

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

MONTE CARLO SIMULATION TO OBTAIN SOLVATION STRUCTURE OF NI(II) IN WATER USING TWO DIFFERENT EQUATION OF TWO-BODY POTENTIALS

 **By: GUSTANTO, HANDRA**

Email: library@lib.unair.ac.id; library@unair.ac.id

Undergraduate Theses Airlangga University

Created: 2006-12-11 , with 1 file(s).

Keywords: Simulasi Monte Carlo, sistem Ni²⁺ – H₂O, two-body potentials

Subject: MONTE CARLO (METHOD)

Call Number: KKC KK MPK 41/06 Gus s

Simulasi Monte Carlo telah dilakukan untuk menentukan struktur solvasi ion Ni²⁺ 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 Ni²⁺ dan 215 molekul H₂O. Hasil penelitian menunjukkan bahwa dengan menggunakan potensial I, molekul H₂O yang mengelilingi ion Ni²⁺ pada solvasi lapis pertama sebanyak 10 dan pada lapis kedua sebanyak 52, sedangkan dengan menggunakan potensial II, molekul H₂O yang mengelilingi ion Ni²⁺ pada solvasi lapis pertama sebanyak 8 dan pada lapis kedua sebanyak 20. Dari data distribusi angka solvasi, radial dan sudut ikatan H₂O – Ni²⁺ – H₂O, 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.

Translation:

Monte Carlo simulation was done to obtain the structure of the Ni²⁺ 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 Ni²⁺ ion in 215 water molecules. The results were shown that with using potential I, number of H₂O molecules surrounding Ni²⁺ ion were 10 molecules in first shell and 52 molecules in second shell, while with using potential II, number of H₂O molecules surrounding Ni²⁺ 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.