



DINAMIKA HIDRASI CERIUM (III) DALAM LARUTAN BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL

Ponco Iswanto dan Senny Widyaningsih
Program Studi Kimia, Fakultas Sains dan Teknik, Universitas Jenderal Soedirman

poncoiswanto@gmail.com

ABSTRAK

Penelitian tentang sifat dinamika hidrasi ion Ce^{3+} berdasarkan simulasi dinamika molekul telah dilakukan. Metode simulasi yang digunakan adalah simulasi dinamika molekul *ab initio Quantum Mechanical Charge Field* (QMCF). Metode ini membagi kotak simulasi menjadi 2 bagian. Bagian pertama yang meliputi lapisan hidrasi pertama dan kedua, dihitung dengan metode mekanika kuantum *ab initio* pada tingkatan teori Hartree–Fock (HF). Himpunan basis yang digunakan pada perhitungan mekanika kuantum untuk ion Ce^{3+} dan molekul air adalah SBKJC VDZ ECP dan DZP Dunning secara berurutan. Bagian kedua, di luar bagian pertama, dihitung dengan metode perhitungan mekanika klasik. Hasil penelitian menunjukkan bahwa ion Ce^{3+} memiliki lapisan hidrasi yang fleksibel pada lapisan hidrasi pertama dan kedua.

Kata Kunci: Cerium (III), hidrasi, *ab initio*, QMCF, simulasi