIPA Universitas Airlangga



Dra. Titik Sri Tjahjandarie, Ph.D

NIP. 131 801 627

## **PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI**

Skripsi ini tidak dipublikasikan, namun tersedia di perpustakaan dalam lingkungan Universitas Airlangga. Diperkenankan untuk dipakai sebagai referensi kepustakaan, tetapi pengutipan harus seijin penyusun dan harus menyebutkan sumbernya sesuai kebiasaan ilmiah.

**Dokumen skripsi ini merupakan hak milik Universitas Airlangga.**



*"DIA-lah yang menjadikan bumi sebagai hamparanmu, dan langit sebagai atap, dan menurunkan air hujan dari langit, lalu menumbuhkan berbagai buah sebagai rizki untukmu, karena itu janganlah kamu mengadakan sekutu bagi Allah, padahal kamu telah mengetahui (Allah tidak bersekutu) "*

**(QS Al-Baqarah 22)**

*" Sesungguhnya kepunyaan Allahlah kerajaan langit dan bumi. DIA menghidupkan dan mematikan. Dan tidak adan pelindung dan penolong bagimu selain Allah. "*

**(QS. At-Taubah 116)**

*" Sesungguhnya dalam pergantian malam dan siang dan semua yang dijadikan oleh Allah di langit dan di bumi sebagai bukti kekuasaan Allah bagi orang-orang yang bertaqwa "*

**(Qs. Yunus 6)**

*Satu-satunya pilihan dalam hidup ini adalah hari ini harus lebih baik dari kemarin, bahkan kalau bisa sekarang ini harus lebih baik daripada barusan tadi, dalam hal apapun. Kalau tidak demikian maka harus diakui bahwa hari ini adalah hari yang gagal dan rugi*

**(Aa' Gym)**

*Hidup yang bermakna adalah hidup dengan ibadah  
Hati yang ikhlas dan kejujuran adalah pengantar kesuksesan  
Kegagalan merupakan rahmat dari Allah sebagai awal dari keberhasilan  
Selidupan dengan diiringi Do'a dan Ikhtiar tidak akan membuat hamba Allah merugi*  
**Never give up to reach Allah SWT 's love**  
**(You-noez)**



*Karya skripsi ini kupersembahkan untuk Bapak dan Ibu*

*Atas pengorbanannya kepada putra yang dicintainya*

## ***UCAPAN SYUKUR DAN TERIMA KASIH***

Segala puji syukur kepada Allah Subhanahu wa Ta'ala, Sang penguasa kehidupan, Sang penguasa ilmu pengetahuan, yang telah memberi Rahmat kepada makhluk-Nya dan yang memberi cahaya cinta yang tak putus-putusnya kepada umat-Nya.

Sholawat serta salam kepada sang kekasih Allah, nabi besar Muhammad SAW yang telah memberikan ajaran Islam dengan Al-Qur'an dan As-Sunnah sebagai pedoman dan pegangan hidup manusia untuk dunia dan akherat.

Untuk Bapak dan Ibu yang memberikan semua pengorbanan yang tak terkira untuk putra-putra tercintanya, yang telah memohon do'a untuk bekal putra-putranya, maafkan putramu ini yang selalu berbuat dosa dan kesalahan yang membuat Bapak dan Ibu kecewa, sampai kapanpun putramu ini takkan mampu membalas pengorbanan Bapak dan Ibu selain membahagiakan dan mendo'akan engkau berdua.

Untuk kakakku Ary dan adikku Dian tercinta yang telah memberikanku dukungan dan bantuan yang tak terkira, dan yang mengisi kehampaan dalam hidupku.

Untuk Pak Faidur dan Pak Handoko sebagai pembimbing ku yang dengan sabar dan telaten dalam memberikan bimbingan dan arahnya, sehingga selesailah penyusunan tugas akhir skripsi ini.

Buat mas Aan tetap semangat dan berjuanglah menjalani skripsi dan sidang nanti, aku mendukungmu.

Buat Eko Ndonk, Widi O'on, Roy, Cak Jo, dan Seno, kalianlah teman terbaikku selama meniti ilmu bersama kalian, jasa-jasa dan bantuan kalian takkan kulupakan sampai kapanpun.

Buat Rusdian Alex dan Pitra, kalian adalah sahabat yang takkan pernah kulupakan, yang telah berjuang bersamaku, jangan lupakan perjuangan kita bersama.

Buat Neea Suneo Syahidah, yang paling banyak julukannya, teruskan dakwahmu dan jangan bosan-bosan berjuang di jalan Islam, dan jangan lupa jaga "kakaku" ya.

Buat Rathneil san dan Hani san, yang selalu kurindukan untuk les bahasa Jepang dan mandarinnya, Neil arigatou gozaimashita pinjeman manga dan cd-nya ya, Ganbatte desu yo.

Buat Iden dan Ririn, makasih atas perhatian kalian kepadaku semoga apa yang kalian cita-citakan dapat terkabul.

Buat Saenah, Alfa, Rani, Ana, Ely, Dian, Ratih, Rohma, Diah, Evi, Amel, Santi, Vinny, Haning, Mafulah, Cilpy, Wiwik, Palupi, Uswatun, Imel, Nila, Masitha, Nuri dan Nyoman... makasih kalian adalah teman-teman yang paling ramai dan paling semangat dalam segala hal, yang menjadikan angkatan 2002 menjadi lebih hidup, takkan kulupakan momen terindah dan perjuangan bersama kalian selama 4 tahun .

Buat semua anak-anak angkatan 2003, teruskan perjuangan kalian, semoga Allah memberikan kemudahan bagi kalian.

Buat Farah 2004, kamu akan selalu kuingat dan takkan pernah kulupakan, teruskan belajar pianonya, be a good girl.

Buat Echa 2004, jangan bingung dan ragu untuk mengambil keputusan, pilih yang terbaik bagimu, okay.

Serta buat semua pihak yang gak bisa disebutkan satu persatu, makasih banyak atas bantuan dan dukungan kalian atas penyusunan naskah skripsi ini

**"Semoga Allah SWT membalas semua keikhlasan kalian dalam membantu saya selama ini dan semoga apa yang kalian cita-citakan dapat dikabulkan oleh Allah SWT. "**



## KATA PENGANTAR

Dengan memanjatkan segala puji syukur kehadirat Allah SWT atas semua rahmat dan karunia-Nya sehingga penyusun dapat menyelesaikan penyusunan skripsi yang berjudul “Simulasi *Monte Carlo* Untuk Penentuan Struktur Solvasi Ion Ni(II) Dalam Air Menggunakan Dua Macam *Two-Body Potentials* Yang Berbeda” ini dengan baik.

Skripsi ini disusun sebagai tugas akhir yang harus diselesaikan sebagai persyaratan meraih gelar Sarjana Sains dalam bidang Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Airlangga.

Dalam kesempatan ini penyusun mengucapkan terima kasih kepada :

1. Drs. Faidur Rochman, MS, selaku dosen pembimbing I dan Drs. Handoko Darmokoesoemo, M.Sc., selaku dosen pembimbing II yang dengan sabar memberikan bimbingan, arahan dan petunjuk serta nasehat dalam penyusunan skripsi ini.
2. Drs. Yusuf Syah, M.Si., selaku dosen wali.
3. Dra. Tjitjik Srie Tjahjandari, Ph.D., selaku Ketua Jurusan Kimia, FMIPA Universitas Airlangga.
4. Seluruh dosen pengajar, staf dan karyawan di lingkungan FMIPA Universitas Airlangga.
5. Kedua orang tua dan anggota keluarga yang telah membantu memberikan dukungan materi dan moral dalam penyusunan proposal skripsi ini.
6. Satu-satunya teman seperjuangan, Aan 2001.

7. Rekan-rekan jurusan Kimia Unair terutama angkatan 2001 dan 2002.
8. Semua pihak yang telah membantu dalam menyelesaikan penulisan skripsi ini.

Penyusun menyadari bahwa masih banyak kekurangan dalam penyusunan skripsi ini, oleh karena itu kritik dan saran yang membangun sangat penyusun harapkan. Semoga proposal skripsi yang disusun ini mampu memberikan modal sumbangan yang besar terhadap kemajuan ilmu pengetahuan khususnya di bidang kimia komputasi.



Surabaya, Juli 2006  
Penyusun

Chandra Gustanto

**Chandra Gustanto, 2006, Simulasi *Monte Carlo* Untuk Penentuan Struktur Solvasi Ion Ni(II) Dalam Air Menggunakan Dua Macam *Two-Body Potentials* Yang Berbeda, skripsi ini dibawah bimbingan Drs. Faidur Rochman, MS. dan Drs. Handoko Darmokoesoemo, M.Si., Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Airlangga, Surabaya**

---

### ABSTRAK

Simulasi *Monte Carlo* telah dilakukan untuk menentukan struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam pelarut air menggunakan dua macam *two-body potentials* yang berbeda. Potensial interaksi yang digunakan sebagai masukan dalam simulasi diambil dari literatur, yaitu Arindah (2000) sebagai potensial I dan Inada *et al.*, (2002) sebagai potensial II. Simulasi dijalankan pada suhu 298,15 K agar sistem tetap berada dalam fasa cair, dengan sistem 1 ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan 215 molekul  $\text{H}_2\text{O}$ . Hasil penelitian menunjukkan bahwa dengan menggunakan potensial I, molekul  $\text{H}_2\text{O}$  yang mengelilingi ion  $\text{Ni}^{2+}$  pada solvasi lapis pertama sebanyak 10 dan pada lapis kedua sebanyak 52, sedangkan dengan menggunakan potensial II, molekul  $\text{H}_2\text{O}$  yang mengelilingi ion  $\text{Ni}^{2+}$  pada solvasi lapis pertama sebanyak 8 dan pada lapis kedua sebanyak 20. Dari data distribusi angka solvasi, radial dan sudut ikatan  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ , struktur (solvasi lapis pertama) yang diperoleh dengan menggunakan potensial I adalah mendekati bentuk *bicapped square antiprism*, sedangkan dengan menggunakan potensial II mendekati bentuk *square antiprism*.

**Kata Kunci :** Simulasi *Monte Carlo*, sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ , *two-body potentials*.

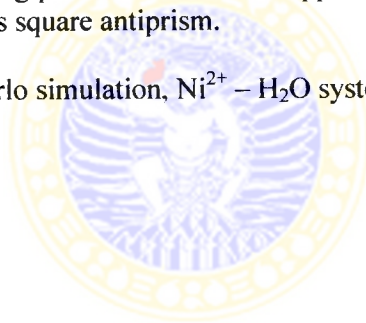
**Chandra Gustanto, 2006, Monte Carlo Simulation to Obtain Solvation Structure of Ni(II) in Water Using Two Different Equation of Two-Body Potentials, this script under guided by Drs. Faidur Rochman, MS. and Drs. Handoko Darmokoesoemo, M.Si., Department of Chemistry, Mathematic and Science Faculty, Airlangga University, Surabaya.**

---

## ABSTRACT

Monte Carlo simulation was done to obtain the structure of the  $\text{Ni}^{2+}$  ion in water using two different two-body potentials. Interaction potential which used as simulation input adopted from literature, that is Arindah (2000) as potential I and Inada *et al.* (2002) as potential II. The simulation is running at 298.15 K in order to keep the system in liquid state, with the system of 1  $\text{Ni}^{2+}$  ion in 215 water molecules. The results were shown that with using potential I, number of  $\text{H}_2\text{O}$  molecules surrounding  $\text{Ni}^{2+}$  ion were 10 molecules in first shell and 52 molecules in second shell, while with using potential II, number of  $\text{H}_2\text{O}$  molecules surrounding  $\text{Ni}^{2+}$  ion were 8 molecules in first shell and 20 molecules in second shell. From distribution data of radial, solvation number and angle, the structure (on first shell) with using potential I that is bicapped square antiprism, while with using potential II that is square antiprism.

**Keywords :** Monte Carlo simulation,  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  system, two-body potentials.



## DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR .....	i
ABSTRAK .....	iii
ABSTRACT .....	iv
DAFTAR ISI .....	v
DAFTAR TABEL .....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	4
1.3 Tujuan Penelitian .....	4
1.4 Manfaat Penelitian .....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....	6
2.1 Metoda Perhitungan Kimia Komputasi .....	6
2.2 Interaksi Intermolekuler .....	7
2.2.1 Potensial intermolekuler .....	7
2.2.2 <i>Two-body potentials</i> .....	9
2.3 Metode Simulasi <i>Monte Carlo</i> .....	10
2.3.1 Metode metropolis .....	11
2.3.2 Kondisi batas berulang .....	12
2.3.3 Aturan bayangan terkecil .....	13
2.4 Simulasi <i>Monte Carlo</i> Pada Logam Transisi .....	14
2.5 Tahapan Simulasi <i>Monte Carlo</i> .....	17
BAB III METODE PENELITIAN .....	23
3.1 Tempat Penelitian .....	23
3.2 Alat dan Bahan Penelitian Simulasi .....	23
3.2.1 Alat penelitian .....	23
3.2.2 Bahan penelitian simulasi .....	24
3.2.2.1 <i>Two-body potentials</i> H <sub>2</sub> O – H <sub>2</sub> O .....	25
3.2.2.2 <i>Two-body potentials</i> Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O .....	26
3.3 Prosedur Penelitian .....	28
3.3.1 Diagram alir penelitian .....	28
3.3.2 Simulasi <i>Monte Carlo</i> .....	29
3.3.2.1 Simulasi <i>Monte Carlo</i> .....	29
3.3.2.2 Analisis hasil simulasi <i>Monte Carlo</i> .....	32
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	36
4.1 Korelasi Antara Himpunan Basis Dengan <i>Two-Body Potentials</i> .....	36
4.2 Simulasi <i>Monte Carlo</i> Sistem Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O .....	38
4.3 Analisa Struktur Sistem Ion Ni <sup>2+</sup> Dalam Air .....	42

4.3.1 Fungsi distribusi radial (FDR) .....	42
4.3.2 Fungsi distribusi angka solvasi .....	47
4.3.3 Fungsi distribusi sudut ikatan .....	50
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>53</b>
5.1 Kesimpulan .....	53
5.2 Saran .....	54
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>55</b>
<b>SENARAI</b>	
<b>LAMPIRAN</b>	



## DAFTAR TABEL

Nomor	Judul Tabel	Halaman
2.1	Jumlah molekul H <sub>2</sub> O di solvasi lapis pertama pada beberapa kation hasil eksperimen dan hasil simulasi .....	16
3.1	Fungsi potensial interaksi yang diperlukan untuk simulasi MC sistem Ni – H <sub>2</sub> O .....	25
3.2	Parameter fungsi <i>two-body potentials</i> H <sub>2</sub> O – H <sub>2</sub> O .....	26
3.3	Parameter fungsi <i>two-body potentials</i> Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O (Arindah, 2000) .....	27
3.4	Parameter fungsi <i>two-body potentials</i> Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O (Inada <i>et al.</i> , 2002) .....	27
4.1	Parameter dari interaksi atom O dan H dari H <sub>2</sub> O dan Ni <sup>2+</sup> pada persamaan (4.1) .....	37
4.2	Parameter dari interaksi atom O dan H dari H <sub>2</sub> O dan Ni <sup>2+</sup> pada persamaan (4.2) .....	37
4.3	Nilai karakteristik dari FDR untuk sistem Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	42
4.4	Nilai karakteristik dari FDR untuk sistem Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	42

## DAFTAR GAMBAR

Nomor	Judul Gambar	Halaman
1.	Kondisi batas berulang pada sistem dua dimensi (Leach, 1996) .....	13
2.	Aturan bayangan terkecil pada sistem dua dimensi (Leach, 1996) .....	14
3.	Fluktuasi energi sistem selama pencapaian kesetimbangan, meliputi energi kesetimbangan awal, pemanasan, pendinginan dan pencapaian kesetimbangan baru. (Ethica, 2002) .....	20
4.	Fungsi distribusi radial dari $\text{Co}^{2+}$ - $\text{O}/\text{Co}^{2+}$ - H dan bilangan integrasinya yang ditentukan dengan melibatkan <i>three-body potentials</i> (Ethica, 2000) .....	21
5.	Distribusi bilangan koordinasi hasil simulasi MC dengan melibatkan <i>three-body potentials</i> (Ethica, 2000).....	22
6.	Distribusi energi interaksi <i>three-body</i> pada lapis pertama untuk sistem yang terdiri dari 1 $\text{Co}^{2+}$ dan 215 ligan air (Ethica, 2002) .....	22
7.	Fluktuasi energi sistem selama pencapaian kesetimbangan, meliputi energi kesetimbangan awal, pemanasan dan pendinginan dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	39
8.	Fluktuasi energi sistem selama pencapaian kesetimbangan, meliputi energi kesetimbangan awal, pemanasan dan pendinginan dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	39
9.	Fluktuasi energi sistem dengan 3 juta konfigurasi pada saat <i>sampling</i> dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	41
10.	Fluktuasi energi sistem dengan 3 juta konfigurasi pada saat <i>sampling</i> dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	41
11.	Fungsi distribusi radial beserta bilangan integrasinya dari simulasi MC pada sistem Ni – H <sub>2</sub> O dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	43



12.	Fungsi distribusi radial beserta bilangan integrasinya dari simulasi MC pada sistem Ni – H <sub>2</sub> O dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	43
13.	Ilustrasi proyeksi struktur solvasi lapis pertama ion Ni <sup>2+</sup> dalam molekul air dari hasil simulasi MC dalam dua dimensi dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	46
14.	Ilustrasi proyeksi struktur solvasi lapis pertama ion Ni <sup>2+</sup> dalam molekul air dari hasil simulasi MC dalam dua dimensi dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	46
15.	Distribusi angka solvasi pada solvasi lapis pertama dan kedua dari sistem Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	47
16.	Distribusi angka solvasi pada solvasi lapis pertama dan kedua dari sistem Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	48
17.	Distribusi sudut ikatan sistem H <sub>2</sub> O – Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O pada solvasi lapis pertama dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	50
18.	Distribusi sudut ikatan sistem H <sub>2</sub> O – Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O pada solvasi lapis pertama dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	50
19.	Ilustrasi struktur solvasi ion Ni <sup>2+</sup> pada solvasi lapis pertama dalam perspektif 3 dimensi dengan menggunakan persamaan (4.1) .....	52
20.	Ilustrasi struktur solvasi ion Ni <sup>2+</sup> pada solvasi lapis pertama dalam perspektif 3 dimensi dengan menggunakan persamaan (4.2) .....	52

## DAFTAR LAMPIRAN

<b>Nomor</b>	<b>Judul Lampiran</b>
1.	Distribusi angka solvasi
2.	Distribusi sudut ikatan
4.	Energi <i>cluster</i>



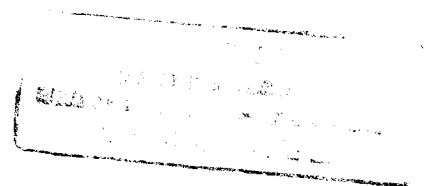
# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Sistem cairan yang terdapat di alam kebanyakan terdiri atas campuran beberapa komponen baik pelarut maupun zat terlarut. Di dalam sistem cairan, campuran antara pelarut dan zat terlarut terdapat berbagai macam interaksi, baik interaksi antara pelarut-pelarut maupun pelarut-zat terlarut. Berbagai kajian telah dilakukan baik secara eksperimen maupun teoritis untuk mengetahui karakteristik interaksi pada sistem cairan tertentu. Karakterisasi tersebut menyangkut karakteristik struktur akibat sifat solvasi pelarut terhadap zat terlarut.

Struktur solvasi ion yang telah dikaji dapat menjadi dasar bagi interpretasi kuantitatif sifat-sifat keseimbangan dan kinetika reaksi kimia (Inada *et al.*, 1999). Solvasi ion merupakan suatu asosiasi akibat adanya interaksi antara molekul-molekul dari pelarut dengan ion-ion dari kristal ion yang terlarut. Semakin kecil ukuran suatu ion, maka semakin banyak molekul pelarut yang dapat melakukan asosiasi tersebut. Muatan ion juga mempengaruhi interaksi antara ion dengan molekul pelarut, dimana semakin rendah muatan ion akan memperlemah interaksinya dengan pelarut dan sebaliknya semakin tinggi muatan ion akan memperkuat interaksinya dengan pelarut. Hal ini dapat menyebabkan modifikasi pada struktur lokal serta perubahan secara dinamik pada molekul-molekul pelarut yang ada di sekitar ion tersebut. Hasil yang terjadi karena interaksi antara ion dengan molekul pelarut tersebut merupakan hubungan yang rumit dan bersifat



kompleks dengan melibatkan beberapa parameter, antara lain mobilitas ionik, ukuran, dan muatan ion tersebut (Milerio, 1979).

Metode penentuan struktur solvasi ion secara umum dibagi menjadi dua, yaitu secara ekperimental (metode hamburan dan spektroskopi), dan secara teoritis melalui simulasi komputer. Metode hamburan dapat digunakan untuk memperoleh data bilangan koordinasi atau faktor frekuensi pasangan atom dan jarak antar atom, sedangkan metode spektroskopi lebih banyak digunakan untuk mempelajari sifat dinamik ion dan molekul pelarut daripada sifat statisnya. Metode dengan menggunakan simulasi komputer antara lain adalah Dinamika Molekuler (*Molecular dynamic*, MD) dan *Monte Carlo* (MC). MD digunakan untuk mengetahui sifat struktur dan sifat dinamik sistem karena memasukkan faktor waktu dalam perlakuannya, sedangkan MC digunakan untuk mendapatkan informasi sifat struktur sistem yang statis.

Metode penentuan struktur solvasi ion secara ekperimental hanya dapat menjelaskan struktur solvasi ion pada lapis pertama, yakni adanya ikatan langsung antara ion logam dengan molekul ligan, dan belum dapat menjelaskan struktur solvasi ion pada lapis kedua, yakni adanya ikatan langsung antara molekul ligan dengan molekul ligan pada lapis pertama, seperti jumlah molekul air yang terkoordinasi dan jarak interaksi antara ion dan molekul air (Ohtaki dan Radnai, 1993). Oleh karena itu, pendekatan secara teoritis dengan menggunakan simulasi komputer diperlukan untuk menjelaskan kekurangan pada metode eksperimental.

Simulasi MC merupakan metode simulasi yang telah banyak digunakan untuk mengamati interaksi ion logam dengan pelarutnya, baik dalam keadaan

sistem ion-pelarut sendiri atau dalam pasangan antara ion logam dan halogen sebagai anion. Simulasi MC telah sukses digunakan pada beberapa penentuan struktur solvasi seperti hidrasi ion  $\text{Na}^+$  (Tanabe dan Rode, 1988), solvasi  $\text{Na}^+$  dan  $\text{Mg}^{2+}$  dalam pelarut amonia (Hannongbua, 1997), struktur solvasi  $\text{Cu}^{2+}$  dalam campuran amonia-air (Pranowo dan Rode, 2001), struktur solvasi preferensial ion  $\text{Zn}^{2+}$  dalam campuran amonia-air (Barroroh, 2003). Simulasi struktur solvasi  $\text{CuCl}_2$  dalam campuran amonia-air juga telah cukup sukses dilakukan (Pranowo, 1999) sehingga didapatkan informasi tentang kestabilan senyawa kompleks. Penentuan struktur solvasi  $\text{Ni}^{2+}$  baik dalam pelarut preferensial amonia-air (Widhiyanto, 2006) maupun dalam amonia saja (Qurrachman, 2005) juga telah dilakukan. Penentuan struktur solvasi  $\text{Ni}^{2+}$  dalam pelarut air juga telah dilakukan oleh Arindah (2000) dan Inada (2002).

Simulasi MC memerlukan potensial interaksi, yakni potensial yang timbul karena adanya interaksi antara ion logam dengan molekul pelarut, sebagai masukan (*input*). Potensial interaksi berkaitan erat dengan struktur, sehingga potensial interaksi yang berbeda sangat dimungkinkan menghasilkan struktur yang berbeda untuk jenis ion logam pusat dan ligan yang sama. Dalam penelitian ini akan dilakukan penentuan struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam air menggunakan dua macam potensial interaksi yang berbeda yang diambil dari literatur Arindah (2000) dan Inada (2002). Untuk mengetahui sejauh mana pengaruh potensial interaksi yang berbeda terhadap struktur yang dihasilkan maka dilakukan perbandingan antara potensial interaksi Arindah (2000) dengan Inada (2002). Perbandingan kedua potensial interaksi ini untuk mengetahui manakah diantara

kedua potensial interaksi tersebut yang menghasilkan struktur solvasi mendekati eksperimen, yaitu sebesar 6 molekul ligan H<sub>2</sub>O yang mensolvasi ion Ni<sup>2+</sup> (Inada, *et al.*, 2002).

## 1.2 Rumusan Masalah

Sesuai dengan latar belakang masalah, akan dilakukan penentuan struktur solvasi ion Ni<sup>2+</sup> dalam air dengan simulasi MC menggunakan **dua potensial interaksi** yang berbeda. Maka dapat diperoleh dua buah rumusan masalah sebagai berikut.

1. Apakah potensial interaksi yang berbeda akan menyebabkan jumlah molekul ligan H<sub>2</sub>O yang berbeda, baik pada lapis pertama maupun lapis kedua ?
2. Apakah potensial interaksi yang berbeda akan menyebabkan perbedaan struktur solvasi ion Ni<sup>2+</sup> dalam pelarut air ?

## 1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data struktur solvasi ion Ni<sup>2+</sup> dalam pelarut air dengan menggunakan simulasi MC yang melibatkan dua macam *two-body potentials*, yakni potensial interaksi antara ion Ni<sup>2+</sup> dengan molekul air, yang berbeda.

#### 1.4 Manfaat Penelitian

1. Memperoleh data-data tentang struktur maupun sifat solvasi yang terjadi pada ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam pelarut  $\text{H}_2\text{O}$  pada lapis kedua yang belum dapat diperoleh pada penelitian secara eksperimental.
2. Dapat menunjang berbagai penelitian berbasis kimia komputasi dan mendukung data-data yang telah diperoleh secara eksperimental.
3. Membantu memajukan sistem pendidikan di Indonesia terutama di bidang kimia komputasi sesuai dengan perkembangan teknologi komputer.



## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1 Metode Perhitungan Kimia Komputasi

Secara garis besar, metode perhitungan pada kimia komputasi ada tiga macam, yaitu : (1) metode *Molecular Mechanic* (MM), berupa pernyataan aljabar sederhana tanpa melibatkan fungsi gelombang atau kerapatan elektron total, (2) metode semi empiris, yang berdasarkan dari mekanika kuantum dengan penyederhanaan untuk mempermudah perhitungan, (3) metode *ab initio*, yang murni menggunakan perhitungan kuantum, tanpa menggunakan data eksperimen serta penyederhanaan.

Metode *ab initio* digunakan sebagai pendekatan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger. Istilah *ab initio* digunakan untuk menerangkan bagaimana persamaan Schrödinger diselesaikan. *Ab initio* menyelesaikan persamaan secara eksak dan semua elektron yang ada diperhitungkan. Metode *ab initio* memiliki keunggulan daripada metode MM dan semiempiris, yaitu tidak memerlukan data empiris sehingga menghasilkan data yang lebih akurat daripada metode MM dan semi empiris. Namun demikian, metode *ab initio* juga memiliki kelemahan jika dibandingkan dengan kedua metode lainnya, yaitu hanya mampu menghitung energi untuk molekul kecil, sedangkan semi empiris maupun MM bisa digunakan untuk menghitung energi pada molekul besar. Cara untuk mengatasi kelemahan ini adalah dengan menggunakan metode gabungan yaitu *Quantum Mechanic / Molecular Mechanic* (QM/MM). Metode ini dapat



digunakan untuk molekul-molekul besar, dimana energi dan kerapatan elektron dari gugus fungsinya dihitung dengan mekanika quantum, sedangkan bagian terbesar molekul sisanya dihitung dengan mekanika molekuler (Leach, 1996).

## **2.2 Interaksi Intermolekuler**

Interaksi yang umum terjadi pada molekul-molekul dapat menghasilkan gaya tarik ataupun gaya tolak. Hal ini dapat diamati dari interaksi antara molekul-molekul gas mulia. Pada temperatur yang rendah gerak molekul yang lambat menyebabkan adanya gaya tarik antara molekul untuk membentuk fasa cair. Atom-atom gas mulia terpisah pada keseimbangan pada jarak antar partikel tertentu. Jika jarak antar partikel ini dikurangi, maka akan terjadi suatu gaya tolakan yang kuat di antara molekul-molekul tersebut. Untuk menjelaskan hal ini digunakan suatu energi potensial yang disebut sebagai energi potensial intermolekuler yang merupakan fungsi jarak antar partikel (Pranowo dan Rode, 2001). Jika atom-atom saling mendekat dari jarak yang sangat jauh, maka nilai energi potensialnya akan turun dari nol menjadi negatif sampai pada jarak dimana terjadi kesetimbangan. Hal ini menunjukkan adanya gaya tarik antar molekul. Jika atom-atom tersebut didekatkan lagi hingga melampaui diameter atomiknya, maka energi potensialnya akan meningkat tajam dan mencapai nilai positif. Hal ini menunjukkan adanya gaya tolak antar molekul (Kihara, 1978).

### **2.2.1 Potensial intermolekuler.**

Untuk menentukan energi potensial intermolekuler dibutuhkan keberadaan energi pada jarak pendek dan energi pada jarak panjang. Energi pada jarak pendek

dapat dihasilkan dari adanya tumpang tindih fungsi gelombang atau orbital-orbital dari atom-atom atau molekul-molekul yang mengadakan interaksi. Energi jarak pendek dapat diperoleh dengan melakukan variasi jarak  $R$ , yaitu jarak antara molekul – molekul tersebut, sebagai fungsi  $\exp(-kR)$ , dengan  $k$  adalah konstanta Born-Mayer (Ethica, 2002). Energi pada jarak panjang dibagi menjadi tiga tipe yaitu energi elektrostatik, induksi dan dispersi dari orbital dari atom-atom atau molekul-molekul yang mengadakan interaksi. Untuk memperoleh energi jarak panjang dilakukan juga variasi jarak  $R$  sebagai  $R^{-n}$ , dengan melibatkan energi coulombik antara muatan ( $n = 1$ ). Potensial intermolekul,  $V^{int}$ , dapat dibagi menjadi 4 suku, yaitu

$$V^{int} = V^{short} + V^{elec} + V^{ind} + V^{disp} \dots\dots\dots (2.1)$$

Suku-suku tersebut merupakan energi yang dihasilkan oleh jarak dekat ( $V^{short}$ ), potensial elektrostatik ( $V^{elec}$ ), potensial induksi ( $V^{ind}$ ) dan potensial dispersi ( $V^{disp}$ ).  $V^{short}$  menggambarkan interaksi tolak menolak yang mengalami pengurangan secara eksponensial sebagai fungsi jarak antar molekul.  $V^{elec}$  mewakili interaksi antara momen multipol pada masing-masing spesi.  $V^{ind}$  menggambarkan efek polarisasi awan muatan untuk masing-masing spesi melalui medan statik polarisasi karena adanya pengaruh medan statik polarisasi spesi yang lain.  $V^{disp}$  menggambarkan interaksi yang menyebabkan korelasi perubahan multipol secara cepat pada dua spesi (Ethica, 2002).

Untuk melakukan suatu pendekatan dalam simulasi komputer, biasanya digunakan metode perhitungan energi potensial secara eksak pada sistem yang

berisi  $N$  partikel ke dalam suku yang menyatakan molekul pasangan, *triplets*, ... ,*N-tuplets*.

$$V(1,2,3,\dots,N) = \sum_i \sum_{j>i} V_2(i,j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} V_3(i,j,k) + \dots \quad \dots\dots\dots(2.2)$$

indeks  $i,j,k, \dots$  mengacu pada jumlah molekul dalam suatu sistem. Suku pertama dalam persamaan  $V_2$  adalah *two-body potentials* yang memberikan energi interaksi pasangan molekul. Suku ini mempunyai kontribusi terbesar pada penentuan eksak energi potensial  $V$ . Suku  $V_3$  adalah *three-body potentials*, menghitung energi fraksi yang disebabkan dari polarisasi dan tolakan sterik yang disebut dengan efek *three-body*. Kontribusi suku  $V_3$  di dalam cairan mempunyai nilai positif (tolakan) sekitar 10 – 15 % dari total energi. Suku ketiga ( $V_4$ ) dan seterusnya diharapkan mempunyai kontribusi yang lebih kecil bila dibandingkan dengan kontribusi dari suku pertama dan suku kedua. Suku  $V_3$  dapat digunakan bila terdapat ketidaksesuaian antara data simulasi komputer dengan data eksperimen

### 2.2.2 *Two body potentials*.

*Two-body potentials* menggambarkan energi potensial di antara dua partikel yang dapat memberikan kontribusi terbesar sebagai potensial dasar unsur utama penyusun potensial interaksi. *Two-body potentials* ini dapat diperoleh melalui persamaan :

$$V_2(i,j) = E(i,j) - (E(i) + E(j)) \quad \dots\dots\dots(2.3)$$

$V_2(i,j)$  adalah *two-body potentials*,  $E(i,j)$  adalah energi sistem pasangan dan  $E(i)$  serta  $E(j)$  adalah energi partikel individu.

Bentuk fungsional standar yang biasanya digunakan dalam simulasi komputer adalah potensial 12-6 *Lennard-Jones*. Fungsi ini dapat dikombinasikan dengan suku Coulomb untuk menggambarkan interaksi tipe ion-ion dan ion-dipol (Ethica, 2002).

$$V_2(i, j) = \sum_{a \in i} \sum_{b \in j} \frac{q_a q_b}{r_{ab}} + \frac{A_{ab}}{r_{ab}^{-12}} - \frac{B_{ab}}{r_{ab}^{-6}} \dots\dots\dots(2.4)$$

Koefisien  $A_{ab}$  dan  $B_{ab}$  merupakan parameter teroptimasi, yang menggambarkan interaksi antara perbedaan *sites* dan ditentukan sedemikian rupa sehingga fungsi potensial menghasilkan suatu seri data energi secara teoritis atau eksperimen. Suku  $r_{ab}^{-12}$  atau dapat juga dinyatakan dalam bentuk eksponensial mendominasi jarak pendek dan merupakan model tolakan antara partikel-partikel pada keadaan yang sangat dekat satu sama lain. Ketika awan elektron sekitar atom mulai tumpang tindih, energi sistem meningkat dengan tajam. Suku  $r_{ab}^{-6}$  mendominasi jarak jauh dengan berisikan bagian tarik-menarik. Suku ini diambil dari gaya dispersi Van Der Waals serta interaksi dipol-dipol. Untuk dapat menggambarkan interaksi antar molekul pada jarak panjang serta interaksi muatan-muatan maka diperlukan suku Coulomb ( $\frac{q_a q_b}{r_{ab}}$ ) yang dimasukkan ke dalam persamaan *Lennard-Jones* (Ethica, 2002).

### 2.3 Metode Simulasi *Monte Carlo*

Simulasi dengan MC dapat menentukan bilangan hidrasi dari ion-ion individu, sehingga mampu menghitung distribusi bilangan hidrasi ion-ion. Ide

dasar metode MC adalah bahwa masalah matematis dapat diolah dengan menemukan analog probabilitas yang selanjutnya diselesaikan dengan eksperimen pengambilan sampel *stochastic*. Data keluaran yang berupa energi merupakan hasil dari pembuatan bilangan acak yang melibatkan operasi aritmatika dan logika bilangan terbatas. Seiring dengan berkembangnya teknologi komputer dengan kapasitas perangkat keras yang semakin besar, maka pekerjaan simulasi akan dapat dikerjakan dengan baik dan cepat oleh komputer. Prosedur MC yang umum digunakan berdasarkan atas algoritma dikemukakan oleh Metropolis *et al.*, (1953)

### 2.3.1 Metode metropolis.

Metode Metropolis merupakan metode dimana pemilihan konfigurasi dilakukan secara acak kemudian diukur dengan menggunakan  $\exp\left(\frac{\varepsilon_i}{k_B T}\right)$ . Konfigurasi yang mempunyai pengaruh kecil pada hasil fungsi rata-rata akan diabaikan untuk mempercepat prosedur. Sedangkan konfigurasi yang sesuai dengan hasil fungsi rata-rata akan diperhatikan.

Dengan menggunakan metode MC, konfigurasi-konfigurasi yang didapatkan dari pergerakan acak atom atau molekul tunggal akan menghasilkan energi. Energi yang dihasilkan ini kemudian dihitung dengan fungsi energi potensial. Suatu konfigurasi akan dapat diterima jika energi yang diperoleh lebih rendah dari energi dalam keadaan awal. Konfigurasi yang diterima ini akan dijadikan sebagai awalan untuk konfigurasi selanjutnya (Metropolis *et al.*, 1953).

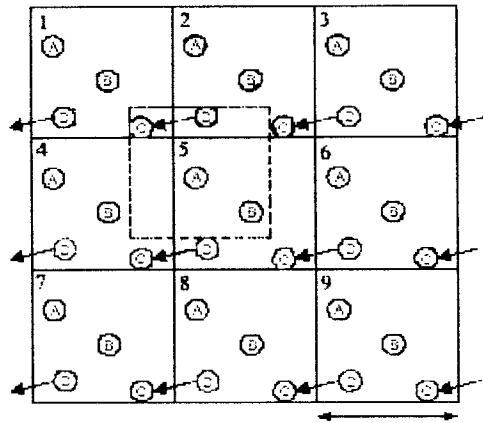
Secara umum, metode MC bertujuan untuk menghasilkan lintasan acak di dalam ruang fasa sampel secara statistik. Lintasan adalah suatu rangkaian titik-titik dari ruang fasa dengan diikuti oleh sistem sepanjang waktu evaluasi sistem.

Titik-titik ruang fasa ini berupa konfigurasi-konfigurasi yang didistribusikan sesuai dengan kerapatan probabilitas sebelumnya, sehingga Metode MC menggunakan teknik sampling untuk menyelesaikan integral multidimensi (Metropolis *et al.*, 1953).

### 2.3.2 Kondisi batas berulang.

Dalam suatu metode simulasi, sistem harus dibuat sedemikian rupa agar dapat mewakili dari keadaan sebenarnya. Batas kotak simulasi harus diperlakukan dengan benar agar memungkinkan untuk mengetahui sifat makroskopik dengan menggunakan jumlah partikel yang lebih kecil. Dengan menggunakan kondisi batas berulang, suatu simulasi dapat dilakukan dengan jumlah partikel yang kecil namun bisa mewakili partikel dalam keadaan fasa ruah. Dengan demikian partikel tersebut tetap mengalami gaya-gaya sebagaimana jika partikel tersebut dalam fasa ruah. Dalam kondisi batas berulang, partikel yang kecil tersebut direplikasi ke segala arah sehingga dapat memberikan suatu deret periodik (Leach, 1996). Kotak dua dimensi untuk menggambarkan kondisi batas berulang sistem dua dimensi ditunjukkan pada Gambar 1.



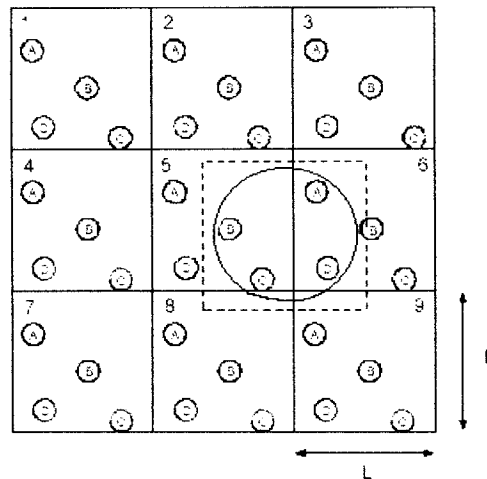


Gambar 1. Kondisi batas berulang pada sistem dua dimensi (Leach, 1996)

### 2.3.3 Aturan bayangan terkecil.

Kendala yang dihadapi saat melakukan perhitungan energi non ikatan adalah waktu yang dibutuhkan sangat lama. Hal ini karena jumlah suku non ikatan yang perlu dievaluasi meningkat sesuai kuadrat jumlah atom yang disebut order  $N^2$ . Perhitungan interaksi non ikatan ini dilakukan untuk setiap pasangan atom dalam sistem.

Suatu cara yang paling umum untuk memperlakukan interaksi non ikatan adalah dengan menggunakan batas non ikatan yaitu dengan menerapkan suatu aturan bayangan terkecil. Dalam aturan bayangan terkecil, setiap atom hanya ‘melihat’ paling banyak satu bayangan setiap atom lain dalam sistem. Bayangan diulang dengan jumlah tak hingga dengan metode batas berulang. Energi non ikatan dihitung dengan atom terdekat atau bayangannya (Leach, 1996) seperti yang terlihat pada Gambar 2.



Gambar 2. Aturan bayangan terkecil pada sistem dua dimensi (Leach, 1996)

Interaksi jarak-pendek dapat menurun dengan cepat yang dapat diabaikan diluar jarak yang disebut keterbatasan pembatas. Hal ini menyebabkan munculnya parameter jarak *cut-off* ( $r_c$ ) dan pengabaian interaksi antar partikel yang dipisahkan oleh jarak yang lebih panjang dari  $r_c$ . Pendekatan ini mengakibatkan program lebih sederhana dan daya komputer yang diperlukan untuk perhitungan menjadi lebih kecil (Arindah, 2000).

#### 2.4 Simulasi *Monte Carlo* Pada Logam Transisi

Metode MC telah banyak digunakan untuk mengetahui bagaimana interaksi antara pelarut dengan zat terlarut. Zat terlarut seperti logam dengan pelarutnya akan berinteraksi dalam sistem ion-pelarut sendiri atau dalam pasangan antara ion logam sebagai kation dan halogen sebagai anion. Beberapa macam ion logam yang telah diteliti meliputi logam alkali, alkali tanah dan logam-logam transisi baik periode pertama maupun periode kedua.



Nikel merupakan unsur logam transisi yang di dalam tabel periodik berada pada baris pertama logam transisi atau termasuk pada golongan VIII B periode 4. Ni mempunyai 28 elektron dengan konfigurasi elektron  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$ . Di dalam air, nikel dapat berperan sebagai kation dengan bilangan oksidasi +2 (Shriver dan Atkins, 1994).

Nikel (II) juga berperan di dalam pembentukan ikatan peptida khususnya sebagai katalis. Ikatan peptida berasal dari asam format amonia dan glisin amonia. Studi teoritis mengenai hal tersebut telah dilakukan oleh Remko dan Rode (2000). Reaksi pembentukan ikatan peptida tersebut juga menghasilkan air sebagai hasil sampingnya.

Untuk ion logam  $Ni^{2+}$ , masih dalam tahap penelitian eksperimental (Pfund *et al.*, 1994; Palmer *et al.*, 1996; Marcus *et al.*, 1999 dan Inada *et al.*, 1999). Beberapa publikasi tentang solvasi  $Ni^{2+}$  dengan difraksi sinar-X (Camuniti, 1982) difraksi neutron (Neilson dan Enderby, 1983) difraksi EXAFS (Licheri *et al.*, 1983). Penentuan bilangan hidrasi dari ion  $Ni^{2+}$  secara eksperimen untuk lapis pertama antara 5,8 s.d. 6,8 (Neilson *et al.*, 1978), namun data untuk lapis ke dua belum pernah didapatkan (Neilson *et al.*, 1978; Powel dan Neilson, 1990; Newsome *et al.*, 1981). Adanya beberapa fakta ini mendorong riset tentang solvasi  $Ni^{2+}$  secara *ab initio* untuk melengkapi dan membandingkan data secara eksperimental.

Studi terhadap struktur solvasi sistem yang terdiri dari campuran ion logam dan pelarut telah dilakukan baik secara eksperimen maupun simulasi. Tabel 2.1

menunjukkan contoh jumlah molekul H<sub>2</sub>O di solvasi lapis pertama beberapa kation hasil eksperimen dan hasil simulasi.

**Tabel 2.1** Jumlah molekul H<sub>2</sub>O di solvasi lapis pertama pada beberapa kation hasil eksperimen dan hasil simulasi

Kation (M)	Eksperimen				Simulasi			
	I <sup>(1)</sup>		II <sup>(2)</sup>		Potensial 2B		Pot. 2B+3B	
	Hasil	Metode	Hasil	Metode	Hasil	Metode	Hasil	Metode
Mn <sup>2+</sup>	6,0		6,0	XRD	-	-	-	-
Fe <sup>2+</sup>	5,9		6,0	XRD	-	-	6	MD <sup>(1)</sup>
Co <sup>2+</sup>	6,0		6,0	XRD	8	MC <sup>(3)</sup>	6	MC <sup>(8)</sup>
Ni <sup>2+</sup>	5,5		6,0	XRD	8	MC <sup>(4)</sup>	6	MC <sup>(9)</sup>
Cu <sup>+</sup>	-		-	-	6	MC <sup>(5)</sup>	-	
Cu <sup>2+</sup>	6,0		6,0	XRD	8	MC <sup>(6)</sup>	6	MC <sup>(6)</sup>
Zn <sup>2+</sup>	4,1		6,0	XRD	8	MC <sup>(7)</sup>	6	MC <sup>(7)</sup>

Catatan:

- (1) Ohtaki, H., Radnai, T., 1993, Structure and Dynamics of Hydrated Ions, *Chem. Rev.*, 93, 1157-1204.
- (2) Inada, Y., Hayashi, H., Sugimoto, K., Funahashi, S., 1999, Solvation Structures of Manganese(II), Iron(II), Cobalt(II), Nickel(II), Copper(II), Zinc(II), and Gallium(III), Ions in Methanol, Ethanol, Dimethyl Sulfoxide, and Trimethyl Phosphate as Studied by EXAFS and Electronics Spectroscopies, *J. Phys. Chem.*, 103, 1401-1406.
- (3) Denny, K., 2001, *Penentuan Struktur Solvasi Co (II) dalam Air Metode Simulasi Monte Carlo*, Skripsi, Jurusan Kimia, FMIPA UGM, Yogyakarta.
- (4) Arindah T., 2000, *Solvation Structure Determination of Ni<sup>2+</sup> Ion In Water by Monte Carlo Simulation Method*, Thesis, Gadjah Mada University, Yogyakarta, Indonesia.
- (5) Pranowo, H. D., Setiaji, A. H., Rode, B. M., 1999, Cu<sup>+</sup> in Liquid Ammonia and in Water: Intermolecular Potential and Monte Carlo Simulation, *J. Phys. Chem. A.*, 103, 11115-11120.
- (6) Texler, N. R., Rode, B. M., 1991, Monte Carlo Simulations of Cu(II) in Water with 3-Body Potential, *J. Phys. Chem.*, 99, 15714-15717.
- (7) Marini, G., Texler, N. R., Rode, B. M., 1996, Monte Carlo Simulation of Zn(II) in Water Including Three Body Effect, *J. Phys. Chem.*, 100, 6808-6813.
- (8) Ethica, S. N., 2002, *Simulasi Monte Carlo Co(II) dalam Air Melibatkan Potensial Badan Tiga*, Thesis, Jurusan Kimia, FMIPA UGM, Yogyakarta.
- (9) Inada, Y., Mohammed, A. M., Loeffler, H. H., Rode, B. M., 2002, Hydration Structure and Water Exchange Reaction of Nickel (II) Ion: Classical and QM/MM Simulations, *J. Phys. Chem.A.*, 106, 6783-6791.

Tabel di atas menunjukkan hasil eksperimen beberapa kation didapat dari metode difraksi sinar X dengan kelimpahan H<sub>2</sub>O di solvasi lapis pertama rata-rata adalah 6,0. Hasil yang didapat ini mendekati hasil dari simulasi dengan melibatkan *three-body potentials* yaitu kelimpahan H<sub>2</sub>O di solvasi lapis pertama rata-rata adalah 6,0 baik secara metode MD maupun metode MC. Sedangkan hasil simulasi yang melibatkan *two-body potentials* sedikit menyimpang dari hasil eksperimen.

## 2.5 Tahapan Simulasi *Monte Carlo*

Tahapan simulasi MC dimulai setelah didapatkan energi potensial sebagai energi sistem, yang sudah dianggap statis. Dalam simulasi MC terdapat empat tahapan simulasi.

### 1. *Penentuan Konfigurasi Awal*

Konfigurasi awal digunakan untuk memulai tahapan simulasi dari beberapa rangkaian simulasi. Tahapan ini sangatlah vital, karena sangat menentukan rangkaian tahapan berikutnya. Hal ini karena jika konfigurasi yang dihasilkan pada konfigurasi awal masih memiliki energi yang cukup tinggi, maka akan menyebabkan ketidakstabilan dalam sistem. Konfigurasi ini harus dapat mendekati keadaan seperti yang akan diasumsikan (Barroroh, 2003).

Metode yang umum dan sederhana dalam permodelan struktur cairan adalah menempatkan beberapa molekul secara acak di dalam unit simulasi, untuk menghasilkan densitas cairan pada suhu tertentu. Teknik ini memiliki kelemahan yaitu konfigurasi yang dihasilkan berada pada posisi yang saling tumpang tindih

antara molekul yang ditempatkan secara acak. Keadaan ini menghasilkan suatu energi interaksi yang tinggi pada sistem yang akan menurun secara bertahap pada proses keseimbangan. Hal ini tentu saja akan menyebabkan lamanya waktu yang diperlukan untuk mencapai keadaan setimbang. Masalah ini dapat diatasi dengan memasukkan kriteria tertentu untuk jarak dekat antar partikel yang masih diijinkan.

Konfigurasi awal dapat juga dipilih dari salah satu kisi kristal. Kisi yang paling umum adalah kisi kubus pusat muka (*face center cubic – fcc*). Struktur ini mengandung  $4M^3$  titik (  $M = 2, 3, 4, \dots$  ). Berdasarkan hal tersebut, simulasi biasanya menggunakan jumlah atom atau molekul 108, 256, 525, 784 dan seterusnya (Barroroh, 2003).

## 2. Pencapaian Kesetimbangan

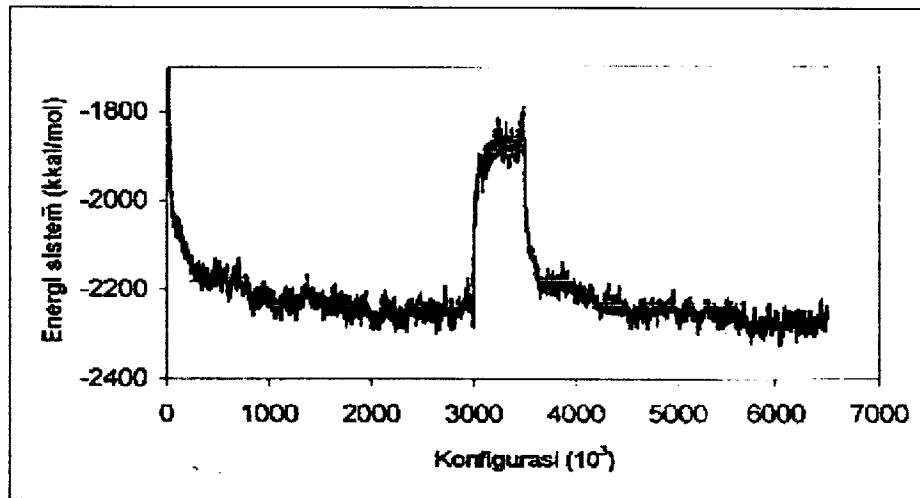
Tahapan pencapaian kesetimbangan akan berlangsung saat konfigurasi awal sampai sistem berada dalam keadaan setimbang. Proses penyeimbangan akan terus berlangsung hingga nilai sifat-sifat mencapai keadaan stabil. Sifat-sifat sistem yang dikontrol meliputi kuantitas termodinamika seperti energi, tekanan, dan suhu.

Dalam tahapan ini terdapat sistem pengontrolan untuk mengawasi nilai energi selama proses simulasi. Terdapat beberapa parameter yang di kontrol seperti fungsi distribusi radial, parameter yang berhubungan dengan translasi dan rotasi, dan kuadrat rata-rata pergantian molekul dari posisi awal (Barroroh, 2003).

Untuk mencapai keadaan setimbang seringkali terdapat kesulitan pada penentuan keadaan konfigurasi agar tercapai keadaan sistem yang setimbang. Hal

ini bergantung pada konfigurasi awal dan algoritma yang digunakan untuk pergantian partikel pada umumnya dan komposisi sistem pada khususnya. Informasi struktural utamanya didapatkan dari fungsi distribusi radial antara semua spesies dalam sistem simulasi. Sistem yang tersusun  $N$  molekul pelarut dan satu molekul atau atom terlarut dikarakterisasikan melalui  $N(N-1)$  jarak pelarut-pelarut, dan hanya  $N$  jarak pelarut-zat terlarut. Walaupun keseimbangan telah dicapai, tetapi keseimbangan ini harus dapat dijaga untuk menghindari kesalahan pada saat perhitungan fungsi distribusi radial (FDR) interaksi pelarut zat terlarut.

Hasil dari simulasi kemudian dibuat grafik energi sistem lawan konfigurasi simulasi seperti yang ditunjukkan dalam Gambar 3. Dalam gambar tersebut dapat dilihat bahwa setelah 3.000.000 konfigurasi dilakukan, sistem telah mencapai kondisi setimbang. Parameter sistem yang digunakan untuk memeriksa kesetimbangan sistem adalah energi sistem. Pendefinisian bahwa suatu sistem telah mencapai setimbang adalah apabila energi sistemnya mencapai nilai yang konstan. Pengujian kesetimbangan sistem terjadi saat konfigurasi mencapai 3.000.000. Pada konfigurasi tersebut suhu sistem dinaikkan sehingga energi sistem naik dengan drastis. Suhu kemudian diturunkan kembali ke keadaan semula, sehingga energi sistem turun kembali dan mencapai kesetimbangan.



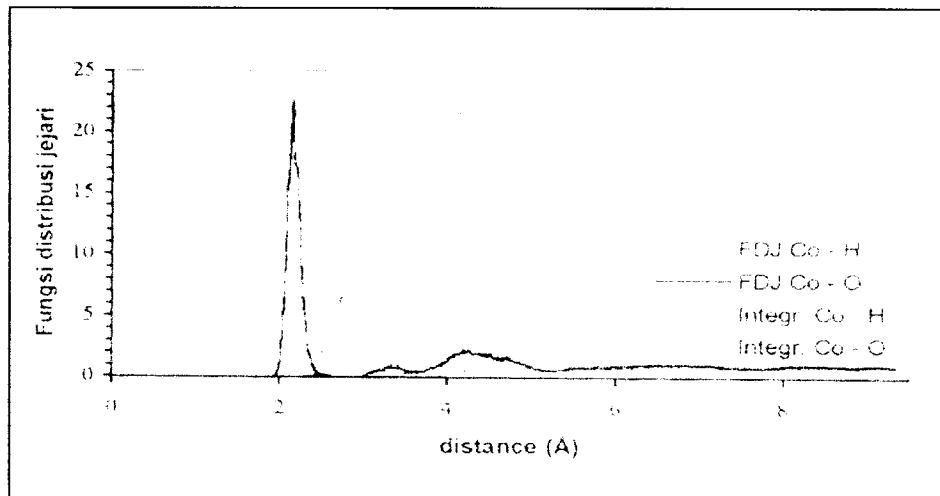
Gambar 3. Fluktuasi energi sistem selama pencapaian kesetimbangan, meliputi energi kesetimbangan awal, pemanasan, pendinginan dan pencapaian kesetimbangan baru. (Ethica, 2002)

Gambar 3 menunjukkan bahwa fluktuasi energi sistem relatif tetap antara sebelum dan sesudah pemanasan. Hal ini berarti bahwa sistem telah mencapai kesetimbangan dan tahap pengambilan sampel layak dilakukan.

### 3. Pengambilan Sampel

Teknik pengambilan sampel dilakukan dengan memilih secara acak (*random*) dari suatu distribusi. Sampel yang diambil merupakan sampel representatif dari segi konfigurasi yang telah diketahui. Sampel yang representatif tersebut dapat diketahui setelah pencapaian dua keadaan, yaitu : (1) saat sistem mencapai keadaan setimbang, (2) sampel rata-rata mendekati sifat yang sebenarnya jika jumlah sampel mendekati tak terhingga. Sifat-sifat sistem sebenarnya merupakan rata-rata waktu dari pengukuran sifat sistem pada setiap saat. Selama proses penarikan sampel, sifat sistem seperti energi dapat dihitung

dan pada interval yang teratur konfigurasi sistem (koordinat atomik) direkam untuk selanjutnya dilakukan penganalisaan (Barroroh, 2003).

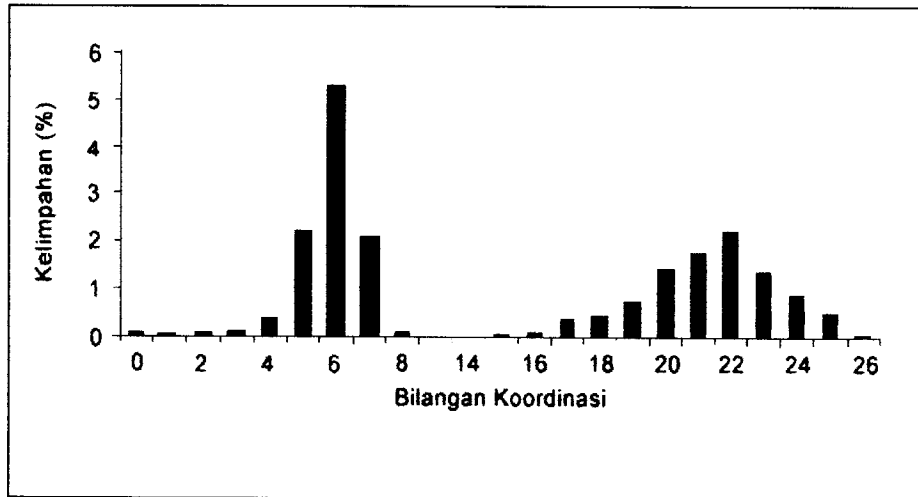


Gambar 4. Fungsi distribusi radial  $\text{Co}^{2+}\text{-O}/\text{Co}^{2+}\text{-H}$  dan bilangan integrasinya yang ditentukan dengan melibatkan *three-body potentials*. (Ethica, 2002)

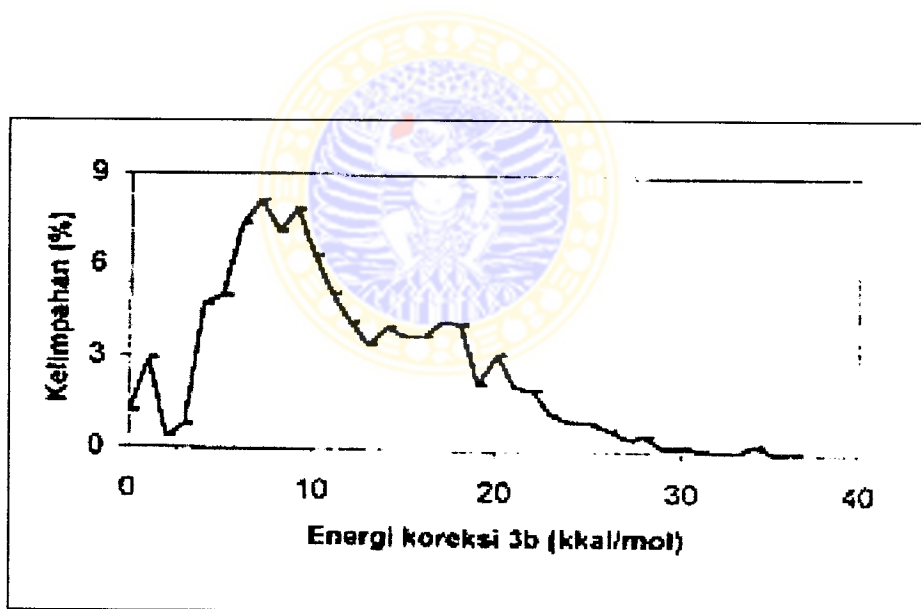
Gambar 4 merupakan hasil dari tahap pengambilan sampel (*sampling*) yang menunjukkan fungsi distribusi radial dan bilangan integrasi dari spesi yang berinteraksi.

#### 4. Analisis Hasil Simulasi

Simulasi akan menghasilkan data konfigurasi beserta energi sejumlah sampel yang diterima. Selanjutnya dilakukan analisis terhadap hasil yang diperoleh tersebut untuk mengetahui distribusi radial dari interaksi  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$ ; distribusi angka solvasi; distribusi energi interaksi; dan distribusi sudut ikatan  $\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{O}$ . Beberapa contoh hasil analisis simulasi dapat diamati pada Gambar 5 dan Gambar 6.



Gambar 5. Distribusi bilangan koordinasi hasil simulasi MC dengan melibatkan *three-body potentials*. (Ethica, 2002)



Gambar 6. Distribusi energi interaksi *three-body* pada lapis pertama untuk sistem yang terdiri dari 1  $\text{Co}^{2+}$  dan 215 ligan air. (Ethica, 2002)



## BAB III

### METODE PENELITIAN

#### 3.1 Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di rumah peneliti, Jl. Sambirogo II/N21 Surabaya.

#### 3.2 Alat dan Bahan Penelitian Simulasi

##### 3.2.1 Alat penelitian.

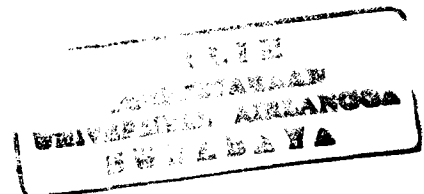
Penelitian ini adalah penelitian bidang kimia komputasi sehingga membutuhkan seperangkat komputer untuk mendukung proses simulasi. Peralatan yang digunakan ada dua jenis yaitu perangkat keras (*hardware*) dan perangkat lunak (*software*) komputer.

i. Perangkat keras.

Perangkat keras (*hardware*) komputer yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Personal Computer* (PC) dengan spesifikasi : *Central Proccesing Unit* (CPU) AMD 1,8 Ghz dengan memori 256 Mb dan *hard disk* 80 Gb.

ii. Perangkat lunak.

Perangkat lunak (*software*) yang digunakan dalam penelitian ini disesuaikan dengan tahapan penelitian dimana secara garis besar dibagi menjadi dua, yaitu tahap simulasi dan tahap analisis. Adapun perangkat lunak tersebut antara lain sebagai berikut.



1. *Monte Carlo (MC) Simulation L.1.2* (Rode dan Heinzle, 1995) yang merupakan perangkat lunak untuk tahap simulasi dengan modifikasi yang disesuaikan dengan sistem simulasi, yaitu Ni – H<sub>2</sub>O. Dalam *MC Simulation* terdapat beberapa sub-program yang penting diantaranya sebagai berikut.
  - a. *File S.f*, sebagai program utama.
  - b. *File STEP.f* untuk mendapatkan konfigurasi dalam simulasi.
  - c. *File RDVUP.f* untuk menghasilkan *Update Density Radial Vector*, RDV dan RDF.
  - d. *File CIL.f*, untuk menghitung potensial interaksi sistem *two-body*.
  - e. *File MC99* yang merupakan *file* hasil kompilasi dari program MC99.
2. *MC Simulation Analyzing* (Texler, 1995) yaitu perangkat lunak untuk tahap analisis dari hasil simulasi yang dimodifikasi sesuai sistem simulasi.
3. *Linux Vector Operating System* sebagai sistem operasi tempat dua perangkat lunak diatas dijalankan.

### 3.2.2 Bahan penelitian simulasi.

Bahan penelitian yang digunakan tergantung dari sistem simulasi. Untuk sistem Ni dalam H<sub>2</sub>O, diperlukan dua jenis fungsi potensial yaitu fungsi *two-body potentials* pelarut-pelarut (Jansco *et al.*, 1985), fungsi *two-body potentials* ion-pelarut (Arindah, 2000 dan Inada *et al.*, 2002). Secara lengkap jenis potensial interaksi tersebut disajikan dalam Tabel 3.1.

**Tabel 3.1** Fungsi potensial interaksi yang diperlukan untuk simulasi MC sistem Ni – H<sub>2</sub>O

Jenis interaksi	Potensial interaksi	Literatur
<i>Two-body potentials</i> pelarut – pelarut	H <sub>2</sub> O – H <sub>2</sub> O	Jansco, <i>et al.</i> , (1985)
<i>Two-body potentials</i> ion – pelarut	Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O	Arindah (2000)
	Ni <sup>2+</sup> – H <sub>2</sub> O	Inada, <i>et al.</i> , (2002)

### 3.2.2.1 *Two-body potentials* H<sub>2</sub>O – H<sub>2</sub>O.

*Two-body potentials* H<sub>2</sub>O – H<sub>2</sub>O menggunakan model CF2 (*central force model*) yang disusun oleh Jansco *et al.*, (1985) dengan bentuk sebagai berikut :

$$V_{2b} = V_{\text{Coulomb}} + V_{\text{OO}} + V_{\text{OH}} + V_{\text{HH}}$$

$$V_{\text{Coulomb}} = \frac{q_{\text{O}}q_{\text{O}}}{r_{\text{OO}}} + \frac{q_{\text{O}}q_{\text{H}}}{r_{\text{OH}}} + \frac{q_{\text{H}}q_{\text{H}}}{r_{\text{HH}}}$$

$$V_{\text{OO}} = A_1 \left\{ \frac{A_2}{r_{\text{OO}}} + \frac{A_3}{r_{\text{OO}}^4} - A_5 \left[ \exp\left(A_6 (r_{\text{OO}} - A_7)^2\right) + \exp\left(A_8 (r_{\text{OO}} - A_9)^2\right) \right] \right\}$$

$$V_{\text{OH}} = A_1 \left\{ \frac{A_{10}}{r_{\text{OH}}} - A_{11} r_{\text{OH}}^{12} - \frac{A_{13}}{\left[1 + \exp\left(A_{14} (r_{\text{OH}} - A_{15})\right)\right]} - \frac{A_{16}}{\left[1 + \exp\left(A_{17} (r_{\text{OH}} - A_{18})\right)\right]} \right\}$$

$$V_{\text{HH}} = A_1 \left\{ \frac{A_{19}}{r_{\text{HH}}} + \frac{A_{20}}{\left[1 + \exp\left(A_{21} (r_{\text{HH}} - A_{22})\right)\right]} \right\} \dots\dots\dots (3.1)$$

Keterangan :

- $A_1$  sampai  $A_{22}$  merupakan parameter-parameter fungsi *two-body potentials* H<sub>2</sub>O – H<sub>2</sub>O.

- b.  $\Delta V_{\text{Coulomb}}$ ,  $\Delta V_{\text{OO}}$ ,  $\Delta V_{\text{OH}}$ ,  $\Delta V_{\text{HH}}$  masing-masing menyatakan potensial Coulomb, potensial interaksi atom oksigen dengan oksigen, potensial interaksi atom oksigen dengan hidrogen dan potensial interaksi atom hidrogen dengan hidrogen.
- c.  $r_{\text{OO}}$ ,  $r_{\text{OH}}$ ,  $r_{\text{HH}}$  masing-masing menyatakan jarak interaksi atom oksigen dengan oksigen, jarak interaksi atom oksigen dengan hidrogen dan jarak interaksi atom hidrogen dengan hidrogen.
- d.  $q_{\text{O}}$  dan  $q_{\text{H}}$  masing-masing menyatakan besarnya muatan atom oksigen dan muatan atom hidrogen.

**Tabel 3.2** Parameter fungsi *two-body potentials*  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$

Atom	Muatan (Q)	Parameter
O	-0,6598	$A_1$ - $A_{12}$
H	0,3299	$A_{13}$ - $A_{22}$

Keterangan :

$A_1= 60,2718$ ;  $A_2= 144,629$ ;  $A_3= 26765,047$ ;  $A_4= 8,86$ ;  $A_5= 0,250$ ;  $A_6= -4,0$ ;  $A_7= 3,4$ ;  $A_8= -1,5$ ;  $A_9= 4,5$ ;  $A_{10}= -5,019$ ;  $A_{11}= 6,237$ ;  $A_{12}= 9,2$ ;  $A_{13}= 9,997$ ;  $A_{14}= 40,0$ ;  $A_{15}= 1,05$ ;  $A_{16}= 4,005$ ;  $A_{17}= 5,493$ ;  $A_{18}= 2,2$ ;  $A_{19}= 2,509$ ;  $A_{20}= 100,218$ ;  $A_{21}= 29,9$ ;  $A_{22}= 1,968$

### 3.2.2.2 *Two-body potentials* $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ .

*Two-body potentials*  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dari Arindah (2000) memiliki bentuk persamaan sebagai berikut :

$$\Delta E_{2b} = \sum_{i=1}^3 A_{iM} r_{iM}^{-5} + B_{iM} r_{iM}^{-9} + C_{iM} \exp(-D_{iM} r_{iM}) + q_1 q_M r_{iM}^{-1} \dots \dots \dots (3.2)$$

$A_{iM}$ ,  $B_{iM}$ ,  $C_{iM}$  dan  $D_{iM}$  adalah parameter teroptimasi yang diberikan dalam Tabel 4.2,  $r_{iM}$  adalah jarak antara atom ke- $i$  dari molekul  $H_2O$  dan  $Ni^{2+}$ ,  $q_i$  adalah muatan atom ke- $i$  dari molekul  $H_2O$ , dan  $q_M$  adalah muatan total ion  $Ni^{2+}$ .

**Tabel 3.3** Parameter fungsi *two-body potentials*  $Ni^{2+} - H_2O$  (Arindah, 2000)

Atom	$q$ (a.u)	$A_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1} \text{ \AA}^{-5}$ )	$B_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1} \text{ \AA}^{-9}$ )	$C_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1}$ )	$D_{iM}$ ( $\text{ \AA}^{-1}$ )
O	-0,6596	-3143,560	2277,056	96740,054	3,609
H	0,3298	-1138,736	1091,750	7876,404	2,684

*Two-body potentials*  $Ni^{2+} - H_2O$  dari Inada *et al.*, (2002) memiliki bentuk persamaan sebagai berikut :

$$V_{2b} = \sum_{i=1}^3 \frac{q_{iM}}{r_{iM}} + \frac{A_{iM}}{r_{iM}^5} + \frac{B_{iM}}{r_{iM}^7} + \frac{C_{iM}}{r_{iM}^9} + \frac{D_{iM}}{r_{iM}^{12}} \dots\dots\dots(3.3)$$

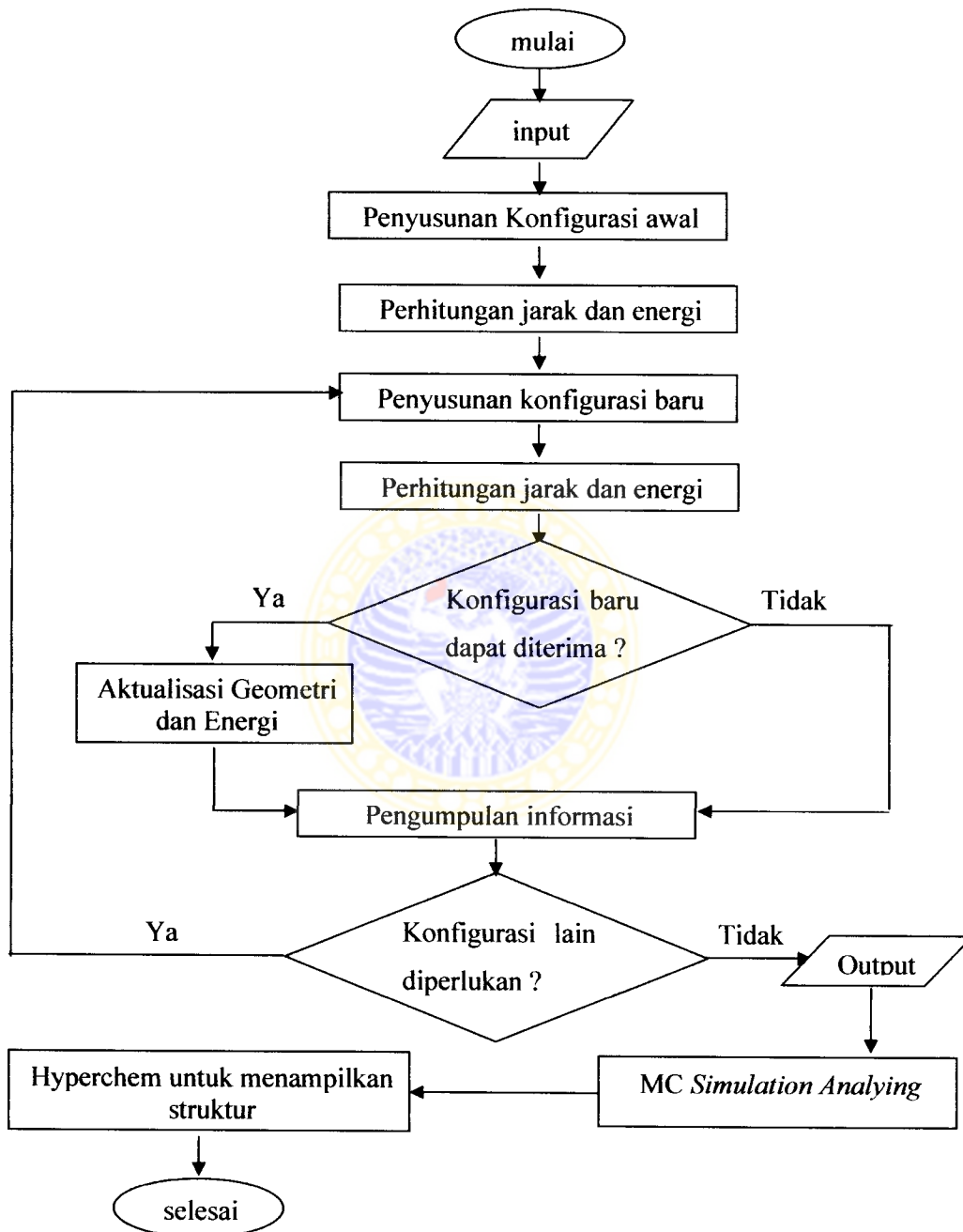
$q_{iM}$  adalah muatan atom,  $r_{iM}$  adalah jarak antara atom, sedangkan  $A_{iM}$ ,  $B_{iM}$ ,  $C_{iM}$  dan  $D_{iM}$  adalah parameter fungsi potensial interaksi dengan nilai sebagai berikut :

**Tabel 3.4** Parameter fungsi *two-body potentials*  $Ni^{2+} - H_2O$  (Inada *et al.*, 2002)

Atom	$q$ (a.u)	$A_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1} \text{ \AA}^{-5}$ )	$B_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1} \text{ \AA}^{-7}$ )	$C_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1} \text{ \AA}^{-9}$ )	$D_{iM}$ ( $kJ.mol^{-1} \text{ \AA}^{-12}$ )
O	- 0,6596	-7577,851183	42716,9882874	-70268,45053	52301,7750493
H	0,3298	-353,3401000	3467,0790489	-6549,763020	4909,1439175

### 3.3 Prosedur Penelitian

#### 3.3.1 Diagram alir penelitian.



### 3.3.2 Simulasi *Monte Carlo*.

Simulasi MC pada  $\text{Ni}^{2+}$  dilakukan pada sistem yang terdiri dari satu ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan 215 molekul  $\text{H}_2\text{O}$ . Selama simulasi, variabel yang tidak berubah adalah jumlah partikel (N), kotak simulasi (V) dan suhu (T) sehingga simulasi mengikuti NVT tetap. Tahap dalam penelitian ini dibagi menjadi dua bagian yaitu:

1. Simulasi MC
2. Analisis hasil simulasi MC

#### 3.3.2.1 Simulasi *Monte Carlo*.

Simulasi MC dalam penelitian ini dilakukan berdasarkan metode metropolis. Sebelum menjalankan simulasi, yang perlu dilakukan yaitu menyiapkan masukan (*input*) simulasi yaitu dengan menyiapkan *file input*, antara lain dengan :

- a. Melakukan modifikasi *file SuSi.in* sesuai sistem simulasi yang berisi 216 spesies yaitu 1 ion  $\text{Ni}^{2+}$ , 215 molekul  $\text{H}_2\text{O}$ , temperatur sistem (298,15 K), densitas sistem ( $0,99707 \text{ g.cm}^{-3}$ ), dan MAXCON (konfigurasi maksimal) sebesar 4 juta konfigurasi.
- b. Melakukan modifikasi *file S.f*, yaitu SSN(ISPE1)='M(+n)' diganti Ni(++) dan AMW(ISPE1) = 65,38 diganti  $\text{BM}_{\text{Ni}(++)} = 58,69$ .
- c. Melakukan modifikasi *file CIL.f* dengan memasukkan fungsi *two-body potentials* masing-masing interaksi yang diambil dari literatur yaitu *two-body potentials*  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$  (Jansco *et al.*, 1985), *two-body potentials*  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  (Inada *et al.*, 2002), dan *two-body potentials*  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  (Arindah, 2000).

- d. Melakukan modifikasi *file STEP.f* untuk badan 2. Nomor spesies 7 adalah untuk  $\text{Cu}^{2+}$  diubah ke  $\text{Ni}^{2+}$  menjadi 2.
- e. Meng-*compile* program MC99 dengan perintah : **make** ↵ , hasil kompilasi adalah *file MC99*.

Setelah mendapatkan *file MC99*, simulasi MC siap untuk dilakukan. Dalam simulasi MC, ada 3 tahapan yang perlu dilakukan sebelum dilakukan pengambilan sampel yaitu tahap kesetimbangan awal (inisiasi), tahap pemanasan (*heating*), dan tahap pendinginan (*cooling*). Ketiga tahapan ini penting dilakukan untuk mendapatkan kondisi sistem dengan kesetimbangan yang mantap, sehingga pada tahap *sampling* diperoleh data-data yang mewakili kondisi yang sebenarnya.

Pada ketiga tahapan diperlukan sebuah direktori khusus (*folder*) yang terpisah. Hal ini dilakukan agar tidak terjadi kerancuan data hasil simulasi. Dalam penelitian ini dibuat tiga direktori masing-masing direktori awalan untuk tahap inisiasi, heating untuk tahap pemanasan dan cooling untuk tahap pendinginan. Hal ini dapat dilakukan dengan mengetik perintah : **mkdir** <nama direktori> ↵

Untuk melakukan tahap kesetimbangan awal, dilakukan langkah-langkah sebagai berikut.

1. Memindahkan *file MC99*, *Start.Config* dan *SuSi.in* ke direktori *inisiasi* yang baru saja dibuat.
2. Memodifikasi *file SuSi.in* yaitu dengan mengubah nilai  $\text{RSC} = 0$  menjadi  $\text{RSC} = 1$ .
3. Menjalankan program MC99, dengan mengetik : **./MC99** ↵



4. Untuk melihat jalannya simulasi dapat dilakukan dengan mengetik : **tail\_–  
f\_Energies.2b ↵**

Tahap pemanasan (*heating*) dilakukan untuk menguji kemantapan kesetimbangan sistem. Tahapan pemanasan dilakukan dengan langkah-langkah sebagai berikut.

1. Memindahkan *file MC99, Start.Config* dan *SuSi.in* dari direktori *inisiasi* ke direktori *heating*.
2. Melakukan modifikasi pada *file SuSi.in* yaitu dengan menaikkan temperatur sistem dari suhu 298,15 K menjadi 500 K dan memperkecil jumlah konfigurasi dari MAXCON 4.000.000 menjadi MAXCON 500.000.
3. Menjalankan program MC99 dengan mengetik : **./MC99 ↵**.
4. Untuk melihat jalannya simulasi dapat dilakukan dengan mengetik : **tail\_–  
f\_Energies.2b ↵**.

Pada tahap pendinginan (*cooling*) dapat ditentukan apakah kondisi kesetimbangan sistem benar-benar mantap. Sistem benar-benar diyakini setimbang jika energi hasil dari tahap pendinginan nilainya sama dengan tahap inisiasi. Langkah-langkah yang perlu dilakukan pada tahap pendinginan adalah sebagai berikut.

1. Memindahkan *file MC99, Start.Config* dan *SuSi.in* dari direktori *heating* ke direktori *cooling*.
2. Melakukan modifikasi pada *file SuSi.in* yaitu dengan menurunkan kembali temperatur sistem dari suhu 500 K menjadi 298,15 K dan memperbesar jumlah konfigurasi dari MAXCON 500.000 menjadi MAXCON 3.000.000.

3. Menjalankan program MC99 dengan mengetik : **./MC99** ↵
4. Untuk melihat jalannya simulasi dapat dilakukan dengan mengetik : **tail -f\_Energies.2b** ↵

Tahapan terakhir dari simulasi MC adalah tahap sampling. Hal yang penting dilakukan dalam tahap pengambilan sampel (sampling) adalah sebagai berikut.

1. Membuat direktori khusus untuk sampling dengan mengetik : **mkdir\_<nama direktori>** ↵
2. Memindahkan *file MC99*, *Start.Config* dan *SuSi.in* dari direktori *cooling* ke direktori khusus untuk sampling.
3. Melakukan modifikasi pada *file SuSi.in* yaitu dengan mengubah RRAC = 0,5 menjadi RRAC = 0,0 dan WHIS = 0 menjadi WHIS = 2.
4. Menjalankan program MC99 dengan mengetik : **./MC99** ↵
5. Untuk melihat jalannya simulasi dapat dilakukan dengan mengetik : **tail -f\_Energies.2b** ↵

### 3.3.2.2 Analisis hasil simulasi *Monte Carlo*.

Hasil simulasi yang perlu diperhatikan adalah adalah fungsi distribusi radial (FDR) yang merupakan jarak antar spesi yang saling berinteraksi. Data jarak ini merupakan masukan (*input*) untuk program *MC Simulation Analyzing* (*file* *distribmcku3bsqn.c*). Selain itu diperlukan pula *file History.SuSi*. *File-file* yang berisi FDR yang perlu diperhatikan adalah sebagai berikut.

- a. RDF.1-O.1-O yang berisi data jarak interaksi O – O dari dua molekul H<sub>2</sub>O.
- b. RDF.2-Ni.1-O yang berisi data jarak interaksi Ni<sup>2+</sup> – O dari molekul H<sub>2</sub>O.

Analisis hasil simulasi MC diperlukan untuk mendapatkan distribusi angka solvasi dari  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  serta distribusi sudut  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ . Hal yang perlu dilakukan pada analisa hasil simulasi MC adalah sebagai berikut.

- i. Membuat direktori khusus untuk analisis dengan cara mengetik :  
**mkdir\_<nama\_direktori>.**
- ii. Memindahkan *file* History.SuSi dari direktori *Sampling* ke direktori *Analisis*.
- iii. Modifikasi *file* program utama analisis yaitu *file* *distrimcku3bsqn.c* sesuai sistem simulasi.
  1. Mendefinisikan sistem simulasi dengan mengisikan jumlah spesi interaksi.
    - a. Pada `#define NR_H2O` diisi 215 sesuai dengan jumlah molekul  $\text{H}_2\text{O}$  pada simulasi MC.
    - b. Pada `#define NR_Cu` diisi 1 sesuai dengan jumlah molekul Ni pada simulasi MC. Dalam program ini, spesi Ni diwakili oleh spesi Cu.
  2. Memodifikasi proses kontrol evaluasi (*controlling evaluating processes*) diantaranya `evcd_1_M1_M2`, `evcd_2_M1_M2` untuk distribusi bilangan koordinasi lapis pertama dan lapis kedua, `evad_1_M1_M2_M3`, `evad_2_M1_M2_M3` untuk distribusi sudut lapis pertama dan lapis kedua, `eve2_1_M1_M2`, `eve2_2_M1_M2` untuk distribusi *pair energy*, `evect2_1_M1`, `evect2_2_M1` untuk energi *cluster two-body* disesuaikan dengan sistem. Perubahan yang dilakukan antara lain mengisikan angka

1 untuk mengaktifkan kontrol evaluasi dan angka 0 untuk mendeaktifkan kontrol.

- a. `#define evcd_1_Cu_H2O` diisi 1.
- b. `#define evcd_2_Cu_H2O` diisi 1.
- c. `#define evad_1_H2O_Cu_H2O` diisi 1.
- d. `#define evad_2_H2O_Cu_H2O` diisi 1.
- e. `#define eve2_1_H2O_H2O` diisi 1.
- f. `#define eve2_2_H2O_H2O` diisi 1.
- g. `#define eve2_1_H2O_Cu` diisi 1.
- h. `#define eve2_2_H2O_Cu` diisi 1.
- i. `#define evec2_1_Cu` diisi 1.

3. Mengisi jarak minimum untuk lapis pertama (jarak minimum 1) dan lapis kedua (jarak minimum 2) yang dapat diketahui dari data fungsi distribusi radial (ECN.RDF) hasil simulasi.

- a. Mengisi jarak interaksi molekul  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$  di lapis pertama pada `#define r1_H2O_H2O`.
- b. Mengisi jarak interaksi molekul  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+}$  di lapis pertama pada `#define r1_H2O_Cu`.
- c. Mengisi jarak interaksi molekul  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$  di lapis kedua pada `#define r2_H2O_H2O`.
- d. Mengisi jarak interaksi molekul  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+}$  di lapis kedua pada `#define r2_H2O_Cu`.

4. Mengubah berat molekul spesi yang berinteraksi antara lain pada `#define`
  5. Mengisi potensial spesi yang berinteraksi yaitu pada POT06 untuk potensial  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ .
- iv. Melakukan *compile file* `distrimcku3bsqn.c` dengan perintah `cc_-lm_distrimcku3bsqn.c_-o_DIS341.5 ↵`, hasil *compile* adalah *file* `DIS341.5`.
  - v. Melakukan *running* untuk analisis dengan cara mengetik `./DIS341.5 ↵`.

Analisis hasil simulasi menghasilkan :

- a. fungsi distribusi radial yang merupakan fungsi yang menyatakan kebolehjadian ditemukannya atom yang mengelilingi atom pusat dalam ruang *spheris* ,
- b. fungsi distribusi energi interaksi pasangan, merupakan fungsi yang menyatakan energi interaksi antara atom pusat dengan atom yang mengelilingi ,
- c. fungsi distribusi sudut ikatan, merupakan fungsi yang menyatakan posisi antara atom yang satu dengan atom yang lain yang mengelilingi atom pusat dan,
- d. fungsi distribusi angka solvasi, merupakan fungsi yang menyatakan jumlah atom yang dapat diikat oleh atom pusat.

## BAB IV

### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 4.1 Korelasi Antara Himpunan Basis Dengan *Two-Body Potentials*

Himpunan basis merupakan suatu pernyataan numerik yang mengandung angka-angka parameter koefisien dan eksponensial dari fungsi Gaussian untuk menggambarkan fungsi gelombang orbital masing-masing atom dari sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ , yaitu atom Ni, O, dan H. Himpunan basis yang terbaik untuk  $\text{Ni}^{2+}$  dan  $\text{H}_2\text{O}$  dapat ditentukan dengan melakukan perhitungan *ab initio* pada energi interaksi  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  melalui prosedur SCF (Self Consistent Field) pada tingkat UHF (Unrestricted Hartree Fock) menggunakan program Gaussian 98 (Arindah, 2000).

Dalam menyusun *two-body potentials*, Arindah (2000) menggunakan Los Alamos ECP plus valensi double- $\zeta$  (LANL2DZ-ECP) sebagai basis set untuk  $\text{Ni}^{2+}$  dan Double- $\zeta$  Polarisasi (DZP) sebagai himpunan basis untuk  $\text{H}_2\text{O}$ . Fungsi *two-body potentials* yang diperoleh dapat dilihat pada persamaan (4.1).

$$\Delta E_{2b} = \sum_{i=1}^3 A_{iM} r_{iM}^{-5} + B_{iM} r_{iM}^{-9} + C_{iM} \exp(-D_{iM} r_{iM}) + q_i q_M r_{iM}^{-1} \dots\dots\dots(4.1)$$

$A_{iM}$ ,  $B_{iM}$ ,  $C_{iM}$  dan  $D_{iM}$  adalah parameter teroptimasi yang diberikan dalam Tabel 4.1,  $r_{iM}$  adalah jarak antara atom ke-i dari molekul  $\text{H}_2\text{O}$  dan  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $q_i$  adalah muatan atom ke-i dari molekul  $\text{H}_2\text{O}$ , dan  $q_M$  adalah muatan total ion  $\text{Ni}^{2+}$ .

**Tabel 4.1** Parameter dari interaksi atom O dan H dari H<sub>2</sub>O dan Ni<sup>2+</sup> pada persamaan (4.1)

Atom	Muatan (a.u)	A <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> Å <sup>-5</sup> )	B <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> Å <sup>-9</sup> )	C <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> )	D <sub>iM</sub> (Å <sup>-1</sup> )
O	-0,659	-3143,560	2277,056	96740,054	3,609
H	0,329	-1138,736	1091,750	7876,404	2,684

Berbeda dengan yang dilakukan oleh Arindah, dalam menyusun *two-body potentials*, Inada (2002) menggunakan Valensi DZ (VDZ) sebagai himpunan basis untuk H<sub>2</sub>O, sedangkan himpunan basis untuk Ni<sup>2+</sup> sama dengan yang digunakan oleh Arindah, yaitu LANL2DZ-ECP. Fungsi *two-body potentials* yang diperoleh dari penggunaan basis set tersebut disajikan dalam persamaan (4.2).

$$V_{2b} = \sum_{i=1}^3 \frac{q_{iM}}{r_{iM}} + \frac{A_{iM}}{r_{iM}^5} + \frac{B_{iM}}{r_{iM}^7} + \frac{C_{iM}}{r_{iM}^9} + \frac{D_{iM}}{r_{iM}^{12}} \dots \dots \dots (4.2)$$

$q_{iM}$  adalah muatan atom,  $r_{iM}$  adalah jarak antara atom, sedangkan  $A_{iM}$ ,  $B_{iM}$ ,  $C_{iM}$  dan  $D_{iM}$  adalah parameter fungsi potensial interaksi dengan nilai sebagai berikut :

**Tabel 4.2** Parameter dari interaksi atom O dan H dari H<sub>2</sub>O dengan Ni<sup>2+</sup> pada persamaan (4.2)

Atom	Muatan (a.u)	A <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> Å <sup>-5</sup> )	B <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> Å <sup>-7</sup> )	C <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> Å <sup>-9</sup> )	D <sub>iM</sub> (kJ.mol <sup>-1</sup> Å <sup>-12</sup> )
O	- 0,6596	-7577,851183	42716,9882874	-70268,45053	52301,7750493
H	0,3298	-353,3401000	3467,0790489	-6549,763020	4909,1439175

Fungsi *two-body potentials* yang disajikan pada persamaan (4.1) dan (4.2) digunakan sebagai masukan (*input*) untuk simulasi dengan menggunakan *Monte Carlo* pada sistem Ni<sup>2+</sup> – H<sub>2</sub>O.

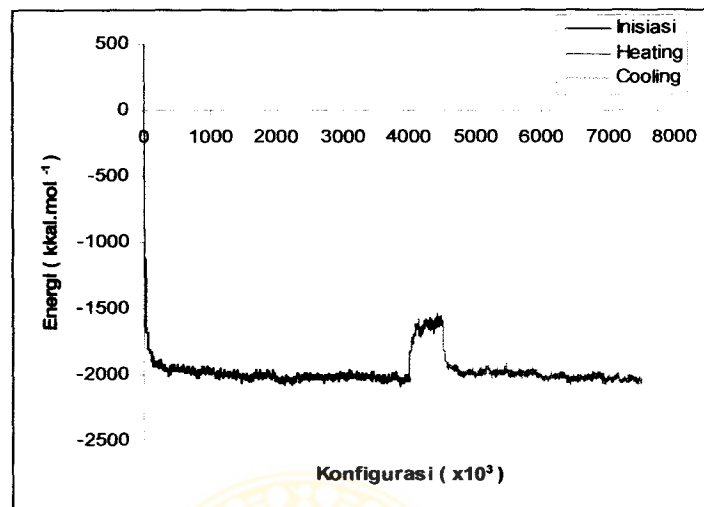
#### 4.2 Simulasi *Monte Carlo* Sistem $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$

Simulasi komputer menggunakan metode MC telah digunakan pada sistem yang berisikan 216 spesies, yaitu satu ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan 215  $\text{H}_2\text{O}$ . Dalam hal ini  $\text{H}_2\text{O}$  dibuat berjumlah jauh lebih banyak dari  $\text{Ni}^{2+}$  supaya simulasi dapat menghasilkan beberapa lapis solvasi  $\text{Ni}^{2+}$  yang tampak secara jelas. Simulasi dilakukan dengan menggunakan fungsi potensial pasangan  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dan  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$  pada suhu 298,15 K.. Panjang kotak berulang simulasi sebesar 18,696 Å, dengan densitas  $\text{H}_2\text{O}$  pada suhu 298,15 K, yaitu sebesar  $0,99707 \text{ g.cm}^{-3}$ .

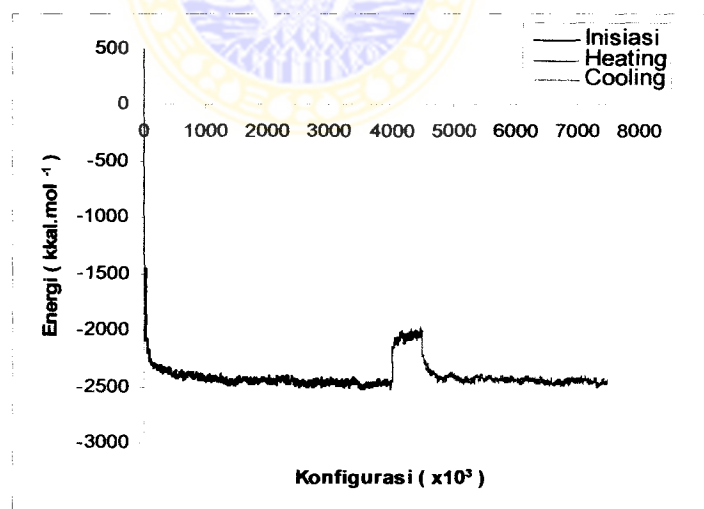
Simulasi struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  di dalam pelarut air dilakukan dengan menggunakan konfigurasi awal yang bersifat acak untuk sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ . Simulasi dimulai dengan dengan membuat konfigurasi sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  yang setimbang. Untuk mencapai kesetimbangan dilakukan beberapa tahapan simulasi, dimana kesetimbangan sistem dilakukan dengan memeriksa energi sistem setiap 1000 kali tahapan simulasi. Parameter yang digunakan untuk pengujian kesetimbangan adalah energi sistem. Sistem yang setimbang adalah sistem yang energinya relatif konstan. Hasil pemeriksaan setiap 1000 tahapan simulasi dicatat dan dibuat grafik energi sistem terhadap tahapan simulasi atau konfigurasi simulasi. Kualitas kesetimbangan yang diperoleh diuji dengan pemanasan sampai suhu 500 K, kemudian didinginkan lagi pada suhu 298,15 K. Jika hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa kesetimbangan energi tidak jauh berbeda dengan kondisi sebelum pemanasan dan pendinginan, maka pengambilan sampel sudah layak dilakukan.



Energi yang dihasilkan pada tahapan simulasi dapat dilihat pada Gambar 7 dan Gambar 8 yang menunjukkan fluktuasi energi selama pencapaian kesetimbangan meliputi kesetimbangan awal, proses pemanasan dan pendinginan.



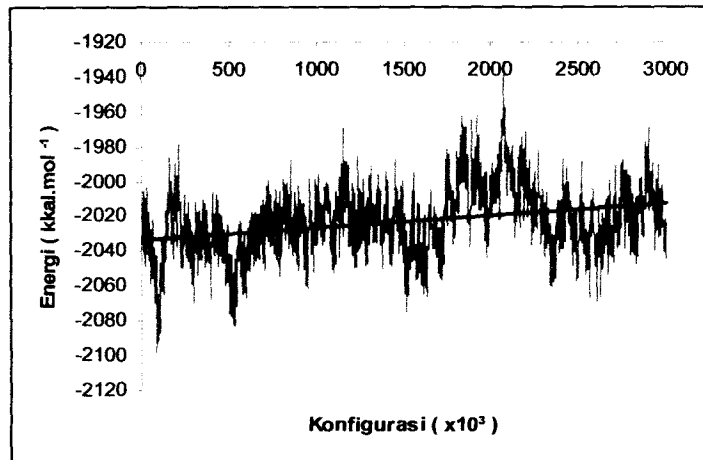
Gambar 7. Fluktuasi energi sistem selama pencapaian kesetimbangan, meliputi energi kesetimbangan awal, pemanasan dan pendinginan dengan menggunakan persamaan (4.1)



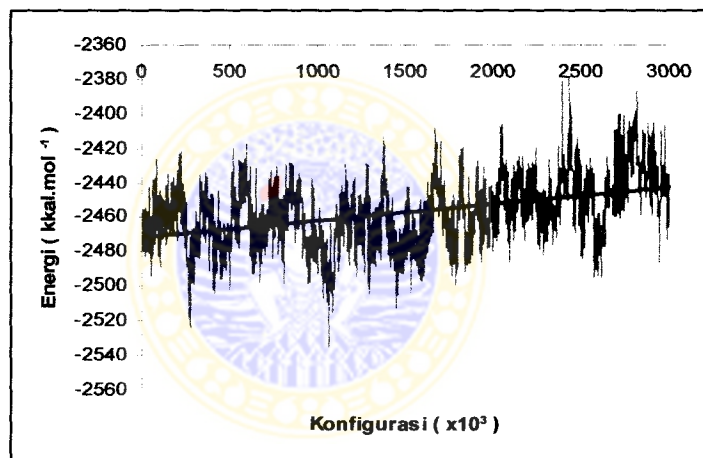
Gambar 8. Fluktuasi energi sistem selama pencapaian kesetimbangan, meliputi energi kesetimbangan awal, pemanasan dan pendinginan dengan menggunakan persamaan (4.2)

Gambar 7 dan Gambar 8 menunjukkan energi sistem yang dihasilkan pada beberapa tahapan simulasi, meliputi pencapaian kesetimbangan awal, pemanasan dan pendinginan. Pada tahap pencapaian kesetimbangan awal, energi yang dihasilkan berfluktuasi cukup tajam pada saat pertama kali dilakukan simulasi. Hal ini menandakan bahwa saat pertama kali proses simulasi dijalankan, sistem belum mencapai kesetimbangan. Energi sistem mula-mula bernilai positif dan secara perlahan turun hingga mencapai angka negatif sampai mencapai titik terendah. Fluktuasi energi saat titik terendah ini terjadi dalam interval yang sempit, sehingga dapat dikatakan sistem telah mencapai kesetimbangan. Kesetimbangan sistem diuji dengan melakukan tahap pemanasan dan pendinginan. Pada tahap pemanasan, kesetimbangan sistem diuji dengan menaikkan suhu sebesar 500 K. Selama proses simulasi, energi sistem yang dihasilkan pada tahap pendinginan hampir sama dengan energi sistem pada tahap pencapaian kesetimbangan awal. Hal ini menandakan bahwa sistem sudah mencapai kesetimbangan pada saat simulasi berlangsung, sehingga sistem tersebut sudah siap untuk dilakukan tahap *sampling*.

Tahap *sampling* dilakukan untuk memperoleh data struktur hasil simulasi. Jumlah konfigurasi yang digunakan dalam tahap *sampling* adalah sebesar 3 juta konfigurasi. Energi sistem *sampling* disajikan pada Gambar 9 dan Gambar 10.



Gambar 9. Fluktuasi energi sistem dengan 3 juta konfigurasi pada saat *sampling* dengan menggunakan persamaan (4.1)



Gambar 10. Fluktuasi energi sistem dengan 3 juta konfigurasi pada saat *sampling* dengan menggunakan persamaan (4.2)

Gambar 9 dan Gambar 10 menunjukkan bahwa perubahan energi sistem tidak terjadi fluktuasi yang tajam, sehingga data struktur yang diperoleh diharapkan dapat mewakili kondisi sistem yang sebenarnya.

### 4.3 Analisis Struktur Sistem Ion $\text{Ni}^{2+}$ Dalam Air

Dari hasil dari simulasi MC dengan sistem 1 ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam 215 molekul air pada temperatur 298,15 K dapat diketahui struktur sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menganalisis fungsi distribusi radial, distribusi angka solvasi, dan distribusi sudut.

#### 4.3.1 Fungsi distribusi radial (FDR).

Simulasi MC menghasilkan data FDR, yakni data jarak antar spesi yang berinteraksi yaitu antara Ni dengan O (Ni - O) dan Ni dengan H (Ni - H). Nilai karakteristik hasil simulasi MC dari data FDR dapat dilihat pada Tabel 4.3 dan Tabel 4.4, sedangkan grafik FDR untuk Ni - O dan Ni - H beserta nilai integrasinya dapat dilihat pada Gambar 11 dan Gambar 12.

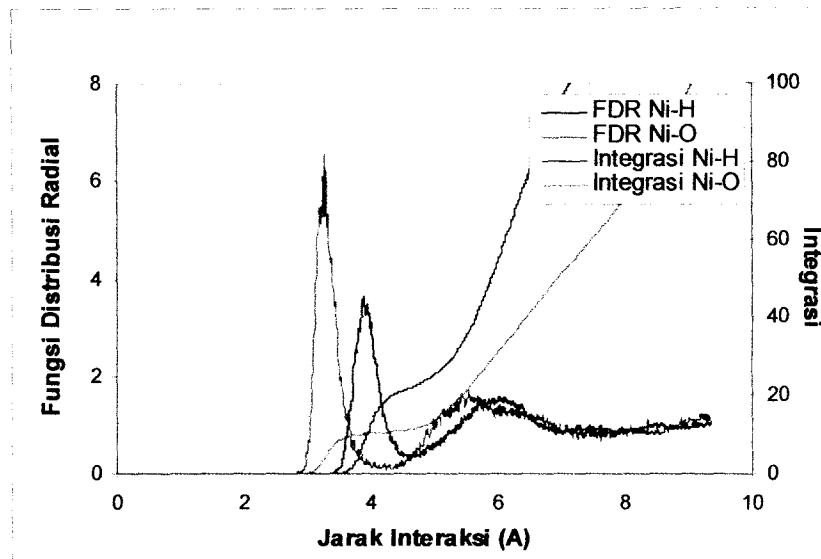
**Tabel 4.3** Nilai karakteristik dari FDR untuk sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menggunakan persamaan (4.1)

$\alpha$	$\beta$	$r_{M1}$	$r_{m1}$	$n_{\alpha\beta}$	$r_{M2}$	$r_{m2}$
Ni	O	3,276	4,248	10	5,544	7,620
Ni	H	3,876	4,584	22	6,000	7,860

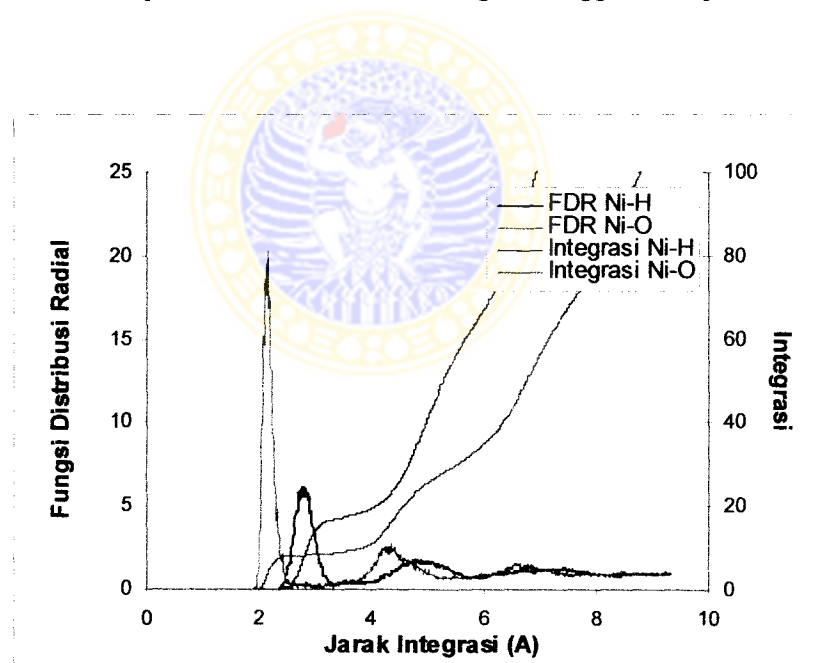
**Tabel 4.4** Nilai karakteristik dari FDR untuk sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menggunakan persamaan (4.2)

$\alpha$	$\beta$	$r_{M1}$	$r_{m1}$	$n_{\alpha\beta}$	$r_{M2}$	$r_{m2}$
Ni	O	2,148	3,012	8	4,356	5,424
Ni	H	2,796	3,336	17	4,800	5,904

Keterangan :  $r_{M1}$ ,  $r_{m1}$  dan  $r_{M2}$ ,  $r_{m2}$  adalah jarak dalam satuan  $\text{Å}$ .  $r_{M1}$  dan  $r_{m1}$  merupakan jarak maksimum dan minimum pada lapis pertama, sedangkan  $r_{M2}$  dan  $r_{m2}$  merupakan jarak maksimum dan minimum pada lapis kedua.  $n_{\alpha\beta}$  adalah bilangan integrasi yang menggambarkan jumlah molekul  $\text{H}_2\text{O}$  yang mensolvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  pada solvasi lapis pertama.



Gambar 11. Fungsi distribusi radial beserta bilangan integrasinya dari simulasi MC pada sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menggunakan persamaan (4.1)



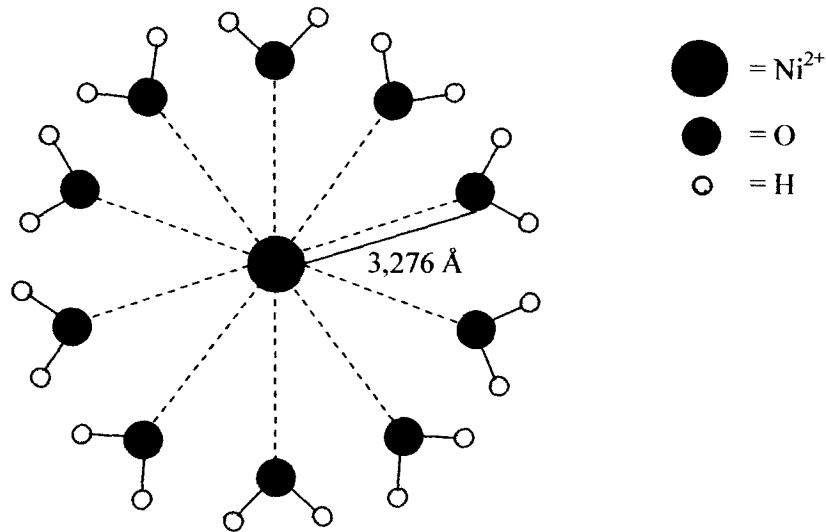
Gambar 12. Fungsi distribusi radial beserta bilangan integrasinya dari simulasi MC pada sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menggunakan persamaan (4.2)

pertama dari FDR  $\text{Ni}^{2+} - \text{O}$  yang berpusat pada 3,276 Å, yang berarti jarak antara ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan atom O dari molekul  $\text{H}_2\text{O}$  sebesar 3,276 Å. Daerah solvasi lapis kedua ion  $\text{Ni}^{2+}$  dengan atom O berada pada jarak 5,544 Å. Jumlah angka solvasi rata-rata untuk solvasi lapis pertama ditunjukkan oleh jumlah atom O dari FDR  $\text{Ni} - \text{O}$ , yaitu sebesar 10, atau dengan kata lain jumlah molekul  $\text{H}_2\text{O}$  yang mengelilingi  $\text{Ni}^{2+}$  sebanyak 10 buah. Besarnya angka solvasi ini dihitung dari integrasi fungsi distribusi radial sampai dengan jarak 4,248 Å. Pada jarak 3,876 Å kurva fungsi distribusi radial dari  $\text{Ni}-\text{H}$  mencapai nilai maksimum pertama dan turun sampai nilai minimumnya pada jarak 4,584 Å. Puncak ini menunjukkan solvasi lapis pertama dari atom H pada ion  $\text{Ni}^{2+}$  di dalam  $\text{H}_2\text{O}$ . Solvasi lapis kedua  $\text{Ni} - \text{H}$  berada pada jarak 6,000 Å. Besarnya nilai integrasi FDR  $\text{Ni} - \text{H}$  yang dihitung dari integrasi fungsi distribusi radial sampai dengan jarak 4,584 Å sebesar 22, ini berarti jumlah atom H yang mengelilingi ion  $\text{Ni}^{2+}$  sebesar 22. Puncak pertama dari kurva fungsi distribusi radial  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}$  tidak tumpang tindih dengan puncak pertama dari fungsi distribusi radial  $\text{Ni}^{2+} - \text{O}$ . Dan puncak pertama dari FDR  $\text{Ni} - \text{H}$  terjadi pada jarak yang lebih panjang dari puncak pertama dari FDR  $\text{Ni} - \text{O}$ . Fenomena ini menunjukkan bahwa solvasi pada lapis pertama mempunyai struktur dengan atom oksigen mengarah ke ion  $\text{Ni}^{2+}$ .

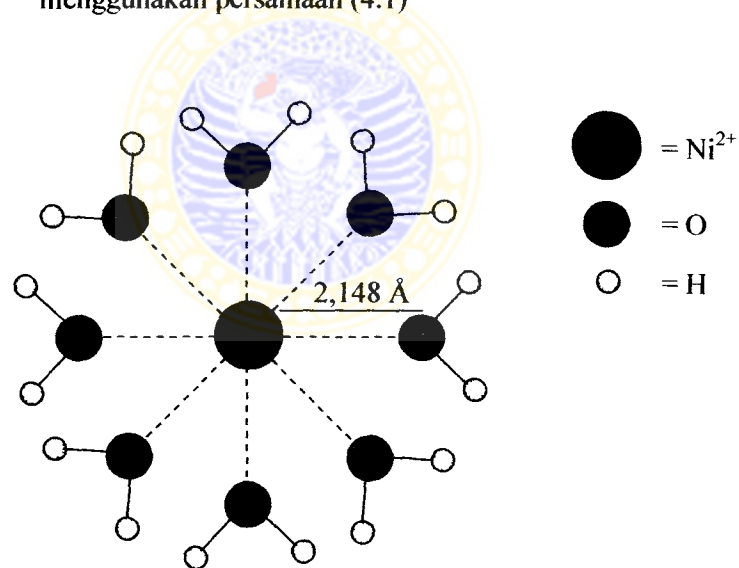
Berbeda dengan FDR pada Gambar 11, Gambar 12 menunjukkan daerah solvasi lapis pertama ion  $\text{Ni}^{2+}$  diwakili oleh puncak pertama dari FDR  $\text{Ni}^{2+} - \text{O}$  yang berpusat pada 2,148 Å, yang berarti jarak antara ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan atom O dari molekul  $\text{H}_2\text{O}$  sebesar 2,148 Å. Daerah solvasi lapis kedua ion  $\text{Ni}^{2+}$  dengan atom O

berada pada jarak 4,356 Å. Jumlah angka solvasi rata-rata untuk solvasi lapis pertama ditunjukkan oleh jumlah atom O dari FDR Ni – O, yaitu sebesar 8, atau dengan kata lain jumlah molekul H<sub>2</sub>O yang mengelilingi Ni<sup>2+</sup> sebanyak 8 buah. Besarnya angka solvasi ini dihitung dari integrasi fungsi distribusi radial sampai dengan jarak 3,012 Å. Pada jarak 2,796 Å kurva fungsi distribusi radial dari Ni-H mencapai nilai maksimum pertama dan turun sampai nilai minimumnya pada jarak 3,336 Å. Puncak ini menunjukkan solvasi lapis pertama dari atom H pada ion Ni<sup>2+</sup> di dalam H<sub>2</sub>O. Solvasi lapis kedua Ni – H berada pada jarak 4,800 Å. Besarnya nilai integrasi FDR Ni – H yang dimulai dari integrasi fungsi distribusi radial Ni-H sampai 3,336 Å sebesar 17, ini berarti jumlah atom H yang mengelilingi ion Ni<sup>2+</sup> sebesar 17. Puncak pertama dari kurva fungsi distribusi radial Ni<sup>2+</sup> – H tidak tumpang tindih dengan puncak pertama dari fungsi distribusi radial Ni<sup>2+</sup> – O. Dan puncak pertama dari FDR Ni – H terjadi pada jarak yang lebih panjang dari puncak pertama dari FDR Ni – O. Fenomena ini menunjukkan bahwa solvasi pada lapis pertama mempunyai struktur dengan atom oksigen mengarah ke ion Ni<sup>2+</sup>.

Secara proyeksi struktur solvasi lapis pertama ion Ni<sup>2+</sup> dalam molekul air dapat diilustrasikan seperti pada Gambar 13 dan Gambar 14.



Gambar 13. Ilustrasi proyeksi struktur solvasi lapis pertama ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam molekul air dari hasil simulasi MC dalam dua dimensi dengan menggunakan persamaan (4.1)



Gambar 14. Ilustrasi proyeksi struktur solvasi lapis pertama ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam molekul air dari hasil simulasi MC dalam dua dimensi dengan menggunakan persamaan (4.2)

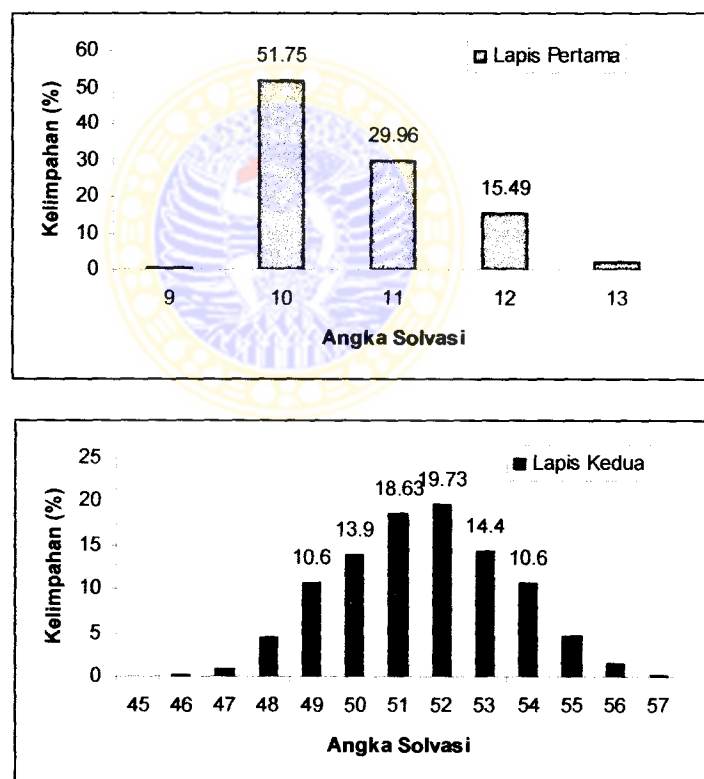
Gambar 13 dan Gambar 14 merupakan gambaran proyeksi interaksi ion  $\text{Ni}^{2+}$  dengan molekul  $\text{H}_2\text{O}$ . Jarak antara ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan atom O pada Gambar 13 lebih



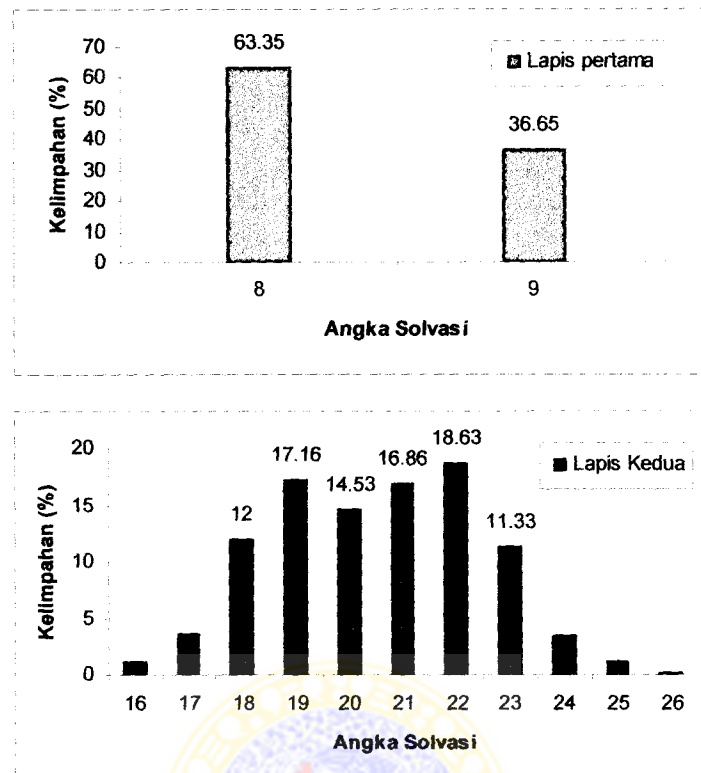
panjang 1,122 Å daripada jarak antara ion  $\text{Ni}^{2+}$  dan atom O pada Gambar 14. Hal ini kemungkinan disebabkan oleh perbedaan jumlah molekul  $\text{H}_2\text{O}$  yang mengelilingi ion  $\text{Ni}^{2+}$ . Gambar 13 menunjukkan jumlah molekul  $\text{H}_2\text{O}$  sebesar 10, sedangkan Gambar 14 menunjukkan jumlah molekul  $\text{H}_2\text{O}$  sebesar 8. Kebutuhan ruang untuk mengakomodasi 10 molekul air lebih besar jika dibandingkan dengan 8 molekul air, sehingga akan berpengaruh pada jarak antara ion  $\text{Ni}^{2+}$  dengan  $\text{H}_2\text{O}$ .

#### 4.3.2 Fungsi distribusi angka solvasi.

Data distribusi angka solvasi dari hasil simulasi ditunjukkan pada Gambar 15 dan Gambar 16.



Gambar 15. Distribusi angka solvasi pada solvasi lapis pertama dan kedua dari sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menggunakan persamaan (4.1)



Gambar 16. Distribusi angka solvasi pada solvasi lapis pertama dan kedua dari sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan menggunakan persamaan (4.2)

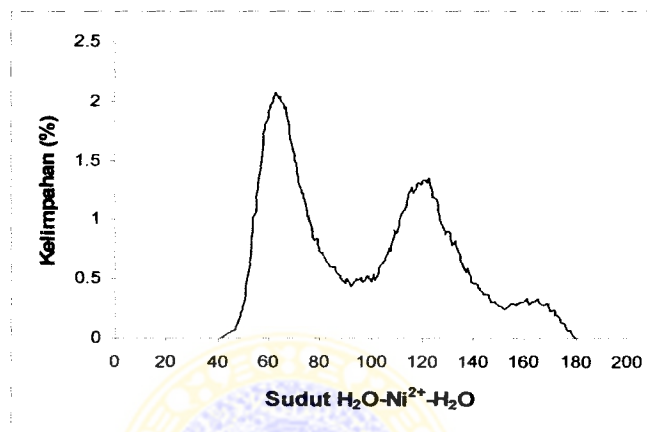
Kedua gambar tersebut menunjukkan bahwa terdapat dua lapis solvasi yang melingkupi ion  $\text{Ni}^{2+}$ , yaitu solvasi lapis pertama dan solvasi lapis kedua pada sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ . Angka solvasi pada Gambar 15 menunjukkan angka 10 (51,75 %), 11 (29,96 %), dan 12 (15,49 %) pada solvasi lapis pertama. Hal ini menunjukkan adanya kebolehjadian ion  $\text{Ni}^{2+}$  tersolvasi oleh 10, 11, atau 12 molekul air. Berbeda dengan Gambar 15, angka solvasi yang ditunjukkan pada Gambar 16 terdapat angka 8 dengan kelimpahan sebesar 63,35 % dan angka 9 dengan kelimpahan sebesar 36,65 % pada solvasi lapis pertama, yang menunjukkan bahwa adanya kebolehjadian ion  $\text{Ni}^{2+}$  tersolvasi oleh 8 atau 9

molekul air. Dilihat dari prosentase kelimpahan terbesar, angka solvasi pada solvasi lapis pertama adalah 10 (Gambar 15) dan 8 (Gambar 16).

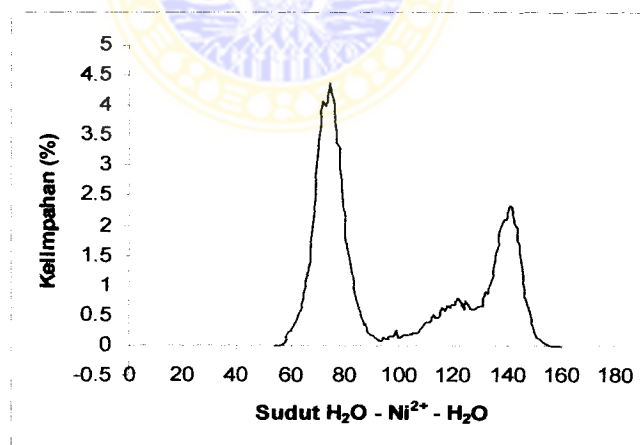
Angka solvasi pada lapis kedua yang ditunjukkan Gambar 15, selain angka 52 dengan kelimpahan sebesar 19,73 %, terdapat juga angka 49 (10,6 %), 50 (13,9 %), 51 (18,63 %), 53 (14,4 %), dan 54 (10,6 %). Pada Gambar 16, angka solvasi pada lapis kedua selain angka 22 dengan kelimpahan sebesar 18,63 % terdapat juga angka 18 (12 %), 19 (17,16 %), 20 (14,53 %), 21 (16,86 %), dan 23 (11,33 %). Dilihat dari prosentase kelimpahan terbesar, angka solvasi pada solvasi lapis kedua adalah 52 (Gambar 15) dan 22 (Gambar 16). Dilihat dari besarnya penyebaran jumlah molekul air pada solvasi lapis kedua baik pada Gambar 15 maupun Gambar 16, menunjukkan bahwa struktur solvasi kedua dari ion  $\text{Ni}^{2+}$  tidak bisa ditentukan secara tepat. Hal ini disebabkan karena pada penelitian ini digunakan potensial pasangan yang mewakili interaksi, baik pada solvasi lapis pertama maupun kedua, adalah potensial pasangan  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  sedangkan interaksi yang sesungguhnya terjadi pada solvasi lapis kedua merupakan interaksi antara  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_{10}]^{2+}$  dan  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$  dengan molekul air, bukan ion  $\text{Ni}^{2+}$  dengan molekul air, sehingga dalam hal ini penggunaan potensial pasangan  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  untuk menggambarkan interaksi pada solvasi lapis kedua kurang tepat. Apabila dikehendaki penggambaran struktur solvasi kedua dengan tepat, maka perlu disusun potensial pasangan untuk  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_{10}]^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dan  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ , kemudian dilakukan simulasi MC tersendiri dengan menggunakan potensial pasangan tersebut sebagai masukan (*input*) dalam simulasi.

### 4.3.3 Fungsi distribusi sudut ikatan.

Selain distribusi radial dan distribusi angka solvasi, struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  di dalam air dapat juga diterangkan dengan distribusi sudut ikatan  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ , atau lebih tepat sudut ikatan antara  $\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{O}$ . Distribusi sudut ikatan sistem  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  disajikan pada Gambar 17 dan Gambar 18.



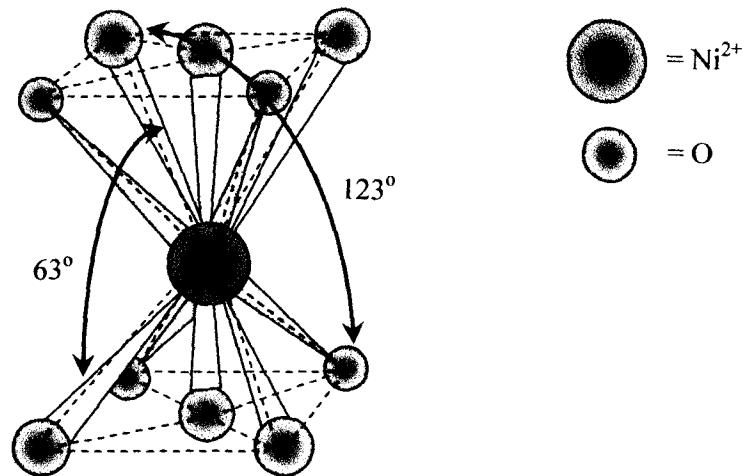
Gambar 17. Distribusi sudut ikatan sistem  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  pada solvasi lapis pertama dengan menggunakan persamaan (4.1)



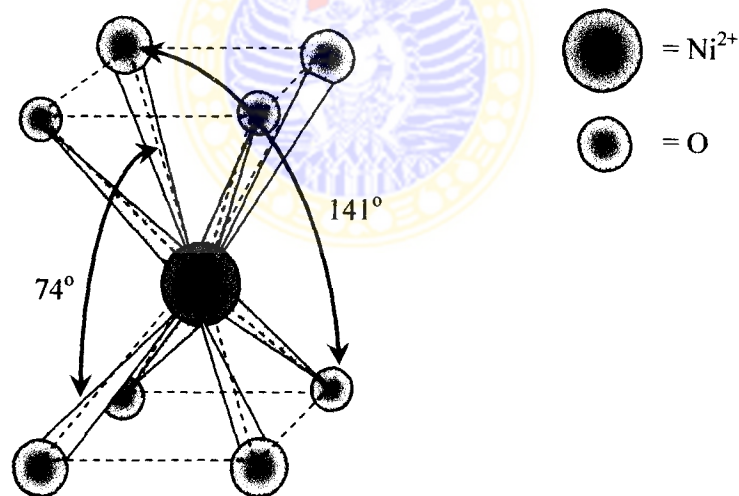
Gambar 18. Distribusi sudut ikatan sistem  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  pada solvasi lapis pertama dengan menggunakan persamaan (4.2)

Pada kedua gambar tersebut terlihat bahwa distribusi sudut ikatan O – Ni<sup>2+</sup> – O mempunyai dua puncak, masing-masing 63° (1,96 %) dan 123° (1,32 %) untuk Gambar 17, sedangkan untuk Gambar 18 adalah 74° (4,38 %) dan 141° (2,31 %). Intensitas sudut 63° dan 74° lebih tinggi dibandingkan sudut 123° dan 141°, hal ini berarti bahwa keberadaan struktur Ni<sup>2+</sup> tersolvasi dengan sudut ikatan O – Ni<sup>2+</sup> – O sebesar 63° dan 74° lebih banyak dibandingkan dengan sudut 123° dan 141°. Berdasarkan angka solvasi dan data sudut ikatan H<sub>2</sub>O – Ni<sup>2+</sup> - H<sub>2</sub>O diatas, maka dapat diperkirakan bentuk struktur solvasi ion Ni<sup>2+</sup> dalam air, yaitu berupa *bicapped square antiprism* dan *square antiprism* yang diilustrasikan dalam perspektif 3 dimensi oleh Gambar 19 dan Gambar 20.





Gambar 19. Ilustrasi struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  pada solvasi lapis pertama dalam perspektif 3 dimensi dengan menggunakan persamaan (4.1)



Gambar 20. Ilustrasi struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  pada solvasi lapis pertama dalam perspektif 3 dimensi dengan menggunakan persamaan (4.2)

## BAB V

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 5.1 Kesimpulan

Simulasi MC ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam air telah dilakukan pada suhu 298,15 K pada kotak simulasi dengan panjang 18,696 Å dan densitas sistem 0,99707 g.cm<sup>-3</sup>. Penggunaan fungsi *two-body potentials*, yaitu potensial interaksi I (Arindah, 2000) dan potensial interaksi II (Inada, 2002) dalam simulasi MC dapat digunakan untuk memperoleh data struktur solvasi ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam air. Dari hasil penelitian diperoleh kesimpulan sebagai berikut.

1. a. Pada solvasi lapis pertama : potensial interaksi I menghasilkan 10 molekul air, sedangkan potensial interaksi II menghasilkan 8 molekul air.  
b. Pada solvasi lapis kedua : potensial interaksi I menghasilkan 52 molekul air, sedangkan potensial interaksi II menghasilkan 20 molekul air.
2. Dari data distribusi angka solvasi dan sudut ikatan  $\text{H}_2\text{O} - \text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ , potensial interaksi I menghasilkan struktur yang mendekati bentuk *bicapped square antiprism*, sedangkan potensial interaksi II menghasilkan struktur yang mendekati bentuk *square antiprism*.

Berdasarkan hasil penelitian tersebut maka penggunaan potensial interaksi II sebagai *input* simulasi MC dapat menghasilkan struktur yang lebih mendekati eksperimen.

## 5.2 Saran

Simulasi *Monte Carlo* telah digunakan untuk mempelajari struktur ion  $\text{Ni}^{2+}$  dalam air. Masalah utama yang timbul pada penelitian ini adalah kesalahan hasil perhitungan hasil simulasi khususnya jumlah molekul air yang mengelilingi ion  $\text{Ni}^{2+}$  pada solvasi lapis pertama. Hal ini disebabkan karena fungsi potensial yang dibentuk kurang mencukupi untuk menggambarkan seluruh interaksi yang ada di dalam sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ . Oleh sebab itu perlu dilakukan simulasi sistem  $\text{Ni}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$  dengan melibatkan koreksi badan tiga (*three body*) pada perhitungan interaksi intermolekulernya.





## DAFTAR PUSTAKA

- Arindah T., 2000, *Solvation Structure Determination of Ni<sup>2+</sup> Ion In Water by Monte Carlo Simulation Method*, Thesis, Gadjah Mada University, Yogyakarta, Indonesia
- Barroroh, H., 2003, *Simulasi Monte Carlo Sistem Zn<sup>2+</sup> dalam Campuran Amoniak-Air*, Thesis, Jurusan Kimia, FMIPA UGM, Yogyakarta
- Ethica, S. N., 2002, *Simulasi Monte Carlo Co(II) dalam Air Melibatkan Potensial Badan Tiga*, Thesis, Jurusan Kimia, FMIPA UGM, Yogyakarta
- Jansco, G., Heinzinger, K., Bopp, P., 1985, **Molecular Dynamics Study of the Effect of Pressure on An Aqueous NaCl Solution**, *Z. Naturforsch.*, 40a, 1235
- Hannongbua, S., Rode, B. M., 1997, **The Role of Non-additive Effect in the First Solvation Shell of Na(I) and Mg(II) in Liquid Ammonia: Monte Carlo Studies Including Three Body Correction**, *J. Chem. Phys.*, 106, 6076
- Inada, Y., Hayashi, H., Sugimoto, K., Funahashi, S., 1999, **Solvation Structures of Manganese(II), Iron(II), Cobalt(II), Nickel(II), Copper(II), Zinc(II), and Gallium(III), Ions in Methanol, Ethanol, Dimethyl Sulfoxide, and Trimethyl Phosphate as Studied by EXAFS and Electronics Spectroscopies**, *J. Phys. Chem.*, 103, 1401-1406
- Inada, Y., Mohammed, A. M., Loeffler H. H., Rode, B. M., 2002, **Hydration Structure and Water Exchange Reaction of Nickel(II) Ion: Classical and QM/MM Simulations**, *J. Phys. Chem.*, A 106, 6783-6791
- Kihara, T., 1978, *Intermolecular Force*, John Wiley and Sons, Chichester
- Lancashire, J.R., *Coordination Numbers and Geometry*, <http://wwwchem.uwimona.edu.jm/courses/IC10Kcn.html>, 1 Februari 2006
- Leach, A. R., 1996, *Molecular Modelling*, Longman Singapore Publishers Ltd., Singapore
- Marcus, M. H., Darab, J. G., Palmer, B. J., Fulton, J. L., 1999, *A transition in the Ni<sup>2+</sup> complex structure from six-to four-coordinate upon formation of ion pair species in Super Critical water: An-X-ray absorption fine structure, near infrared and Molecular Dynamic study*, *Phys. Chem.*, A 103, 8471

- Marini, G., Texler, N. R., Rode, B. M., 1996, **Monte Carlo Simulation of Zn(II) in Water Including Three Body Effect**, *J. Phys. Chem.*, 100, 6808-6813
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H. and Teller, E., 1953, **Equation of State Calculation by Fast Computing Machines**, *J. Chem. Phys.*, vol. 21, n. 6, pp., 1087-1092
- Millero, F.J., 1979, *Activity Coefficients in Electrolyte Solutions*, Pytkowicz, R.M.; eds., CRC Press., Boca Raton
- Ohtaki, H. dan Radnai, T., 1993, **Structure and Dynamics of Hydrated Ions**, *Chem. Rev.*, 93, 1157-1204
- Pranowo, H. D., 1999, *Monte Carlo Simulation of Cu<sup>+</sup> and Cu<sup>2+</sup> in Water, Liquid Ammonia and Water Ammonia Mixtures*, Dissertation, Faculty of Sciences, Leopold-University of Innsbruck, Austria
- Pranowo, H. D., Setiaji, A. H., Rode, B. M., 1999, **Cu<sup>+</sup> in Liquid Ammonia and in Water: Intermolecular Potential and Monte Carlo Simulation**, *J. Phys. Chem. A.*, 103, 11115-11120
- Pranowo, H. D., Rode, B. M., 2001, **Preferential Cu<sup>2+</sup> Solvation in Aqueous Ammonia Solution of Various Concentration**, *J. Phys. Chem.*, 263, 1-6
- Qurrachman, T., 2005, *Simulasi Monte Carlo untuk penentuan struktur ion Ni<sup>2+</sup> dalam amoniak melibatkan potensial badan dua*, Skripsi, Jurusan Kimia, Universitas Airlangga
- Remko, M. dan Rode, B. M., 2000, **Bivalent Cation Binding Effect on Formation of Peptide Bond**, *Chem. Phys. Lett.*, 316, 489-494
- Rode, B. M., Heinzle, M. G., 1995, *Monte Carlo Simulation L1.2*, Innsbruck University, Innsbruck
- Shriver, D. F. dan Atkins, P. W., 1994, *Inorganic Chemistry*, 2<sup>nd</sup> edition, Oxford University Press, Oxford-UK
- Tanabe, Y., Rode, B.M., 1988, **Simulation Of Preferential Cation Solvation In Aqueous Ammonia**, *J.Chem.Soc.Faraday Trans.*, (2), 1779 – 1788
- Texler, N. R., Rode, B. M., 1991, **Monte Carlo Simulations of Cu(II) in Water with 3-Body Potential**, *J. Phys. Chem.*, 99, 15714-15717
- Texler, N. R., 1995, *MC Simulation Analyzing Program*, Innsbruck University, Innsbruck

Widhiyanto, H., 2006, *Simulasi Monte Carlo untuk menentukan struktur solvasi ion Ni(II) dalam ammonia pekat menggunakan potensial pasangan*. Skripsi, Jurusan Kimia, Universitas Airlangga



## SENARAI

Cluster	Sekelompok kecil atom atau molekul
Fcc	<i>Face Center Cubic</i> – kubus pusat muka
MD	<i>Molecular Dynamics</i> – Dinamika Molekul
MM	<i>Molecular Mechanics</i> – Mekanika Molekul
QM/MM	<i>Quantum Mechanics/Molecular Mechanics</i> – Mekanika kuantum/Mekanika molekul
Pelarut preferensial	Pelarut campuran
Stochastic	Proses pembagian energi total ke dalam fasa ruah secara merata



**Lampiran 1. Distribusi Angka Solvasi**

**a. Menggunakan *two-body potentials* Arindah (2000).**

-----  
 -----  
 -----Coordination Numbers Distribution -----  
 -----

\* Ni(++) in Water (1/215) 25 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha  
 Server!! \*

-----

\*\*\*\*\*  
 Center-Species Ni(2+)  
 \*\*\*\*\*

+++++++  
 First Shell  
 ++++++

Ni(2+) - H2O            Distance Limit: 4.25            NRCNTOT: 3001

CNR	Percentage	AvCNR	MinCNR	MaxCNR
9	0.60 %	10.67	9	13
10	51.75 %			
11	29.96 %			
12	15.49 %			
13	2.20 %			

-----  
 -----  
 Total CNR            MinTCNR: 9 MaxTCNR: 13  
 -----

CNR	CountedCNR	Percentage
9	18	0.60 %
10	1553	51.75 %
11	899	29.96 %
12	465	15.49 %
13	66	2.20 %



**b. Menggunakan *two-body potentials* Inada (2002)**

```

-----
-----
-----Coordination Numbers Distribution -----
-----
-----
* Ni(++) in Water (1/215) 25 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha
Server!! *
-----
-----

*****
Center-Species Ni(2+)
*****

+++++++
First Shell
+++++++

-----
-----
Ni(2+) - H2O      Distance Limit:  3.01      NRCNTOT: 3001

-----
-----
CNR Percentage   AvCNR      MinCNR      MaxCNR
  8    63.35 %   8.37        8            9
  9    36.65 %

-----
-----
Total CNR      MinTCNR: 8 MaxTCNR: 9
-----
-----

CNR CountedCNR   Percentage
  8      1901     63.35 %
  9      1100     36.65 %
    
```

+++++++  
 Second Shell  
 ++++++

---

Ni(2+) - H2O      Distance Limit: 3.01 ---> 5.42

---

CNR	Percentage	AvCNR	MinCNR	MaxCNR
16	1.10 %	20.52	16	26
17	3.67 %			
18	12.00 %			
19	17.16 %			
20	14.53 %			
21	16.86 %			
22	18.63 %			
23	11.33 %			
24	3.50 %			
25	1.07 %			
26	0.17 %			

---

Total CNR              MinTCNR: 16              MaxTCNR: 26

---

CNR	CountedCNR	Percentage
16	33	1.10 %
17	110	3.67 %
18	360	12.00 %
19	515	17.16 %
20	436	14.53 %
21	506	16.86 %
22	559	18.63 %
23	340	11.33 %
24	105	3.50 %
25	32	1.07 %
26	5	0.17 %

---

-----END-----

---



**Lampiran 2. Distribusi Sudut Ikatan**

**a. Menggunakan *two-body potentials* Arindah (2000).**

```
-----
-----
----- Angular - Distribution -----
-----
```

```
-----
* Ni(++) in Water (1/215) 25 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha
Server!! *
-----
```

```
*****
Center-Species Ni(2+)
*****
```

```
+++++++
First Shell
+++++++
```

---

```
Angle: H2O - Ni(2+) - H2O
Distance Limits: C/L1 = 4.25 C/L2 = 4.25
```

---

Angle	Percentage	AvANG
38.0000	0.00 %	97.34
39.0000	0.01 %	
40.0000	0.01 %	
41.0000	0.04 %	
42.0000	0.05 %	
43.0000	0.08 %	
44.0000	0.12 %	
45.0000	0.13 %	
46.0000	0.16 %	
47.0000	0.19 %	
48.0000	0.24 %	
49.0000	0.31 %	
50.0000	0.38 %	
51.0000	0.53 %	
52.0000	0.66 %	
53.0000	0.85 %	
54.0000	1.07 %	
55.0000	1.18 %	
56.0000	1.38 %	
57.0000	1.50 %	
58.0000	1.64 %	
59.0000	1.75 %	



1.81	%	60.0000
1.90	%	61.0000
1.91	%	62.0000
1.96	%	63.0000
1.93	%	64.0000
1.91	%	65.0000
1.82	%	66.0000
1.83	%	67.0000
1.64	%	68.0000
1.55	%	69.0000
1.44	%	70.0000
1.36	%	71.0000
1.26	%	72.0000
1.15	%	73.0000
1.14	%	74.0000
0.97	%	75.0000
0.97	%	76.0000
0.85	%	77.0000
0.77	%	78.0000
0.80	%	79.0000
0.71	%	80.0000
0.68	%	81.0000
0.65	%	82.0000
0.61	%	83.0000
0.58	%	84.0000
0.57	%	85.0000
0.59	%	86.0000
0.54	%	87.0000
0.51	%	88.0000
0.49	%	89.0000
0.46	%	90.0000
0.49	%	91.0000
0.46	%	92.0000
0.47	%	93.0000
0.51	%	94.0000
0.50	%	95.0000
0.54	%	96.0000
0.52	%	97.0000
0.56	%	98.0000
0.57	%	99.0000
0.53	%	100.0000
0.59	%	101.0000
0.56	%	102.0000
0.60	%	103.0000
0.67	%	104.0000
0.72	%	105.0000
0.72	%	106.0000
0.84	%	107.0000
0.77	%	108.0000
0.94	%	109.0000
0.90	%	110.0000
0.95	%	111.0000
1.05	%	112.0000
1.09	%	113.0000
1.15	%	114.0000
1.19	%	115.0000

116.0000	1.28	⌘
117.0000	1.23	⌘
118.0000	1.28	⌘
119.0000	1.30	⌘
120.0000	1.28	⌘
121.0000	1.31	⌘
122.0000	1.28	⌘
123.0000	1.32	⌘
124.0000	1.17	⌘
125.0000	1.15	⌘
126.0000	1.12	⌘
127.0000	0.98	⌘
128.0000	0.92	⌘
129.0000	0.86	⌘
130.0000	0.88	⌘
131.0000	0.85	⌘
132.0000	0.75	⌘
133.0000	0.77	⌘
134.0000	0.71	⌘
135.0000	0.67	⌘
136.0000	0.61	⌘
137.0000	0.54	⌘
138.0000	0.57	⌘
139.0000	0.48	⌘
140.0000	0.45	⌘
141.0000	0.46	⌘
142.0000	0.41	⌘
143.0000	0.42	⌘
144.0000	0.36	⌘
145.0000	0.39	⌘
146.0000	0.38	⌘
147.0000	0.32	⌘
148.0000	0.32	⌘
149.0000	0.31	⌘
150.0000	0.28	⌘
151.0000	0.28	⌘
152.0000	0.25	⌘
153.0000	0.25	⌘
154.0000	0.27	⌘
155.0000	0.29	⌘
156.0000	0.28	⌘
157.0000	0.30	⌘
158.0000	0.29	⌘
159.0000	0.32	⌘
160.0000	0.32	⌘
161.0000	0.37	⌘
162.0000	0.30	⌘
163.0000	0.34	⌘
164.0000	0.32	⌘
165.0000	0.34	⌘
166.0000	0.30	⌘
167.0000	0.29	⌘
168.0000	0.28	⌘
169.0000	0.28	⌘
170.0000	0.23	⌘
171.0000	0.24	⌘



172.0000	0.21	%
173.0000	0.20	%
174.0000	0.17	%
175.0000	0.13	%
176.0000	0.11	%
177.0000	0.07	%
178.0000	0.06	%
179.0000	0.02	%
180.0000	0.00	%

+++++++  
 Second Shell  
 ++++++

---

Angle: H2O - Ni(2+) - H2O  
 Distance Limits: C/L1 = 7.62      C/L2 = 7.62

---

Angle	Percentage	AvANG
0.0000	0.00	% 84.97
1.0000	0.00	%
2.0000	0.00	%
3.0000	0.00	%
4.0000	0.01	%
5.0000	0.01	%
6.0000	0.01	%
7.0000	0.01	%
8.0000	0.02	%
9.0000	0.02	%
10.0000	0.03	%
11.0000	0.03	%
12.0000	0.03	%
13.0000	0.04	%
14.0000	0.05	%
15.0000	0.05	%
16.0000	0.07	%
17.0000	0.09	%
18.0000	0.11	%
19.0000	0.13	%
20.0000	0.18	%
21.0000	0.26	%
22.0000	0.37	%
23.0000	0.49	%
24.0000	0.55	%
25.0000	0.57	%
26.0000	0.56	%
27.0000	0.55	%
28.0000	0.52	%
29.0000	0.51	%
30.0000	0.49	%
31.0000	0.46	%



32.0000	0.46	%
33.0000	0.46	%
34.0000	0.47	%
35.0000	0.49	%
36.0000	0.50	%
37.0000	0.53	%
38.0000	0.55	%
39.0000	0.57	%
40.0000	0.58	%
41.0000	0.58	%
42.0000	0.59	%
43.0000	0.61	%
44.0000	0.64	%
45.0000	0.66	%
46.0000	0.67	%
47.0000	0.67	%
48.0000	0.67	%
49.0000	0.70	%
50.0000	0.71	%
51.0000	0.71	%
52.0000	0.72	%
53.0000	0.72	%
54.0000	0.72	%
55.0000	0.74	%
56.0000	0.75	%
57.0000	0.76	%
58.0000	0.77	%
59.0000	0.81	%
60.0000	0.81	%
61.0000	0.84	%
62.0000	0.87	%
63.0000	0.89	%
64.0000	0.91	%
65.0000	0.92	%
66.0000	0.94	%
67.0000	0.95	%
68.0000	0.97	%
69.0000	1.00	%
70.0000	0.99	%
71.0000	1.01	%
72.0000	1.00	%
73.0000	1.01	%
74.0000	1.03	%
75.0000	1.05	%
76.0000	1.05	%
77.0000	1.06	%
78.0000	1.09	%
79.0000	1.11	%
80.0000	1.11	%
81.0000	1.13	%
82.0000	1.15	%
83.0000	1.15	%
84.0000	1.16	%
85.0000	1.17	%
86.0000	1.17	%
87.0000	1.16	%



88.0000	1.18	%
89.0000	1.17	%
90.0000	1.15	%
91.0000	1.15	%
92.0000	1.14	%
93.0000	1.14	%
94.0000	1.14	%
95.0000	1.13	%
96.0000	1.11	%
97.0000	1.11	%
98.0000	1.09	%
99.0000	1.09	%
100.0000	1.06	%
101.0000	1.04	%
102.0000	1.02	%
103.0000	1.01	%
104.0000	0.98	%
105.0000	0.96	%
106.0000	0.95	%
107.0000	0.94	%
108.0000	0.91	%
109.0000	0.89	%
110.0000	0.88	%
111.0000	0.86	%
112.0000	0.83	%
113.0000	0.82	%
114.0000	0.80	%
115.0000	0.78	%
116.0000	0.76	%
117.0000	0.75	%
118.0000	0.73	%
119.0000	0.71	%
120.0000	0.70	%
121.0000	0.68	%
122.0000	0.65	%
123.0000	0.65	%
124.0000	0.61	%
125.0000	0.60	%
126.0000	0.57	%
127.0000	0.55	%
128.0000	0.54	%
129.0000	0.52	%
130.0000	0.49	%
131.0000	0.47	%
132.0000	0.45	%
133.0000	0.45	%
134.0000	0.44	%
135.0000	0.42	%
136.0000	0.41	%
137.0000	0.39	%
138.0000	0.37	%
139.0000	0.35	%
140.0000	0.34	%
141.0000	0.32	%
142.0000	0.31	%
143.0000	0.29	%



144.0000	0.28	%
145.0000	0.27	%
146.0000	0.25	%
147.0000	0.24	%
148.0000	0.23	%
149.0000	0.22	%
150.0000	0.21	%
151.0000	0.20	%
152.0000	0.19	%
153.0000	0.18	%
154.0000	0.17	%
155.0000	0.16	%
156.0000	0.15	%
157.0000	0.14	%
158.0000	0.13	%
159.0000	0.13	%
160.0000	0.12	%
161.0000	0.11	%
162.0000	0.10	%
163.0000	0.10	%
164.0000	0.10	%
165.0000	0.09	%
166.0000	0.08	%
167.0000	0.08	%
168.0000	0.07	%
169.0000	0.07	%
170.0000	0.06	%
171.0000	0.05	%
172.0000	0.05	%
173.0000	0.04	%
174.0000	0.03	%
175.0000	0.03	%
176.0000	0.02	%
177.0000	0.02	%
178.0000	0.01	%
179.0000	0.00	%
180.0000	0.00	%



-----  
-----  
-----END-----  
-----

**b. Menggunakan *two-body potentials* Inada (2002).**

```

-----
-----
----- Angular - Distribution -----
-----
-----
* Ni(++) in Water (1/215) 25 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha
Server!! *
-----
-----

```

```

*****
Center-Species Ni(2+)
*****

```

```

+++++++
First Shell
+++++++

```

```

-----
Angle: H2O - Ni(2+) - H2O
Distance Limits: C/L1 = 3.01 C/L2 = 3.01
-----

```

Angle	Percentage	AvANG
54.0000	0.00 %	99.47
55.0000	0.00 %	
56.0000	0.01 %	
57.0000	0.03 %	
58.0000	0.10 %	
59.0000	0.20 %	
60.0000	0.23 %	
61.0000	0.30 %	
62.0000	0.41 %	
63.0000	0.51 %	
64.0000	0.62 %	
65.0000	0.78 %	
66.0000	1.17 %	
67.0000	1.47 %	
68.0000	1.92 %	
69.0000	2.52 %	
70.0000	3.13 %	
71.0000	3.67 %	
72.0000	4.06 %	
73.0000	3.99 %	
74.0000	4.38 %	
75.0000	4.22 %	
76.0000	4.01 %	
77.0000	3.44 %	
78.0000	3.24 %	

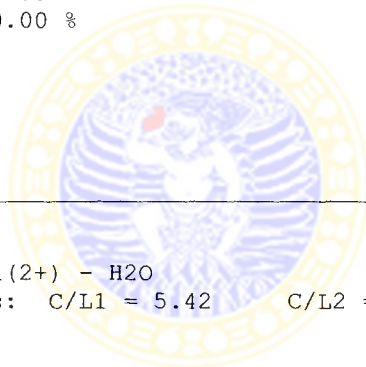


79.0000	2.65 %
80.0000	2.03 %
81.0000	1.66 %
82.0000	1.38 %
83.0000	1.06 %
84.0000	0.84 %
85.0000	0.62 %
86.0000	0.54 %
87.0000	0.33 %
88.0000	0.37 %
89.0000	0.21 %
90.0000	0.17 %
91.0000	0.15 %
92.0000	0.11 %
93.0000	0.08 %
94.0000	0.09 %
95.0000	0.13 %
96.0000	0.10 %
97.0000	0.15 %
98.0000	0.16 %
99.0000	0.25 %
100.0000	0.14 %
101.0000	0.16 %
102.0000	0.18 %
103.0000	0.17 %
104.0000	0.19 %
105.0000	0.19 %
106.0000	0.20 %
107.0000	0.21 %
108.0000	0.28 %
109.0000	0.30 %
110.0000	0.40 %
111.0000	0.40 %
112.0000	0.41 %
113.0000	0.51 %
114.0000	0.48 %
115.0000	0.50 %
116.0000	0.62 %
117.0000	0.58 %
118.0000	0.65 %
119.0000	0.63 %
120.0000	0.68 %
121.0000	0.69 %
122.0000	0.79 %
123.0000	0.72 %
124.0000	0.61 %
125.0000	0.75 %
126.0000	0.62 %
127.0000	0.61 %
128.0000	0.61 %
129.0000	0.62 %
130.0000	0.64 %
131.0000	0.64 %
132.0000	0.89 %
133.0000	0.87 %
134.0000	1.03 %



135.0000	1.18 %
136.0000	1.42 %
137.0000	1.75 %
138.0000	1.93 %
139.0000	2.10 %
140.0000	2.12 %
141.0000	2.31 %
142.0000	2.29 %
143.0000	2.04 %
144.0000	1.93 %
145.0000	1.58 %
146.0000	1.26 %
147.0000	0.85 %
148.0000	0.64 %
149.0000	0.44 %
150.0000	0.30 %
151.0000	0.14 %
152.0000	0.12 %
153.0000	0.07 %
154.0000	0.04 %
155.0000	0.03 %
156.0000	0.01 %
157.0000	0.01 %
159.0000	0.00 %
160.0000	0.00 %

+++++  
 Second Shell  
 +++++




---

Angle: H2O - Ni(2+) - H2O  
 Distance Limits: C/L1 = 5.42      C/L2 = 5.42

---

Angle	Percentage	AvANG
0.0000	0.00 %	92.45
1.0000	0.00 %	
2.0000	0.00 %	
3.0000	0.00 %	
4.0000	0.01 %	
5.0000	0.01 %	
6.0000	0.01 %	
7.0000	0.01 %	
8.0000	0.01 %	
9.0000	0.02 %	
10.0000	0.03 %	
11.0000	0.03 %	
12.0000	0.04 %	
13.0000	0.04 %	
14.0000	0.04 %	
15.0000	0.05 %	



0.05	16.0000
0.06	17.0000
0.06	18.0000
0.07	19.0000
0.08	20.0000
0.07	21.0000
0.09	22.0000
0.10	23.0000
0.09	24.0000
0.10	25.0000
0.10	26.0000
0.12	27.0000
0.13	28.0000
0.17	29.0000
0.26	30.0000
0.38	31.0000
0.51	32.0000
0.62	33.0000
0.74	34.0000
0.79	35.0000
0.79	36.0000
0.76	37.0000
0.76	38.0000
0.73	39.0000
0.71	40.0000
0.75	41.0000
0.76	42.0000
0.75	43.0000
0.77	44.0000
0.77	45.0000
0.78	46.0000
0.79	47.0000
0.79	48.0000
0.77	49.0000
0.78	50.0000
0.78	51.0000
0.78	52.0000
0.76	53.0000
0.77	54.0000
0.74	55.0000
0.74	56.0000
0.75	57.0000
0.73	58.0000
0.75	59.0000
0.73	60.0000
0.72	61.0000
0.72	62.0000
0.73	63.0000
0.74	64.0000
0.76	65.0000
0.77	66.0000
0.78	67.0000
0.80	68.0000
0.77	69.0000
0.80	70.0000
0.78	71.0000



0.80 %	72.0000
0.78 %	73.0000
0.78 %	74.0000
0.81 %	75.0000
0.81 %	76.0000
0.84 %	77.0000
0.84 %	78.0000
0.88 %	79.0000
0.86 %	80.0000
0.87 %	81.0000
0.88 %	82.0000
0.87 %	83.0000
0.88 %	84.0000
0.88 %	85.0000
0.88 %	86.0000
0.88 %	87.0000
0.88 %	88.0000
0.86 %	89.0000
0.87 %	90.0000
0.87 %	91.0000
0.89 %	92.0000
0.85 %	93.0000
0.85 %	94.0000
0.84 %	95.0000
0.86 %	96.0000
0.89 %	97.0000
0.91 %	98.0000
0.93 %	99.0000
0.94 %	100.0000
0.96 %	101.0000
0.98 %	102.0000
0.98 %	103.0000
0.97 %	104.0000
0.99 %	105.0000
0.97 %	106.0000
0.95 %	107.0000
0.91 %	108.0000
0.92 %	109.0000
0.92 %	110.0000
0.89 %	111.0000
0.85 %	112.0000
0.88 %	113.0000
0.87 %	114.0000
0.87 %	115.0000
0.84 %	116.0000
0.85 %	117.0000
0.82 %	118.0000
0.80 %	119.0000
0.78 %	120.0000
0.74 %	121.0000
0.76 %	122.0000
0.73 %	123.0000
0.72 %	124.0000
0.71 %	125.0000
0.69 %	126.0000
0.65 %	127.0000

-----  
DNE  
-----

0.65	128.0000
0.62	129.0000
0.64	130.0000
0.60	131.0000
0.59	132.0000
0.61	133.0000
0.61	134.0000
0.61	135.0000
0.62	136.0000
0.61	137.0000
0.60	138.0000
0.58	139.0000
0.60	140.0000
0.54	141.0000
0.52	142.0000
0.52	143.0000
0.50	144.0000
0.50	145.0000
0.49	146.0000
0.52	147.0000
0.51	148.0000
0.48	149.0000
0.49	150.0000
0.47	151.0000
0.47	152.0000
0.42	153.0000
0.40	154.0000
0.38	155.0000
0.37	156.0000
0.35	157.0000
0.34	158.0000
0.33	159.0000
0.31	160.0000
0.30	161.0000
0.26	162.0000
0.25	163.0000
0.25	164.0000
0.23	165.0000
0.22	166.0000
0.20	167.0000
0.20	168.0000
0.16	169.0000
0.15	170.0000
0.14	171.0000
0.12	172.0000
0.10	173.0000
0.10	174.0000
0.08	175.0000
0.07	176.0000
0.05	177.0000
0.03	178.0000
0.01	179.0000
0.00	180.0000



**Lampiran 3. Distribusi Energi Pasangan**

**a. Menggunakan *two-body potentials* Arindah (2000).**

```

-----
-----
----- Pair-Energies Distribution -----
-----
-----
* Ni(++) in Water (1/215) 20 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha
Server!! *
-----
-----

+++++
H2O - H2O
+++++

-----

First Shell ---> Distance Limit: 3.34 NRE2TOT: 2817502

-----

Energy Percentage AvEnergy MinEnergy MaxEnergy
-6 0.03 % -2.78 -6 11
-5 18.74 %
-4 28.41 %
-3 19.01 %
-2 11.20 %
-1 7.43 %
0 5.49 %
1 4.57 %
2 3.62 %
3 1.14 %
4 0.27 %
5 0.06 %
6 0.01 %
7 0.00 %
8 0.00 %
9 0.00 %
10 0.00 %
11 0.00 %

```

---

Second Shell ---> Distance Limit: 5.63 NRE2TOT: 12448632

---

Energy	Percentage	AvEnergy	MinEnergy	MaxEnergy
-3	0.04 %	-0.16	-3	8
-2	0.51 %			
-1	25.50 %			
0	63.99 %			
1	9.23 %			
2	0.69 %			
3	0.02 %			
4	0.00 %			
5	0.00 %			
6	0.00 %			
7	0.00 %			
8	0.00 %			

++++  
H2O - Cu(2+)  
++++

---

First Shell ---> Distance Limit: 4.25 NRE2TOT: 32019

---

Energy	Percentage	AvEnergy	MinEnergy	MaxEnergy
-46	0.01 %	-29.35	-46	-1
-45	0.01 %			
-44	0.03 %			
-43	0.04 %			
-42	0.08 %			
-41	0.19 %			
-40	0.40 %			
-39	0.64 %			
-38	1.41 %			
-37	2.15 %			
-36	3.64 %			
-35	5.12 %			
-34	6.66 %			
-33	7.52 %			
-32	8.98 %			
-31	9.14 %			
-30	8.61 %			
-29	7.79 %			
-28	6.83 %			
-27	6.10 %			

-26	5.14 %
-25	4.06 %
-24	3.38 %
-23	2.60 %
-22	1.78 %
-21	1.46 %
-20	1.28 %
-19	1.01 %
-18	0.81 %
-17	0.84 %
-16	0.56 %
-15	0.47 %
-14	0.40 %
-13	0.32 %
-12	0.19 %
-11	0.12 %
-10	0.06 %
-9	0.02 %
-8	0.04 %
-7	0.02 %
-6	0.01 %
-5	0.01 %
-4	0.02 %
-3	0.02 %
-2	0.01 %
-1	0.01 %

---

Second Shell ---> Distance Limit: 7.62 NRE2TOT: 154707

---

Energy	Percentage	AvEnergy	MinEnergy	MaxEnergy
-17	0.01 %	-3.06	-17	8
-16	0.03 %			
-15	0.07 %			
-14	0.12 %			
-13	0.27 %			
-12	0.57 %			
-11	0.96 %			
-10	1.69 %			
-9	2.69 %			
-8	3.75 %			
-7	5.46 %			
-6	8.09 %			
-5	12.36 %			
-4	12.94 %			
-3	11.24 %			
-2	9.11 %			
-1	7.38 %			
0	5.82 %			
1	4.51 %			
2	3.63 %			



```

3      3.11 %
4      3.29 %
5      2.27 %
6      0.45 %
7      0.15 %
8      0.01 %
    
```

-----END-----

Q

**b. Menggunakan *two-body potentials* Inada (2002).**

-----  
-----  
-----Pair-Energies Distribution -----  
-----

\* Ni(++) in Water (1/215) 20 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha  
Server!! \*

+++++  
H2O - H2O  
+++++

First Shell ---> Distance Limit: 3.36 NRE2TOT: 2985522

Energy	Percentage	AvEnergy	MinEnergy	MaxEnergy
-6	0.03 %	-2.31	-6	18
-5	16.91 %			
-4	26.48 %			
-3	18.03 %			
-2	10.96 %			
-1	7.40 %			
0	5.77 %			
1	5.19 %			
2	4.06 %			
3	1.36 %			
4	0.64 %			
5	0.64 %			
6	0.70 %			
7	0.66 %			
8	0.51 %			
9	0.33 %			
10	0.19 %			
11	0.09 %			
12	0.04 %			

```

13      0.01 %
14      0.00 %
15      0.00 %
16      0.00 %
17      0.00 %
18      0.00 %
    
```

---

Second Shell ---> Distance Limit: 5.72 NRE2TOT: 13300022

---

Energy	Percentage	AvEnergy	MinEnergy	MaxEnergy
-3	0.03 %	-0.15	-3	8
-2	0.42 %			
-1	23.22 %			
0	67.53 %			
1	8.32 %			
2	0.46 %			
3	0.02 %			
4	0.00 %			
5	0.00 %			
6	0.00 %			
7	0.00 %			
8	0.00 %			

+++++  
H2O - Cu(2+)  
+++++

---

First Shell ---> Distance Limit: 3.01 NRE2TOT: 25108

---

Energy	Percentage	AvEnergy	MinEnergy	MaxEnergy
-84	0.52 %	-73.87	-84	-21
-83	2.26 %			
-82	4.48 %			
-81	6.30 %			
-80	7.71 %			
-79	8.19 %			
-78	8.42 %			
-77	7.83 %			
-76	7.46 %			
-75	6.96 %			
-74	5.57 %			
-73	5.17 %			
-72	4.33 %			

-71	3.56 %
-70	3.04 %
-69	2.34 %
-68	2.10 %
-67	1.62 %
-66	1.61 %
-65	1.26 %
-64	1.01 %
-63	0.83 %
-62	0.78 %
-61	0.51 %
-60	0.57 %
-59	0.45 %
-58	0.26 %
-57	0.27 %
-56	0.31 %
-55	0.25 %
-54	0.17 %
-53	0.15 %
-52	0.19 %
-51	0.18 %
-50	0.19 %
-49	0.25 %
-48	0.21 %
-47	0.19 %
-46	0.29 %
-45	0.24 %
-44	0.25 %
-43	0.24 %
-42	0.29 %
-41	0.20 %
-40	0.14 %
-39	0.20 %
-38	0.13 %
-37	0.08 %
-36	0.12 %
-35	0.07 %
-34	0.04 %
-33	0.06 %
-32	0.03 %
-31	0.02 %
-30	0.02 %
-29	0.02 %
-28	0.01 %
-27	0.01 %
-26	0.01 %
-25	0.01 %
-24	0.00 %
-23	0.00 %
-22	0.00 %
-21	0.01 %



6	0.31 %
7	0.13 %
8	0.05 %
9	0.01 %
10	0.01 %

-----END-----

Q



**Lampiran 4. Energi Cluster**

**a. Menggunakan two-body potentials Arindah (2000).**

```

-----
-----
----- Cluster-Energies -----
-----
-----
* Ni(++) in Water (1/215) 20 Degree Celsius DEN=0.99707 Alpha
Server!! *
-----
-----

+++++
Center: Cu(2+)
+++++

-----

First Shell:

-----

Cluster Energy:          -2234.38
2-Body Cluster Energy:  -2234.38
3-Body Cluster Energy:    0.00
-----
Cu(2+)-H2O:              -2192.42
-----
H2O-H2O:                  41.96
-----

-----

Second Shell:

-----

Cluster Energy:          -896.03
2-Body Cluster Energy:  -896.03
3-Body Cluster Energy:    0.00
-----
Cu(2+)-H2O:              -1102.58
-----
H2O-H2O:                  -206.55
-----
-----END-----
-----

q

```

