

**KAJIAN STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI ION MANGAN(III) DALAM
AIR MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR QM/MM
(*QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS*)**

SKRIPSI

**Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana Kimia**



Oleh:

Ayyasy Mufid Habibullah

20106030022

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

**PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA**

2024



PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-704/Un.02/DST/PP.00.9/05/2024

Tugas Akhir dengan judul : Kajian Struktur Dan Dinamika Solvasi Ion Mangan(III) Dalam Air Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : AYYASY MUFID HABIBULLAH
Nomor Induk Mahasiswa : 20106030022
Telah diujikan pada : Rabu, 08 Mei 2024
Nilai ujian Tugas Akhir : A

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 664e040c6e069



Penguji I

Karmanto, S.Si., M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 664b0297bd59d



Penguji II

Sudarlin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 664ac5de62044



Yogyakarta, 08 Mei 2024
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 664e4bd149012



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Lamp :

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Ayyasy Mufid Habibullah
NIM : 20106030022
Judul Skripsi : Kajian Struktur Dan Dinamika Solvasi Ion Mangan(III) Dalam Air Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular QM/MM (*Quantum Mechanics/Molecular Mechanics*)

Sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam Program Studi Kimia.

Dengan ini kami berharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 1 April 2024

Pembimbing

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.

NIP: 19900330 201903 1 008



NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp : -

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Ayyasy Mufid Habibullah

NIM : 20106030022

Judul Skripsi. : Kajian Struktur Dan Dinamika Solvasi Ion Mangan(III) Dalam Air Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)

Sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 14 Mei 2024

Konsultan

Karmanto, S.Si., M.Sc.

NIP. 19820504 200912 1 005



NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir
Lamp : -

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Ayyasy Mufid Habibullah
NIM : 20106030022
Judul Skripsi : Kajian Struktur Dan Dinamika Solvasi Ion Mangan(III) Dalam Air Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)

Sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 14 Mei 2024

Konsultan

Sudarlin, M.Si.

NIP. 19850611 201503 1 002

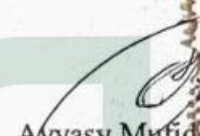
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Ayyasy Mufid Habibullah
NIM : 20106030022
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul **“Kajian Struktur Dan Dinamika Solvasi Ion Mangan(III) Dalam Air Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)”** merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjana di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 1 April 2024



Ayyasy Mufid
20106030022



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Puji Syukur kepada **Allah SWT**. Karya kecil ini kupersembahkan sebagai rasa terima kasih dan rasa bangga untuk:



Almamater tercinta
Program Studi Kimia
Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Ibu, Ibu, Ibu, Bapak, Adik, Keluarga Besarku, dan Teman-teman dekatku yang selalu memberikan do'a, motivasi, dan dukungan untuk menyelesaikan tugas akhir ini

HALAMAN MOTO

(Berdasarkan Buku yang telah dibaca)

"Bertindaklah ketika dapat, bergeraklah ketika harus."

"Pergilah ke dalam pertempuran dengan keyakinan bahwa Anda akan menang, bukan dengan harapan tidak akan kalah."

"Musuhmu dapat meramalkan langkahmu, tetapi dia tidak dapat meramalkan hatimu."

"Hancurkan musuhmu dengan menangkap hatinya."

--(Sun Tzu)--

“Adaptasi Lebih Penting daripada Prediksi, Manfaatkan Peluang Tak Terduga”

--(Nassim Nicholas)--

"Penciptaan bukanlah tanpa konsekuensi, dan kita bertanggung jawab atas hasil dari ambisi kita."

"Setiap tindakan kita memiliki konsekuensi, dan tugas kita adalah memikul beban dari karya kita sendiri."

"Keberhasilan tanpa etika adalah kehancuran yang menanti waktu."

"Aturlah ambisimu dengan bijaksana, sebab keinginan tanpa pertimbangan dapat membawa malapetaka."

--(Mary Shelley)--

KATA PENGANTAR

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ، الْحَمْدُ لِلَّهِ رَبِّ الْعَالَمِينَ وَالصَّلَاةُ وَالسَّلَامُ عَلَى أَشْرَفِ الْأَنْبِيَاءِ وَالْمُرْسَلِينَ سَيِّدِنَا وَمَوْلَانَا مُحَمَّدٍ وَعَلَى آلِهِ وَصَحْبِهِ أَجْمَعِينَ، أَمَّا بَعْدُ

Puji syukur senantiasa terucapkan kehadiran Allah Swt. atas limpahan nikmat sehingga skripsi yang berjudul “Kajian Struktur Dan Dinamika Solvasi Ion Mangan(III) Dalam Air Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular QM/MM (*Quantum Mechanics/Molecular Mechanics*)” ini dapat diselesaikan sebagai salah satu persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia. Sholawat serta salam selalu turunkan kepada Nabi Muhammad Saw. Semoga kelak mendapatkan syafaat beliau di *yaumul qiyamah*.

Penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan dorongan, semangat, bantuan dan ide-ide kreatif sehingga tahap demi tahap penyusunan skripsi ini telah selesai. Ucapan terima kasih tersebut secara khusus disampaikan kepada:

1. Allah SWT yang telah memberikan kelimpahan Rahmat, Nikmat, Rezekinya, kesabaran, serta akal yang sehat dalam proses penyusunan skripsi.
2. Ibu Prof. Khurul Wardati, M.Si. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Ibu Dr. Imelda Fajriyati, M.Si. selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
4. Bapak Priyagung Dhemi Widiakongko, S.Si., M.Sc. selaku dosen Pembimbing skripsi yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama studi sekaligus sebagai pembimbing skripsi yang secara ikhlas dan sabar telah meluangkan waktunya untuk membimbing, mengarahkan, dan memotivasi penulis dalam menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
5. Seluruh Dosen Program Studi Kimia dan Staf Karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
6. Segenap PLP Laboratorium Biologi Terpadu UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta dan yang telah membantu dalam pelaksanaan penelitian.
7. Ibuk, Bapak, dan keluarga besar yang memberikan dukungan uang jajan dan dorongan psikologis dalam proses menuntut ilmu serta penulisan tugas akhir.
8. Ibu Tutik, ibu Heni, Devarya, Gracia, Rafiq, Nabila, teman-teman ”Pencerahan”, serta Kimia angkatan 2020 UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta atas dukungan dalam kepenulisan dan bantuan selama penelitian.

9. Semua pihak yang belum dapat penulis sebutkan satu persatu atas bantuannya dalam penyelesaian skripsi ini.

Demi kesempurnaan skripsi ini, kritik dan saran sangat penulis harapkan. Penulis berharap skripsi ini bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan secara umum dan kimia secara khusus.

Yogyakarta, 12 Februari 2024



Ayyasy Mufid Habibullah



DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN TUGAS AKHIR	iii
.....	iv
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	iv
.....	v
NOTA DINAS KONSULATSI.....	v
.....	vii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	viii
HALAMAN MOTO	ix
KATA PENGANTAR.....	x
DAFTAR ISI	xii
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR.....	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
ABSTRAK	xvii
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah.....	4
C. Rumusan Masalah	4
D. Tujuan Penelitian.....	4
E. Manfaat Penelitian.....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI.....	5
A. Tinjauan Pustaka	5
B. Landasan Teori.....	7
1. Mangan.....	7
2. Solvasi Ion dalam Larutan.....	7
3. Simulasi Dinamika Molekular (DM)	9
4. Potensial Lennard-Jones.....	11
5. Analisis Struktur dan Dinamika Solvasi	12
C. Kerangka Berpikir dan Hipotesis Penelitian	15
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	17
A. Waktu dan Tempat Pelaksanaan Penelitian.....	17

B. Alat-Alat Penelitian.....	17
C. Bahan-Bahan Penelitian.....	17
D. Cara Kerja Penelitian.....	17
1. Penentuan Geometri Awal.....	17
2. Penentuan Kurva Lennard-Jones.....	17
3. Pengkondisian Simulasi QM/MM.....	18
4. Protokol Simulasi QM/MM.....	18
5. Penyusunan Potensial 2-badan dan 3-badan.....	18
E. Analisis Hasil Penelitian.....	18
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	19
A. Uji Parameter Potensial Lennard-Jones.....	19
B. Struktur Hidrasi Ion Mn^{3+}	21
1. Radial Distribution Function (RDF).....	21
2. <i>Angular Distribution Function</i> (ADF).....	24
C. Dinamika Hidrasi Ion Mn^{3+} Kompleks $[Mn(H_2O)_6]^{3+}$	25
1. <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD).....	27
2. <i>Root Mean Square Fluctuation</i> (RMSF).....	28
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	32
A. Kesimpulan.....	32
B. Saran.....	33
DAFTAR PUSTAKA.....	34
LAMPIRAN.....	39

DAFTAR TABEL

Tabel IV. 1 Parameter final Potensial Lennard-Jones 20



DAFTAR GAMBAR

Gambar II. 1 Struktur Hidrasi.....	8
Gambar II. 2 Skema Kotak Simulasi QM/MM	10
Gambar II. 3 Grafik Potensial Lennard-Jones	12
Gambar II. 4 Deskretisasi Ruang Evaluasi Fungsi Distribusi Radial.....	13
Gambar IV. 1 Perbandingan Kurva Potensial Lennard-Jones Hasil Simulasi dan Eksperimen	20
Gambar IV. 2 Fungsi Distribusi Mn^{3+} -O Hasil Simulasi	22
Gambar IV. 3 Fungsi Distribusi Mn^{3+} -H Hasil Simulasi	23
Gambar IV. 4 Fungsi Distribusi O-Mn-O Hasil Simulasi	25
Gambar IV. 5 Hasil Simulasi Dinamika Molekular Mn^{3+} -H ₂ O.....	26
Gambar IV. 6 Struktur Geometri $[Mn(H_2O)_6]^{3+}$ Hasil Simulasi Dinamika Molekular YASARA Dynamic	26
Gambar IV. 7 Perubahan Rata-rata Posisi Atom Hasil Simulasi	27
Gambar IV. 8 Rata-rata Fluktuasi Posisi Atom Hasil Simulasi	29
Gambar IV. 9 Kurva RMSF Hasil Simulasi pada Titik Terendah.....	30

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Penyelesaian Perhitungan Parameter Lennard-Jones Simulasi dan Eksperimen	39
Lampiran 2. Penyelesaian Perhitungan Nilai ADF yang diperoleh dari Simulasi Menggunakan Program LAMMPS.....	41
Lampiran 3. Perolehan Data RMSF dan Plot Fitting Oleh Program Script Python.	48
Lampiran 4. Berkas Trejectory Program LAMMPS (Lennard-Jones)	49
Lampiran 5. Pengkondisian Sistem Pelarut dalam Box Simulasi.....	56
Lampiran 6. Perhitungan Bilangan Koordinasi	58
Lampiran 7. <i>Curriculum Vitae</i>	60



ABSTRAK
KAJIAN STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI ION MANGAN(III) DALAM
AIR MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR QM/MM
(QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS)

Oleh :

Ayyasy Mufid Habibullah

20106030022

Pembimbing :

Priyagung Dhemi Widiakongko, S.Si., M.Sc.

Reaktivitas ion logam mangan dalam air dapat mempengaruhi sifat dan struktur dari kompleks yang terbentuk. Penelitian eksperimental belum bisa memprediksi terhadap sifat-sifat statik maupun dinamik yang diturunkan secara langsung dari interaksi ditingkat atom atau molekul. Penelitian ini dilakukan bertujuan untuk mempelajari struktur dan dinamika solvasi ion Mn^{3+} dalam air melalui simulasi dinamika molekul QM/MM.

Subjek dalam penelitian ini adalah ion Mn^{3+} , sedangkan objek dalam penelitian adalah struktur dan dinamika ion Mn^{3+} dalam air. Prosedur yang dilakukan yaitu menentukan dan menguji parameter simulasi sesuai dengan grafik potensial Lennard-Jones. Langkah selanjutnya menyusun dan memodifikasi program komputasi LAMMPS dan Gromacs untuk menyelesaikan persamaan potensial 2-badan dan 3-badan dengan menggunakan simulasi dinamika molekul QM/MM yang akan menghasilkan berupa data berkas *trajectory*. Selanjutnya berkas tersebut diolah kembali dan menghasilkan data berupa grafik RDF dan ADF. Dinamika dari pergerakan ion dan ligan akan ditinjau menggunakan perangkat lunak YASARA yang kemudian menghasilkan data RMSF dan RMSD.

Hasil penelitian yang telah dilakukan menunjukkan keteraturan struktur Mn^{3+} dalam air. Sudut yang terbentuk berdasarkan analisis ADF yaitu 89° dan 176° yang mengidentifikasi bentuk oktahedral dengan dikelilingi enam ligan air. Hasil analisis RMSD dan RMSF menunjukkan rata-rata nilai $\leq 2,5\text{\AA}$ dari hasil simulasi selama 500 piko detik. Hal ini menunjukkan bahwa ion dan ligan tidak memberikan fleksibilitas yang tinggi dan dapat dikatakan memiliki interaksi atau ikatan yang stabil. Kompleksasi ion mangan(III) dengan air yang stabil ini membuatnya lebih bersifat toksik dalam tubuh.

Kata Kunci: *Dinamika Molekular, Solvasi, RDF, ADF, QM/MM, ion Mn^{3+} , air.*

ABSTRACT
**STUDY OF THE STRUCTURE AND DYNAMICS OF MANGANESE(III) ION
SOLVATION IN WATER THROUGH QM/MM MOLECULAR DYNAMICS
SIMULATION (QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS)**

By:
Ayyasy Mufid Habibullah
20106030022

Adviser:
Priyagung Dhemi Widiakongko, S.Si., M.Sc.

The reactivity of manganese metal ions in water can influence the properties and structure of the complexes formed. Experimental research has not been able to predict the static and dynamic properties directly derived from interactions at the atomic or molecular level. This study aims to investigate the structure and dynamics of Mn^{3+} ion solvation in water through QM/MM molecular dynamics simulations.

The subject of the research is Mn^{3+} ions, while the object is the structure and dynamics of Mn^{3+} ions in water. The procedure involved determining and testing simulation parameters according to the Lennard-Jones potential graph. The next step was to develop and modify computational programs in LAMMPS and Gromacs to solve the 2-body and 3-body potential equations using QM/MM molecular dynamics simulations, which resulted in trajectory file data. The trajectory files were then processed to generate RDF and ADF graphs. The dynamics of ion and ligand movements were analyzed using YASARA software, which produced RMSF and RMSD data.

The research results showed the regularity of Mn^{3+} ion structure in water. The angles formed, based on ADF analysis, were 89° and 176° , identifying an octahedral shape surrounded by six water ligands. The RMSD and RMSF analysis results indicated average values of $\leq 2.5 \text{ \AA}$ from the simulation results over 500 picoseconds. This suggests that the ion and ligands do not exhibit high flexibility and can be considered to have stable interactions or bonds. The stable complexation of manganese(III) ions with water makes them more toxic in the body.

Keywords: *Molecular Dynamics, Solvation, RDF, ADF, QM/MM, ion Mn^{3+} , water.*

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Mangan (Mn) merupakan salah satu dari jenis logam transisi yang jumlahnya melimpah pada kerak bumi. Mangan dalam air umumnya berada dalam bentuk ion manganous atau senyawa dengan zat organik kompleks. Kemampuan ion mangan untuk teroksidasi menjadi bentuk yang lebih tinggi seperti mangan(III) dalam kondisi yang sesuai cenderung lebih reaktif. Kajian kompleksasi ion mangan(III) dengan molekul air memiliki toksisitas yang lebih tinggi dibanding ion mangan tunggal. Oleh karena itu, penting untuk memahami interaksi antara ion mangan dan air serta potensi toksisitasnya pada kesehatan manusia. (Kertas, 2020).

Beberapa upaya telah dilakukan dalam mempelajari mengenai mangan dalam tubuh. Penelitian yang dilakukan Zuzanna et al. (2021) telah mengkaji secara *in vitro* dan *in vivo* toksisitas senyawa mangan berukuran nano. Penelitian tersebut menjelaskan bahwa mekanisme utama toksisitas melibatkan induksi stres oksidatif yang menyebabkan kerusakan DNA dan apoptosis. Namun, penelitian tersebut menghasilkan kesimpulan yang berbeda mengenai toksisitas mangan dari data percobaan *in vitro* dan *in vivo* nya. Penelitian lain yang telah dilakukan oleh Fernandes et al. (2019) juga mengkaji paparan mangan beracun terhadap sel tubuh manusia, namun hasil analisis transkriptom mengungkapkan adanya respon sel yang berbeda. Maka dari kedua hasil penelitian tersebut belum cukup untuk mengetahui secara pasti mengenai mekanisme reaktifitas dari mangan, sehingga perlu adanya tinjauan mengenai perilaku logam mangan melalui metode yang lain.

Interaksi antara kation logam dengan ligan netral seperti air dan amoniak telah banyak dikaji. Hal ini disebabkan karena hampir sepertiga dari protein memerlukan ion logam dalam struktur maupun fungsinya. Banyak di antara ikatan protein dengan ion logam melibatkan nitrogen (N) atau molekul yang mengandung atom oksigen (O) sebagai atom yang berfungsi sebagai ligan. Penelitian ini akan menggunakan atom O sebagai ligannya. Solvasi merupakan kristal ionik terlarut di dalam suatu pelarut yang berisi suatu molekul-molekul yang akhirnya terbentuk asosiasi elektronik dengan suatu ion, dan jika digunakan pelarut air maka disebutlah hidrasi. Penelitian mengenai hidrasi ion, umumnya sering digunakan pelarut air yaitu seperti penentuan jumlah hidrasi ion, interaksi energi antara ion dan molekul air, serta laju pertukaran molekul air terkoordinasi di sekitar ion.

Struktur dan dinamika hidrasi dapat ditentukan melalui dua cara, yaitu melalui eksperimen atau simulasi komputer. Penentuan struktur dan dinamika hidrasi melalui eksperimen memerlukan beberapa peralatan, antara lain: difraksi sinar-X, difraksi elektron, difraksi sinar neutron, spektroskopi NMR dan beberapa peralatan yang berdasarkan metode hamburan, sedangkan metode spektroskopi menggunakan Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS), X-ray Absorption Near Edge Structure (XANES), resonansi magnetik inti dan Raman infra merah (Pranowo, dkk, 2002). Metode spektroskopi dan hamburan banyak digunakan dalam penelitian secara eksperimental. Kelemahan pada penentuan struktur solvasi ion secara eksperimental yaitu belum mampu menjelaskan struktur solvasi kedua dari ion, seperti jumlah molekul solven yang terkoordinasi dengan jarak interaksi antara ion dan molekul solven (Ohtaki dan Radnai, 1993). Oleh sebab itu diperlukan suatu pendekatan untuk menjelaskan kekurangan, melalui simulasi komputer. Melalui simulasi komputer akan lebih mudah untuk dilakukan penelitian, Hal ini dikarenakan jumlah atom yang lebih banyak apalagi jika digunakan pelarut non air yang memiliki banyak energi interaksi yang harus dihitung pada saat pembuatan potensial intermolekul (Ohtaki, H. 1993).

Berkembangnya metode kimia komputasi membuat para peneliti dapat melakukan kajian mekanisme interaksi ion yang sulit dilakukan secara *in vitro* maupun *in vivo*. Simulasi dinamika molekul merupakan sebuah metode yang dapat digunakan untuk melakukan prediksi terhadap sifat-sifat statik maupun dinamik yang diturunkan secara langsung dari interaksi ditingkat atom atau molekul. Mengingat belum ada alternatif lainnya yang dapat digunakan untuk memecahkan persoalan tersebut hingga ketinggian yang cukup rinci, maka metode simulasi dinamika molekul ini merupakan alternatif yang dapat digunakan dalam penelitian baik untuk ilmu mumi maupun rekayasa. Terdapat dua buah persoalan utama dalam menggunakan metode simulasi dinamika molekul ini, pertama adalah menentukan model energi potensial yang mengatur hubungan antara atom atom atau molekul molekul yang saling berinteraksi di dalam sistem. Berdasarkan dari model energi potensial inilah gaya - gaya yang mempengaruhi dinamika sistem dapat ditentukan. Kedua yaitu menentukan algoritma dan metode numerik yang tepat dan efisien untuk digunakan dalam memecahkan persoalan dinamika yang kompleks ini (Manna *et al.*, 2014).

Kajian terbaru mengenai interaksi ion mangan (III) dengan pelarut biologis telah dilakukan. Penelitian yang dilakukan oleh Malloum dan Conradie (2023) dengan memodelkan ion mangan terlarut dalam senyawa kompleks pada pelarut air dan amonia dengan model solvasi kontinum kluster. Penelitian yang dilakukan tersebut belum sampai

pada simulasi dinamika molekular, namun hasil penelitian ini cukup menjadi dasar dalam penelitian ke tahap yang lebih kompleks. Keterbatasan model solvasi kontinum kluster yang hanya mendapatkan data dari segi energi absolut, energi bebas, dan entalpi dalam mengkaji kelarutan, hal ini dapat kaji lebi lanjut dengan metode simulasi dinamika molekular QM/MM (*Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*). Kelebihan metode gabungan antara *Quantum mechanic* dan *Molecular Mechanic* ini menghasilkan perhitungan yang lebih akurat. Simulasi dengan metode dinamika molekul selain dapat memberikan informasi bentuk struktur molekul, juga dapat memberikan informasi mengenai dinamika molekul, karena metode ini dapat menggambarkan sifat struktur molekul sebagai fungsi waktu (Armunanto, dkk. 2004).

Secara teoritis, struktur dan dinamika solvasi ion dapat ditentukan melalui simulasi DM klasik dan DM QM/MM. Simulasi DM QM/MM meberikan hasil simulasi akurat jika dibandingkan dengan simulasi DM klasik. Simulasi DM MK/MM memberikan hasil simulasi akurat, disebabkan karena mampu digunakan dalam skala waktu yang kecil (pikodetik). Penelitian mengenai suatu solvasi dari ion logam menggunakan simulasi DM QM/MM menjadi penting karena melalui simulasi tersebut dapat mendapatkan informasi mengenai dinamika solvasi dalam skala femkodetik, dimana melalui instrumen dan eksperimen belum tentu mencapainya (Rode dan Hofer, 2006). Ketidakesesuaian metode eksperimen dengan teori karena terbatasnya metode eksperimen dalam melakukan skala waktu yang kecil (pikodetik), sehingga untuk melakukan lebih lanjut pada ivestigasi struktur secara eksperimen akan sulit. Hal ini disebabkan karena suatu sistem yang dilakukan kurang stabil atau tingkat pengenceran yang tinggi melalui cara investigasi difraksi sinar-X atau netron dirasa tidak mungkin.

Berdasarkan uraian dari penelitian sebelumnya, kajian interaksi ion mangan (III) dengan pelarut air perlu dilakukan. Hal ini karena belum banyak kajian yang mempelajari interaksi ion mangan (III) dalam pelarut air dan penelitian terdahulu belum mencapai ke tahap kajian berdasarkan simulasi dinamika molekularnya. Penelitian ini akan menggunakan metode QM/MM untuk perhitungannya. Metode QM/MM dipilih karena memiliki keunggulan dalam menghasilkan perhitungan yang lebih akurat dibandingkan metode solvasi kontinum kluster dan mekanika klasik pada penelitian sebelumnya, hal ini karena metode QM/MM menggunakan perhitungan gabungan antara *Quantum mechanic* dan *Molecular Mechanic*. Metode ini juga mampu menggambarkan struktur molekul uji, sehingga dapat memberikan informasi mengenai dinamika molekulnya. Hasil yang

diperoleh dari simulasi dinamika molekul dengan metode QM/MM diharapkan dapat menggambarkan interaksi ion mangan (III) dalam pelarut air dengan lebih mendekati pada kondisi lingkungan yang sesungguhnya.

B. Batasan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dipaparkan diatas, maka batasan masalah pada penelitian ini sebagai berikut:

1. Metode penentuan struktur dan dinamika solvasi ion Mn(III) dalam air yang digunakan adalah metode dinamika molekuler *Quantum Mechanics/Molecular Mechanics*.
2. Batasan simulasi dilakukan di dalam *virtual box* dengan berfokus pada interaksi antara senyawa Mn dengan air (H₂O).
3. Data base yang digunakan yaitu big data OpenKIM

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah yang telah dipaparkan, maka rumusan masalah yang dapat dibuat sebagai berikut:

1. Bagaimana struktur hidrasi dari ion Mn(III) berdasarkan simulasi dinamika molekul *Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*?
2. Bagaimana dinamika hidrasi dari ion Mn(III) berdasarkan simulasi dinamika molekul *Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*?

D. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah yang telah dipaparkan, maka penelitian yang akan dilakukan bertujuan untuk:

1. Mempelajari struktur solvasi ion Mn(III) dalam air berdasarkan simulasi dinamika molekul *Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*.
2. Mempelajari dinamika solvasi ion Mn(III) dalam air berdasarkan simulasi dinamika molekul *Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*.

E. Manfaat Penelitian

Berdasarkan tujuan penelitian diatas, manfaat yang diharapkan dari hasil penelitian yang akan dilakukan yaitu dapat memberikan kebermanfaatn yang signifikan bagi pengembangan ilmu kimia terutama dalam bidang kimia komputasi. Adanya hasil penelitian ini diharap dapat digunakan dalam mempelajari lebih lanjut mengenai interaksi ion logam dan ligan melalui kajian struktur dan dinamika solvasi.

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian struktur dan dinamika ion mangan dalam air dengan simulasi dinamika molekular QM/MM yang telah dilakukan dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Berdasarkan hasil analisis dari nilai RDF, ADF dan *snapshot* dari *software* YASARA *Dynamic*, struktur sistem hidrasi ion Mn^{3+} menunjukkan pada simulasi 2-badan struktur molekul Mn-O memiliki struktur teratur yang ditandai dengan puncak tunggal pada jarak ikatan tertentu, serta tidak terjadi tumpang tindih antara struktur molekul Mn-H dan pada simulasi 3-badan struktur molekul O-Mn-O menunjukkan 2 sudut puncak sesuai referensi yaitu 89° dan sudut 176° , sehingga membentuk geometri oktahedral dengan bentuk senyawa kompleks $[Mn(H_2O)_6]^{3+}$.
2. Dinamika dari proses simulasi yang melibatkan ion Mn^{3+} dalam air sebagai ligan menunjukkan hasil bahwa pada simulasi dinamika molekular nilai RMSD yang didapatkan $\leq 2,0 \text{ \AA}$ menandakan struktur ion relatif stabil dan tidak mengalami perubahan besar selama simulasi dan nilai RMSF yang didapatkan adalah $\leq 2,5 \text{ \AA}$ menandakan bahwa ion dan ligan tidak memberikan fleksibilitas yang tinggi, sehingga dapat dikatakan memiliki interaksi atau ikatan yang stabil serta dapat berperan aktif.

B. Saran

1. Penelitian selanjutnya perlu mempelajari lebih lanjut rumus turunan dari perhitungan fisika quantum untuk bisa memperoleh data yang lebih teliti
2. Analisis struktur molekul dapat ditambahkan parameter DFT, karena penelitian mengenai DFT sudah mulai dikembangkan di tahun 2023 ini.
3. Saran untuk peneliti selanjutnya untuk bisa lebih cakap dalam mengolah skript pemrograman dengan bahasa pemrograman C++ dan Python dikarenakan terbatasnya *software* yang dimiliki oleh kampus.
4. Peningkatan versi dari YASARA Dynamic ke YASARA Structure dirasa perlu, pengembangan penggunaan software bisa lebih luas diluar tema dalam penelitian ini.
5. Saran untuk prodi kimia agar bisa berlangganan software kimia komputasi lebih banyak lagi, dikarenakan penelitian nanotechnology sudah mulai dikembangkan sangat pesat, agar skripsi yang di ampu oleh prodi kimia tidak hanya sekedar judul analisis kuantitatif seperti praktikum saja.

DAFTAR PUSTAKA

- Avicennia, S., & Partana, C. F. (2018). Struktur dan Dinamika Solvasi Ion V^{2+} dalam Air Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekul Mekanika Molekul. *Jurnal Kimia Dasar*, 7(2), 1–7.
- Armunanto, R., Schwenk, C.F., Bambang Setiaji, A.H., and Role, B.M., (2003). Classical and QM/MM Molecular Dynamics Simulations of Co^{2+} in water, *J.Chem. Phys.* 295, 63-73.
- Bakradze, G., & Kuzmin, A. (2022). Octahedral Tilting in Homologous Perovskite Series $CaMoO_3$ - $SrMoO_3$ - $BaMoO_3$ Probed by Temperature-Dependent EXAFS Spectroscopy. *Materials*, 15(21), 7619. <https://doi.org/10.3390/ma15217619>
- Curro, J. G., Webb, E. B., Grest, G. S., Weinhold, J. D., Pütz, M., & McCoy, J. D. (1999). Comparisons between integral equation theory and molecular dynamics simulations for realistic models of polyethylene liquids. *The Journal of Chemical Physics*, 111(19), 9073–9081. <https://doi.org/10.1063/1.480335>
- De Araujo, A. S., Sonoda, M. T., Piro, O. E., & Castellano, E. E. (2007). Development of New Cd^{2+} and Pb^{2+} Lennard-Jones Parameters for Liquid Simulations. *The Journal of Physical Chemistry B*, 111(9), 2219–2224. <https://doi.org/10.1021/jp064835t>
- Dong, Y., Liao, M., Meng, X., & Somero, G. N. (2018). Structural flexibility and protein adaptation to temperature: Molecular dynamics analysis of malate dehydrogenases of marine molluscs. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(6), 1274–1279. <https://doi.org/10.1073/pnas.1718910115>
- Faro, T. M. C., Thim, G. P., & Skaf, M. S. (2010). A Lennard-Jones plus Coulomb potential for Al^{3+} ions in aqueous solutions. *The Journal of Chemical Physics*, 132(11), 114509. <https://doi.org/10.1063/1.3364110>
- Frick, R. J., Pribil, A. B., Hofer, T. S., Randolf, B. R., Bhattacharjee, A., & Rode, B. M. (2009). Structure and Dynamics of the U^{4+} Ion in Aqueous Solution: An ab Initio Quantum Mechanical Charge Field Molecular Dynamics Study. *Inorganic Chemistry*, 48(9), 3993–4002. <https://doi.org/10.1021/ic801554p>
- Gupta, R., Kartha, T. R., & Mallik, B. S. (2019). Solvation Structure and Dynamics of Alkali Metal Halides in an Ionic Liquid from Classical Molecular Dynamics Simulations. *ACS Omega*, 4(22), 19556–19564. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01672>

- Heine, D. R., Grest, G. S., & Curro, J. G. (2005). Structure of Polymer Melts and Blends: Comparison of Integral Equation Theory and Computer Simulations. In C. Dr. Holm & K. Prof. Dr. Kremer (Eds.), *Advanced Computer Simulation* (Vol. 173, pp. 209–252). Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/b99431>
- Jaka Fajar Fatriansyah, Syarafina Ramadhanisa Kurnianto, Siti Norasmah Surip, Agrin Febrian Pradana, & Ara Gamaliel Boanerges. (2023). Molecular Docking and Molecular Dynamics of Herbal Plants *Phylantus Niruri* Linn (Green Meniran) towards of SARS-CoV-2 Main Protease. *Evergreen*, 10(2), 731–741. <https://doi.org/10.5109/6792822>
- Kanhaiya, K., Kim, S., Im, W., & Heinz, H. (2021). Accurate simulation of surfaces and interfaces of ten FCC metals and steel using Lennard–Jones potentials. *Npj Computational Materials*, 7(1), 17. <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00478-1>
- Karyawati, T., & Ruswanto. (2014). Simulasi Dinamika Molekular Senyawa 2,6-Dimethyl-4. *Paper Knowledge . Toward a Media History of Documents*.
- Kertas, T. (2020). *Mikroba pengoksidasi mangan dan mangan biogenik oksida: Karakterisasi, mekanisme oksidasi Mn(II). Dan relevansi lingkungan*. 1(ii).
- Kubyskhina, E., & Unge, M. (2019). Impact of interfacial structure on the charge dynamics in nanocomposite dielectrics. *Journal of Applied Physics*, 125(4), 045109. <https://doi.org/10.1063/1.5078800>
- Kühn, F. E., Groarke, M., Bencze, É., Herdtweck, E., Prazeres, A., Santos, A. M., Calhorda, M. J., Romão, C. C., Gonçalves, I. S., Lopes, A. D., & Pillinger, M. (2002). Octahedral Bipyridine and Bipyrimidine Dioxomolybdenum(VI) Complexes: Characterization, Application in Catalytic Epoxidation, and Density Functional Mechanistic Study. *Chemistry - A European Journal*, 8(10), 2370. [https://doi.org/10.1002/1521-3765\(20020517\)8:10<2370::AID-CHEM2370>3.0.CO;2-A](https://doi.org/10.1002/1521-3765(20020517)8:10<2370::AID-CHEM2370>3.0.CO;2-A)
- Li, D.-D., Wu, T.-T., Yu, P., Wang, Z.-Z., Xiao, W., Jiang, Y., & Zhao, L.-G. (2020). Molecular Dynamics Analysis of Binding Sites of Epidermal Growth Factor Receptor Kinase Inhibitors. *ACS Omega*, 5(26), 16307–16314. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c02183>
- Li, P., Roberts, B. P., Chakravorty, D. K., & Merz, K. M. (2013). Rational Design of Particle Mesh Ewald Compatible Lennard-Jones Parameters for +2 Metal Cations in Explicit

- Solvent. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 9(6), 2733–2748.
<https://doi.org/10.1021/ct400146w>
- Ma, S., Li, K., Zhang, J., Jiang, C., Bi, Z., Sun, M., & Wang, Z. (2021). Effect of MnO content on slag structure and properties under different basicity conditions: A molecular dynamics study. *Journal of Molecular Liquids*, 336, 116304.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116304>
- Malloum, A., & Conradie, J. (2023). Solvation of Manganese(III) Ion in Water and in Ammonia. *Journal of Physical Chemistry A*, 127(5), 1103–1111.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c05913>
- Mandal, U., Rizzoli, C., Chakraborty, B., Karmakar, S., Roy, S., Mandal, S., & Bandyopadhyay, D. (2023). Synthesis, crystal structure, and characterization of two new end-to-end 1D pseudohalide bridged manganese(III) complexes [Preprint]. In Review. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-3281596/v1>
- Manna, P., Seth, S. K., Mitra, M., Choudhury, S. R., Bauzá, A., Frontera, A., & Mukhopadhyay, S. (2014). Experimental and computational study of counterintuitive ClO₄⁻... ClO₄⁻ interactions and the interplay between $\pi^+-\pi$ and anion... π^+ interactions. *Crystal growth & design*, 14(11), 5812-5821.
- Mardiyah, R. U., Arkundato, A., Misto, & Purwandari, E. (2020). Energy Cohesive Calculation for Some Pure Metals Using the Lennard-Jones Potential in Lammmps Molecular Dynamics. *Journal of Physics: Conference Series*, 1491(1), 012020.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1491/1/012020>
- Maya Mardiana, R. (2020). Simulasi Dinamika Molekular Senyawa Pyridin Pada Protein 2Xnb Sebagai Antikanker Menggunakan Aplikasi Gromas. *Simulasi Dinamika Molekular Senyawa Pyridin Pada Protein 2Xnb Sebagai Antikanker Menggunakan Aplikasi Gromas*, 6, 274–282.
- Mohammed, A. M., Loeffler, H. H., Inada, Y., Tanada, K., & Funahashi, S. (2005). Quantum mechanical/molecular mechanical molecular dynamic simulation of zinc(II) ion in water. *Journal of Molecular Liquids*, 119(1–3), 55–62.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2004.10.008>
- Muttaqin, F. Z. (2019). Studi Molecular Docking, Molecular Dynamic, dan Prediksi Toksisitas Senyawa Turuna Alkaloid Naftiridin Sebagai Inhibitor Protein Kasein

- Kinase 2- α Pada Kanker Leukimia. *Pharmacoscrypt*, 2(1), 49–64.
<https://doi.org/10.36423/pharmacoscrypt.v2i1.241>
- Muttaqin, F. Z., Restisari, I. H., & Muhammad, H. N. (2021). Study of Molecular Docking, Molecular Dynamic and Toxicity Prediction of Several Quinoline Alkaloid Derivatives as a Bruton Tyrosine Kinase Inhibitor as Anti-Leukemia. *Journal of Drug Delivery and Therapeutics*, 11(6-S), 70–78.
<https://doi.org/10.22270/jddt.v11i6-S.5135>
- Pahrudin, M. (2017). Risiko Paparan Logam Berat Pada Air Sungai. *JURNAL KESEHATAN LINGKUNGAN: Jurnal Dan Aplikasi Teknik Kesehatan Lingkungan*, 14(2), 525. <https://doi.org/10.31964/jkl.v14i2.47>
- Partana, C., Suwardi, & Salim, A. (2019). Structure and dynamics of Hg²⁺ in aqueous solution: An Ab Initio QM/MM molecular dynamics study. *Journal of Physics: Conference Series*, 1156, 012012. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1156/1/012012>
- Partana, R. M. dan C. F. (2018). Struktur dan Dinamika Hidrasi Ion Zn²⁺ Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekular Klasik. *Jurnal Kimia Dasar*, 7, 23–28.
- Pranowo, H.D. (2002). Pengantar Kimia Komputasi, Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC). Yogyakarta: Universitas Gajah Mada.
- Pranowo, H.D. dan Hetadi, A.K.R. 2011. *Pengantar Kimia Komputasi*. Bandung: Lubuk Agung.
- Rode, B.M., and Hofer, T.S. (2006). How to Access Structure and Dynamics of Solutions: the Capabilities of Computational Methods, *Pure Applied Chemistry*, 78, 525–539.
- Safitri, B. R. A. (2019). Analisis Kandungan Mineral Logam Mangan (Mn) Di Kawasan Pertambangan Desa Bangkang. *Jurnal Ilmiah IKIP Mataram*, 6(1), 9–15.
- Sathiyamani, B., Daniel, E. A., Ansar, S., Esakialraj, B. H., Hassan, S., Revanasiddappa, P. D., Keshavamurthy, A., Roy, S., Vetrivel, U., & Hanna, L. E. (2023). Structural analysis and molecular dynamics simulation studies of HIV-1 antisense protein predict its potential role in HIV replication and pathogenesis. *Frontiers in Microbiology*, 14, 1152206. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2023.1152206>
- Wang, D. G., Fernandez, H., & Ramang, R. (2016). Analisis Efektivitas Instalasi Pengolahan Air Limbah Dan Penilaian Masyarakat Terhadap Pengolahan Limbah

Cair Rumah Sakit Umum W. Z. Yohanes Kupang. Bumi Lestari *Journal of Environment*, 16(2), 92. <https://doi.org/10.24843/blje.2016.v16.i02.p02>

Zaraska, L., Stępniewski, W. J., Ciepiela, E., & Sulka, G. D. (2013). The effect of anodizing temperature on structural features and hexagonal arrangement of nanopores in alumina synthesized by two-step anodizing in oxalic acid. *Thin Solid Films*, 534, 155–161. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.02.056>

