

**STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI
KROMIUM(III) DALAM AMONIA: STUDI
SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR *QUANTUM*
MECHANICS/ MOLECULAR MECHANICS
(*QM/MM*)**

SKRIPSI

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



**Oleh:
Muhammad Rafiq Al Mahdi
20106030050**

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

2024



PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-824/Un.02/DST/PP.00.9/06/2024

Tugas Akhir dengan judul : STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI KROMIUM(III) DALAM AMONIA:
STUDI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR QUANTUM MECHANICS/
MOLECULAR MECHANICS (QM/MM)

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : MUHAMMAD RAFIQ AL MAHDI
Nomor Induk Mahasiswa : 20106030050
Telah diujikan pada : Senin, 27 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: 665efcb7281ee



Penguji I

Endaruji Sedyadi, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 665781b1b0c8



Penguji II

Sudarlin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 66545a3b092d



Yogyakarta, 27 Mei 2024
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 665ed428435bc



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 : Muhammad Rafiq Al Mahdi
NIM : 20106030050
Judul Skripsi : Struktur Dan Dinamika Solvasi Kromium(III) Dalam Amonia: Studi Simulasi Dinamika Molekular *Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics (QM/MM)*

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.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 6 Mei 2024

Pembimbing

Priyagung Dhemi Widiakongko, S.Si., 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 : Muhammad Rafiq Al Mahdi
NIM : 20106030050
Judul Skripsi. : Struktur Dan Dinamika Solvasi Kromium(III) Dalam Amonia: Studi Simulasi Dinamika Molekular *Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics (QM/MM)*

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, 31 Mei 2024
Konsultan

Endarujy Sedyadi, M.Sc.
NIP. 19820205 201503 1 003



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 : Muhammad Rafiq Al Mahdi
NIM : 20106030050
Judul Skripsi : Struktur Dan Dinamika Solvasi Kromium(III) Dalam Amonia: Studi Simulasi Dinamika Molekular *Quantum Mechanics' Molecular Mechanics (QM/MM)*

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, 31 Mei 2024

Konsultan

Sudarlin, M.Si.
NIP. 19850611 201503 1 002

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Muhammad Rafiq Al Mahdi
NIM : 20106030050
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul “**Struktur Dan Dinamika Solvasi Kromium(III) Dalam Amonia: Studi Simulasi Dinamika Molekular *Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics (QM/MM)***” 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, 6 Mei 2024



Muhammad Rafiq Al Mahdi
NIM. 20106030050

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:

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

Ibu dan Ayah yang senantiasa memberikan do'a, motivasi, dan dukungan untuk menyelesaikan tugas akhir ini.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN MOTO

“Sesungguhnya sesudah kesulitan itu ada kemudahan”

--(Qs. Al-Insyirah: 5-6)--

“You can’t have a better tomorrow if you’re still thinking
about yesterday”

--(Charles F. Kettering)--

“If you get tired, learn to rest not to quit”

--(Anonymous)--



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan nikmat serta karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “*Struktur Dan Dinamika Solvasi Kromium(III) Dalam Amonia: Studi Simulasi Dinamika Molekular Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics (QM/MM)*”.

Skripsi ini dibuat sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Kimia (S.Si) di Program Studi S1 Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta. Penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan dorongan, semangat, bantuan dan ide-ide kreatif sehingga tahap demi tahap penulisan skripsi ini telah selesai. Ucapan terima kasih tersebut secara khusus disampaikan kepada:

1. Ibu Dr. Khurul Wardati, M.Si. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Ibu Dr. Imelda Fajriyati, M.Si. selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. 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.
4. Seluruh Dosen Program Studi Kimia dan Staf Karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu sehingga penyusunan skripsi ini dapat berjalan dengan lancar.
5. Segenap PLP Laboratorium Biologi Terpadu UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta dan yang telah membantu dalam pelaksanaan penelitian.
6. Ibu, ayah, dan keluarga yang memberikan dukungan dalam proses menuntut ilmu dan penulisan tugas akhir.

7. Ibu, Bapak, dan keluarga yang memberikan dukungan uang dan dorongan psikologis dalam prose menyelesaikan tugas akhir.
8. Eko, Dimas, Fian, Fuad, Rizky, Ayyas, Sofia, 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, 5 Mei 2024



Penulis

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
HALAMAN NOTA DINAS KONSULTASI.....	iii
HALAMAN PERNYATAAN.....	v
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	vi
HALAMAN MOTO.....	vii
KATA PENGANTAR.....	viii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR GAMBAR.....	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
ABSTRAK.....	xiii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang Masalah.....	1
B. Batasan Masalah.....	6
C. Rumusan Masalah.....	6
D. Tujuan Penelitian.....	7
E. Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI.....	9
A. Tinjauan Pustaka.....	9
B. Landasan Teori.....	15
1. Kromium.....	15
2. Amonia sebagai Ligan.....	16
3. Solvasi Ion dalam Larutan.....	18
4. Struktur dan Dinamika Solvasi Ion dalam Larutan.....	19
5. Simulasi Dinamika Molekular QM/MM.....	20
6. Potensial Lennard-Jones.....	24
7. Analisis Struktur dan Dinamika Ion Suatu Sistem Solvasi.....	25
C. Kerangka Berpikir.....	30
BAB III METODE PENELITIAN.....	33
A. Waktu dan Tempat Pelaksanaan Penelitian.....	33
B. Alat-Alat Penelitian.....	33
C. Bahan-Bahan Penelitian.....	34
D. Prosedur Kerja Penelitian.....	34
E. Teknik Analisis Data.....	36
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	37
A. Potensial Lennard-Jones Cr-NH ₃	37

B. Analisis Struktur Solvasi Ion Logam dalam Sistem Pelarut	40
1. RDF (Radial Distribution Function).....	40
2. ADF (Angular Distribution Function)	43
C. Dinamika Solvasi Ion Logam dalam Sistem Pelarut.....	45
1. RMSD (Root Mean Square Deviation).....	46
2. RMSF (Root Mean Square Fluctuation).....	48
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	51
A. Kesimpulan	51
B. Saran.....	52
DAFTAR PUSTAKA	53
LAMPIRAN.....	58



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
 YOGYAKARTA

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Informasi yang digunakan dalam perhitungan potensial Lennard-Jones	37
------------------------------------------------------------------------------------	----

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Kotak Simulasi Dinamika Molekular QM/MM21	
Gambar 2.2 Kurva Potensial Lennard-Jones	25
Gambar 2.3 Kurva RDF pada Dinamika Molekular.....	26
Gambar 4.1 Kurva Potensial Lennard-Jones Eksperimen dan Simulasi.....	38
Gambar 4.2 Hasil Analisis RDF dari interaksi Cr-N dan Cr-H	41
Gambar 4.3 Analisis ADF pada ion logam Cr ³⁺ dalam amonia	44
Gambar 4.4 Hasil Kompleks Geometri [Cr(NH ₃) ₆] ³⁺	45
Gambar 4.5 Kotak Simulasi Ion Logam Cr dalam Amonia .	46
Gambar 4.6 Analisis RMSD pada Kompleks [Cr(NH ₃) ₆] ³⁺ .	48
Gambar 4.7 Analisis RMSF pada Kompleks [Cr(NH ₃) ₆] ³⁺ ..	49

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Perhitungan Parameter Lennard-Jones Simulasi dan Eksperimen	58
Lampiran 2 File Trajectory Lennard-Jones (LAMMPS).....	59
Lampiran 3 File Trajectory dan Penyelesaian Perhitungan Nilai RDF dan ADF (LAMMPS).....	61
Lampiran 4 Perhitungan Jumlah Koordinasi pada interaksi Cr dengan amonia.....	64
Lampiran 5 Perhitungan Jumlah Molekul Amonia dalam Kotak simulasi.....	65
Lampiran 6. Curriculum Vitae	67

ABSTRAK
STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI
KROMIUM(III) DALAM AMONIA: STUDI
SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR *QUANTUM*
MECHANICS/ MOLECULAR MECHANICS
(QM/MM)

Oleh :
Muhammad Rafiq Al Mahdi
20106030050

Studi simulasi dinamika molekular dengan menggunakan metode QM/MM (*Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics*) telah dilakukan. Ion logam ini berpotensi menyebabkan toksik jika masuk kedalam tubuh. Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari struktur dan dinamika solvasi kromium dalam amonia melalui studi simulasi dinamika molekular QM/MM.

Pada penelitian subjek yang digunakan adalah Cr^{3+} dengan objek penelitian struktur dan dinamika ion Cr dalam amonia. Penelitian diawali dengan menentukan parameter simulasi dengan potensial Lennard-Jones. Simulasi diatur dalam kotak simulasi dengan panjang $40 \times 40 \times 40$ dengan satuan waktu *picosecond* (ps). Selanjutnya, simulasi struktur dan dinamika molekular QM/MM dilakukan pada analisis potensial 2-badan dan 3-badan menggunakan LAMMPS dengan modifikasi dalam penyelesaian persamaan yang hasilnya berupa data trajectory. Data yang diperoleh nantinya dipresentasikan dalam bentuk grafik RDF dan ADF. Analisis RMSD dan RMSF diperoleh dari dinamika solvasi pada interaksi ion dengan ligan yang diproses dalam perangkat lunak GROMACS.

Analisis distribusi sudut yang dilakukan memperoleh hasil 91° dan 178° yang mengindikasikan geometri terbentuk adalah oktahedral yang dikelilingi ligan amonia berjumlah enam pada Cr. Lalu, untuk sifat dinamika solvasi dihasilkan dari data RMSD dan RMSF menunjukkan stabil dengan hasil simulasi nilai $\text{RMSD} \leq 2 \text{ \AA}$ dan nilai $\text{RMSF} \leq 2,5 \text{ \AA}$. Hasil yang diperoleh dari penelitian pada ion Cr^{3+} dalam amonia menunjukkan kesesuaian.

Kata Kunci : *ion Cr^{3+} , amonia, solvasi, simulasi dinamika molekular QM/MM*

ABSTRACT
STRUCTURE AND DYNAMICS OF CHROMIUM(III)
SOLVATION IN AMMONIA: SIMULATION STUDY OF
MOLECULAR DYNAMICS QUANTUM MECHANICS
(QM/MM)

By :
Muhammad Rafiq Al Mahdi
20106030050

Molecular dynamics simulation studies using the QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) method have been carried out. These metal ions have the potential to cause toxicity if they enter the body. This research aims to study the structure and dynamics of chromium solvation in ammonia through QM/MM molecular dynamics simulation studies.

In the research, the subject used was Cr³⁺ with the research object being the structure and dynamics of Cr ions in ammonia. The research begins by determining the simulation parameters with the Lennard-Jones potential. The simulation is arranged in a simulation box with a length of 40x40x40 with picosecond (ps) time units. Next, QM/MM molecular structure and dynamics simulations were carried out on 2-body and 3-body potential analysis using LAMMPS with modifications in solving equations whose results were in the form of trajectory data. The data obtained will later be presented in the form of RDF and ADF graphs. RMSD and RMSF analyzes were obtained from the solvation dynamics of ion-ligand interactions processed in GROMACS software.

The angle distribution analysis carried out obtained results of 91° and 178°, which indicates that the geometry formed is octahedral surrounded by six ammonia ligands in Cr. Then, the dynamic properties of solvation resulting from RMSD and RMSF data show that it is stable with simulation results of RMSD values ≤ 2Å and RMSF values ≤ 2.5 Å. The results obtained from research on Cr³⁺ ions in ammonia show agreement.

Kata Kunci : ion Cr³⁺, ammonia, solvation, QM/MM molecular dynamics simulations

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Kromium adalah logam berwarna putih dan keras. Logam ini biasanya ditemukan dalam bijih kromit, yang merupakan mineral oksida. Berniyanti dkk. (2020), menyebutkan bahwa kromium dalam tubuh berfungsi sebagai unsur mikro esensial dalam metabolisme. Selain itu, logam kromium dalam industri digunakan sebagai pelapisan besi beserta penyamakan kulit (Paz dkk., 2023). Kelebihan yang dimiliki kromium tersebut karena sifat tidak mudah teroksidasi pada logam kromium oleh udara sebagai lapisan pelindung (Edy dkk., 2019). Namun, dalam kondisi tertentu, kromium dapat teroksidasi dan membentuk ion-ion. Kelimpahan ion kromium yang teroksidasi di lingkungan paling umum salah satunya adalah ion kromium(III). Ion kromium mempunyai sifat yang cenderung toksik dibandingkan ketika belum teroksidasi ke lingkungan. Ion kromium yang teroksidasi biasanya berupa debu beracun selama proses pembuatan material dalam industri (Fontaine dkk., 2019). Ion kromium yang terpapar dalam tubuh membentuk kompleks dengan pelarut biologis yang dapat berpotensi menyebabkan efek toksik. Menurut NIOSH (*National Institute for Occupational Safety and Health*) (2022), efek buruk dari paparan ion kromium bervariasi, seperti kontak kulit, inhalasi, dan

konsumsi. Selain tingkat paparan, efek toksik dari ion kromium sangat tergantung pada jalur paparan (Ferdous dkk., 2020). Kerusakan DNA ditemukan sebagai mekanisme toksik potensial umum ion kromium untuk semua rute paparan.

Berdasarkan data tersebut paparan ion kromium ke lingkungan meningkat yang menyebabkan berbagai gangguan kesehatan, maka dari itu karena sifat toksisitasnya diperlukan studi mengenai mekanisme interaksi ion logam dalam tubuh. Studi mengenai toksisitas ion logam dalam tubuh banyak dipelajari, salah satunya oleh Wang dkk. (2017) yang menjelaskan bahwa interaksi mekanisme yang terjadi memberikan wawasan terkait efek ion kromium pada tingkat seluler dalam tubuh secara *in vitro* maupun *in vivo*. Efek toksisitas dari ion logam kromium sangat berbahaya bagi tubuh, seperti yang diteliti oleh DesMarias dkk. (2019) yang mempelajari mengenai kerusakan DNA oksidatif akibat interaksi yang terjadi dari ion kromium. Penelitian secara eksperimen juga dilakukan oleh Vieri dkk. (2014) menjelaskan bahwa secara EXAFS untuk mempelajari struktur atomik lokal di sekitar atom tertentu dalam material. EXAFS melibatkan proses di mana sinar X-ray diterapkan pada atom dan menyebabkan ejsi elektron, biasanya elektron inti. Ini meninggalkan kekosongan di kulit inti, dan menghasilkan relaksasi elektron terluar untuk mengisi kekosongan. Fenomena ini hanya diamati ketika energi sinar-X melebihi

energi ionisasi elektron di kulit tersebut (Terry dkk., 2021). Metode EXAFS memiliki keterbatasan dalam melihat struktur solvasi dan dinamika interaksi yang terjadi antara ion logam dengan pelarut secara solvasi (Cramer, 2020). Namun, berdasarkan studi mengenai ion kromium secara eksperimen masih belum bisa memberikan penjelasan mengenai mekanisme interaksi ion pada tingkat solvasi.

Interaksi mekanisme dapat dipelajari melalui pengembangan metode kimia komputasi. Menurut Hidayat dkk. (2018), metode ini mempelajari mengenai permodelan studi interaksi ion logam dalam pelarut biologis, seperti air dan amonia. Metode komputasi dapat memodelkan interaksi solvasi yang dilakukan pada ion logam dengan pelarut secara akurat. Validasi hasil komputasi dengan data eksperimen meningkatkan keakuratan model dan memberikan pemahaman yang lebih komprehensif. Kelebihan ini mampu menutupi kekurangan data eksperimen yang belum dapat memodelkan interaksi secara baik. Pelarut amonia yang berinteraksi dengan ion logam akan membentuk kompleks. Kestabilan dari kompleks yang terbentuk menunjukkan kurang reaktivitasnya suatu ion logam (Muthaiah dkk., 2019). Namun, juga terdapat beberapa masalah mengenai perkembangan metode ini, seperti kemampuan dalam pemodelannya, waktu yang dibutuhkan, dan keterbatasan perangkat yang dimiliki.

Penelitian terkait interaksi ion kromium(III) dengan air

dilakukan oleh Yavyev dkk. (2006) dengan menggunakan metode AIMD (*Ab Initio Molecular Dynamics*). Penelitian ini menggambarkan dinamika solvasi ion kromium (III) dalam air dengan akurat. Kekurangan yang dihadapi dalam penelitian ini adalah keterbatasan ukuran sistem dan durasi simulasi. Saat ini, ukuran sistem yang dapat disimulasikan dengan AIMD terbatas hanya beberapa ratus atom, sementara durasi simulasi biasanya tidak melebihi beberapa pikosekon. Hal ini disebabkan oleh biaya komputasi yang tinggi dari metode AIMD. Namun, secara keseluruhan dinamika solvasi ion kromium (III) dalam air sudah tergambarkan dengan baik dan cukup menjadi dasar untuk simulasi yang akan dilakukan lebih lanjut.

Kekurangan pada metode AIMD dapat diatasi dengan adanya metode simulasi dinamika molekular QM/MM (*Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*). Metode QM/MM telah digunakan secara luas untuk studi sistem yang sangat besar di mana simulasi AIMD terlalu mahal. Studi mengenai QM/MM dibandingkan dengan AIMD dilaporkan bahwa memiliki efisiensi yang lebih baik berdasarkan data komputasi dengan data eksperimental. Metode dinamika molekular QM/MM secara menyeluruh lebih unggul dibandingkan dengan metode AIMD.

Pendekatan QM/MM menjadi metode yang tepat untuk memasukkan interaksi ion logam dengan pelarut yang

diperlukan dalam simulasi. Pendekatan QM/MM dengan pelarut air sudah dilakukan oleh Kriyatakornupong dkk. (2004) bahwa penelitian tersebut sudah secara baik menjelaskan solvasi antara ion kromium dengan pelarut air. Solvasi yang dilakukan sudah menunjukkan struktur dan dinamika pada interaksi tersebut. Namun, penelitian mengenai simulasi pada ion kromium dengan pelarut amonia menggunakan metode QM/MM masih sedikit dilakukan.

Penelitian mengenai simulasi QM/MM dalam pelarut amonia telah berhasil dilakukan untuk menentukan struktur dan dinamika ion Ag^+ (Armunanto dkk., 2004), ion Cu^{2+} (Schwenk dkk., 2004), ion Hf^{4+} (Suwardi dkk., 2018), dan sebagainya. Kompleks logam dengan amonia dapat meningkatkan kelarutan ion logam, yang memungkinkan untuk tetap dalam larutan dan menjadi lebih mudah diangkut dalam sistem lingkungan atau biologis. Ammonia berfungsi sebagai ligan yang menyumbangkan pasangan elektron bebas pada nitrogen (N) untuk membentuk ikatan koordinasi dengan ion logam (Liu dkk., 2023). Kompleks logam-amonia yang cenderung stabil, mempengaruhi berkurangnya reaktivitas ketoksikkan dari interaksi yang terbentuk (Zahn, 2017). Berdasarkan penelitian yang dilakukan bahwa pemilihan penggunaan pelarut amonia karena tingkat kelarutan memungkinkan terbentuknya kompleks yang stabil dan berpengaruh terhadap tingkat toksik dari ion logam Cr.

Berdasarkan hasil pembahasan pada penelitian sebelumnya dengan pelarut selain air, maka perlu dilakukan kajian struktur dan dinamika solvasi ion kromium(III) dalam amonia menggunakan simulasi dinamika molekular QM/MM. Pemilihan metode karena keakuratan dan ketelitian yang tinggi, sedangkan ion logam kromium(III) merupakan ion logam yang masih jarang diteliti dan dikaji. Hasil yang diperoleh pada penelitian ini diharapkan dapat menggambarkan kondisi simulasi ion kromium(III) dengan amonia dengan mendekati kondisi nyata.

B. Batasan Masalah

Supaya penelitian ini tidak melebar, maka diambil batasan masalah berikut ini:

1. Metode penentuan struktur dan dinamika ion Cr^{3+} dalam amonia menggunakan simulasi dinamika molekular *Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics* (QM/MM).
2. Basis data yang digunakan adalah OpenKIM
3. Simulasi dilakukan di virtual box yang didalamnya berfokus pada interaksi antara ion Cr^{3+} dengan amonia (NH_3).

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang tersebut, maka dapat dibuat rumusan masalah berikut ini:

1. Bagaimana struktur amonia dengan ion Cr^{3+} berdasarkan simulasi dinamika molekular *Quantum Mechanics/*

Molecular Mechanics (QM/MM) berdasarkan parameter RDF dan ADF?

2. Bagaimana dinamika amonia dengan ion Cr^{3+} berdasarkan simulasi dinamika molekular *Quantum Mechanics/Molecular Mechanics* (QM/MM) berdasarkan parameter RMSD dan RMSF?

D. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah tersebut, maka tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Menentukan struktur amonia dengan ion Cr^{3+} berdasarkan simulasi dinamika molekular *Quantum Mechanics/Molecular Mechanics* (QM/MM) berdasarkan parameter RDF dan ADF.
2. Menentukan dinamika amonia dengan ion Cr^{3+} berdasarkan simulasi dinamika molekular *Quantum Mechanics/Molecular Mechanics* (QM/MM) berdasarkan parameter RMSD dan RMSF.

E. Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat membantu para peneliti yang mengkaji struktur dan dinamika solvasi ion logam dalam amonia, khususnya logam kromium. Kajian interaksi antara ion Cr^{3+} dengan amonia yang dilakukan dalam penelitian ini dapat menghasilkan berbagai informasi baru yang berguna dalam perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi, serta sebagai landasan untuk pengembangan studi

solvasi ion logam kromium dengan amonia atau senyawa lain yang mengandung unsur N.



BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan pembahasan dan hasil penelitian, dapat diambil kesimpulan sebagai berikut:

1. Simulasi yang dilakukan dengan mengoperasikan software LAMMPS untuk mendapatkan hasil dari nilai RDF dan ADF menunjukkan bahwa simulasi memperoleh geometri yang stabil. Hal ini, ditandai dengan hasil simulasi 2 badan struktur molekul Cr-N dengan tidak adanya tumpang tindih antara struktur memiliki jarak yang dihasilkan 2,2 Å dan 3 badan struktur N-Cr-N dengan sudut yang dihasilkan menggambarkan bentuk oktahedral sebesar 91° dan $178,5^\circ$ dan membentuk kompleks $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$.
2. Dinamika solvasi pada ion Cr^{3+} dalam amonia diperoleh dari perhitungan RMSD dan RMSF dengan menggunakan software GROMACS. Pada penelitian ini nilai RMSD yang dihasilkan tidak melebihi dari $\leq 2,0$ Å yang berarti bahwa struktur ion selama simulasi cenderung stabil dan tidak terlalu banyak perubahan. Adapun nilai RMSF yang dihasilkan memiliki nilai $\leq 2,5$ Å yang berarti bahwa dari interaksi yang dihasilkan tidak banyak menunjukkan fluktuasi pada atom dalam molekul stabil.

B. Saran

1. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut terkait solvasi ion Cr^{3+} dengan pelarut lain untuk mengetahui struktur dan dinamika apabila menggunakan pelarut yang berbeda.
2. Disarankan untuk mengetahui mengenai pemrograman dasar terkait software yang dipakai.



DAFTAR PUSTAKA

- Armunanto, R., Schwenk, C. F., Randolph, B. R., & Rode, B. M. (2004). Ag(I) ion in liquid ammonia. *Chemical Physics Letters*, 388(4–6), 395–399. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.03.035>
- Banetta, L., & Zaccone, A. (2019). Radial distribution function of Lennard-Jones fluids in shear flows from intermediate asymptotics. *Physical Review E*, 99(5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.052606>
- Berniyanti, T. (2020). Biomarker Toksisitas: Paparan Logam Tingkat Molekular. Surabaya: Airlangga University Press.
- Bhattacharya, P.K. & Samnani, P.B. (2020). Metal Ions in Biochemistry (2nd ed). USA: CRC Press.
- Darari, M., Francés-Monerris, A., Marekha, B., Doudouh, A., Wenger, E., Monari, A., Haacke, S., & Gros, P. C. (2020). Towards Iron(II) Complexes with Octahedral Geometry: Synthesis, Structure and Photophysical Properties. *Molecules*, 25(24). <https://doi.org/10.3390/MOLECULES25245991>
- Dyah Wulandari, D., Izzatunnisa, S., Divanda Herzhaputra, D., Wuryaningrum, D. A., Kesehatan, A., & Kesehatan, F. (2021). Literatur Review : AKUMULASI DAN TOKSISITAS LOGAM BERAT: KADMIUM (Cd), KROMIUM (Cr) DAN NIKEL (Ni) Literature Review: ACCUMULATION AND TOXICITY HEAVY METAL: CADMIUM (Cd), CHROMIUM (Cr) AND NICKEL (Ni). *Jurnal Kesehatan Lingkungan*, 11(2), 93–98. <https://doi.org/10.47718/jkl.v10i2.1172>
- Fatriansyah, J. F., Rizqillah, R. K., Yandi, M. Y., Fadilah, & Sahlan, M. (2022). Molecular docking and dynamics studies on propolis sulabiroidin-A as a potential inhibitor of SARS-CoV-2. *Journal of King Saud University - Science*, 34(1). <https://doi.org/10.1016/j.jksus.2021.101707>
- Feig, M. (2009). Modeling Solvent Environment: Application to Simulations of Biomolecules. USA: Wiley.

- 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>
- Gustafsson, J. P., Persson, I., Oromieh, A. G., Van Schaik, J. W. J., Sjöstedt, C., & Kleja, D. B. (2014). Chromium(III) complexation to natural organic matter: Mechanisms and modeling. *Environmental Science and Technology*, 48(3), 1753–1761. <https://doi.org/10.1021/es404557e>
- Hinchliffe, A. (2011). *Molecular Modelling for Beginners*. UK: John Wiley & Sons Ltd.
- Hirata, F. (2006). *Molecular Theory of Solvation*. USA: Kluwer Academic Publisher.
- Jono, R., Tejima, S., & Fujita, J. ichi. (2021). Microstructure of the fluid particles around the rigid body at the shear-thickening state toward understanding of the fluid mechanics. *Scientific Reports*, 11(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-021-03714-w>
- Kabbalee, P., Sripa, P., Tongraar, A., & Kerdcharoen, T. (2015). Solvation structure and dynamics of K⁺ in aqueous ammonia solution: Insights from an ONIOM-XS MD simulation. *Chemical Physics Letters*, 633(1), 152–157. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.05.037>
- Kritayakornpong, C., Plankensteiner, K., & Rode, B. M. (2004). Structure and dynamics of the Cr(III) ion in aqueous solution: Ab initio QM/MM molecular dynamics simulation. *Journal of Computational Chemistry*, 25(13), 1576–1583. <https://doi.org/10.1002/jcc.20085>
- Kulakova, L., Arampatzis, G., Angelikopoulos, P., Hadjidoukas, P., Papadimitriou, C., & Koumoutsakos, P. (2017). Data driven inference for the repulsive exponent of the Lennard-Jones potential in molecular dynamics simulations. *Scientific Reports*, 7(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-017-16314-4>
- Okoh, M. P., Singla, R. K., Madu, C., Soremekun, O., Adejoh, J., Alli, L. A., & Shen, B. (2021). Phytomedicine in Disease Management: In-Silico Analysis of the Binding Affinity of

- Artesunate and Azadirachtin for Malaria Treatment. *Frontiers in Pharmacology*, 12. <https://doi.org/10.3389/fphar.2021.751032>
- Paramita, S., Permata, M., Vaulina, E., & Iswanto, P. (2020). Indonesian Journal of Chemical Research Pemilihan Metode Perhitungan Kimia Komputasi Semi-empiris untuk Pengembangan 1,3,4-Thiadiazole Selection of Semi-empirical Calculation Method in Computational Chemistry for The Development of 1,3,4-Thiadiazole. *J. Chem. Res*, 8(1), 51–56. <https://doi.org/10.30598/ijcr.2020.8-pon>
- Pratiwi, D. Y. (2020). DAMPAK PENCEMARAN LOGAM BERAT (TIMBAL, TEMBAGA, MERKURI, KADMIUM, KROM) TERHADAP ORGANISME PERAIRAN DAN KESEHATAN MANUSIA. In *Jurnal Akuatek* (Vol. 1, Issue 1).
- Raymond, O., Bühl, M., Lane, J. R., Henderson, W., Brothers, P. J., & Plieger, P. G. (2020). Ab Initio Molecular Dynamics Investigation of Beryllium Complexes. *Inorganic Chemistry*, 59(4), 2413–2425. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b03309>
- Rodríguez, I., Valladares, R., Valladares, A., Hinojosa-Romero, D., Santiago, U., & Valladares, A. (2021). Correlation: An Analysis Tool for Liquids and for Amorphous Solids. *Journal of Open Source Software*, 6(65), 2976. <https://doi.org/10.21105/joss.02976>
- Ruswanto, R., Nofianti, T., Mardianingrum, R., Kesuma, D., & Siswandono. (2022). Design, molecular docking, and molecular dynamics of thiourea-iron (III) metal complexes as NUDT5 inhibitors for breast cancer treatment. *Heliyon*, 8(9). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2022.e10694>
- Salame, I. I., & Dong, S. (2021). Examining Some of Students' Views on the Nature of Science (NOS) in Traditional Lecture Format Teaching Environment. *International Journal of Chemistry Education Research*, 69–77. <https://doi.org/10.20885/ijcer.vol5.iss2.art4>

- Saputri, W. D., Hidayat, Y., Wijaya, K., Pranowo, H. D., & Hofer, T. S. (2019). Investigation of the preferential solvation and dynamical properties of Cu^+ in 18.6% aqueous ammonia solution using ab initio quantum mechanical charge field (QMCF) molecular dynamics and NBO analysis. *Journal of Molecular Liquids*, 275, 859–866. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.11.022>
- Saputri, W. D., Pranowo, H. D., Schuler, M. J., & Hofer, T. S. (2020). Cu^{2+} in liquid ammonia—The impact of solvent flexibility and electron correlation in ab initio quantum mechanical charge field molecular dynamics. *Journal of Computational Chemistry*, 41(25), 2168–2176. <https://doi.org/10.1002/jcc.26379>
- Saputri, W. D., Sulaiman, S. S., Sari, F. R., Sudiono, S., Pranowo, H. D., Saleh, M., & Hofer, T. S. (2020). Co^{3+} and Ir^{3+} in pure liquid ammonia: Structure and dynamics from ab initio quantum mechanical charge field molecular dynamics. *Journal of Molecular Liquids*, 306. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.112205>
- Saputri, W. D., Wijaya, K., & Armunanto, R. (2017). Investigation of the structural and dynamical properties of Cu^+ in liquid ammonia: A quantum mechanical charge field (QMCF) molecular dynamics study. *Indonesian Journal of Chemistry*, 17(3), 531–537. <https://doi.org/10.22146/ijc.26809>
- Sargsyan, K., Grauffel, C., & Lim, C. (2017). How Molecular Size Impacts RMSD Applications in Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 13(4), 1518–1524. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00028>
- Schwartz, F.W. & Zhang, H. (2003). *Fundamentals of Ground Water*. UK: John Wiley & Sons Ltd.
- Schwenk, C. F., & Rode, B. M. (2004). Cu^{II} in liquid ammonia: An approach by hybrid quantum-mechanical/molecular-mechanical molecular dynamics simulation. *ChemPhysChem*, 5(3), 342–348. <https://doi.org/10.1002/cphc.200300972>

- Shang, X. Y., An, H. Y., Zhang, T., Lin, J. H., Hao, F., Yu, D. H., Xiao, J. C., & Li, T. D. (2021). Evaluating and understanding the affinity of metal ions to water and ammonia using density functional theory calculation. *Chemical Physics Letters*, 768. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.138398>
- Valente, R. P. da P., Souza, R. C. de, de Medeiros Muniz, G., Ferreira, J. E. V., de Miranda, R. M., e Lima, A. H. L., & Vianez Junior, J. L. da S. G. (2020). Using Accelerated Molecular Dynamics Simulation to elucidate the effects of the T198F mutation on the molecular flexibility of the West Nile virus envelope protein. *Scientific Reports*, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-020-66344-8>
- Varadwaj, P. R., & Marques, H. M. (2010). The physical chemistry of coordinated aqua-, ammine-, and mixed-ligand Co^{2+} complexes: DFT studies on the structure, energetics, and topological properties of the electron density. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(9), 2126–2138. <https://doi.org/10.1039/b919953e>
- Varadwaj, P. R., Cukrowski, I., & Marques, H. M. (2008). DFT-UX3LYP studies on the coordination chemistry of Ni^{2+} . Part 1: Six coordinate $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_n(\text{H}_2\text{O})_{6-n}]^{2+}$ complexes. *Journal of Physical Chemistry A*, 112(42), 10657–10666. <https://doi.org/10.1021/jp803961s>
- Wang, X., Ramírez-Hinestrosa, S., Dobnikar, J., & Frenkel, D. (2020). The Lennard-Jones potential: When (not) to use it. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(19), 10624–10633. <https://doi.org/10.1039/c9cp05445f>
- Yazyev, O. V., & Helm, L. (2006). Hyperfine interactions in aqueous solution of Cr^{3+} : An ab initio molecular dynamics study. *Theoretical Chemistry Accounts*, 115(2–3), 190–195. <https://doi.org/10.1007/s00214-005-0052-6>
- Zhao, Y., Zeng, C., & Massiah, M. A. (2015). Molecular dynamics simulation reveals insights into the mechanism of unfolding by the A130T/V mutations within the MID1 zinc-binding Bbox1 domain. *PLoS ONE*, 10(4). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0124377>