

# Saintika

Jurnal Sains, Teknologi, dan Agama

FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI MALANG



ISSN 1693-640x

Edisi Khusus Dies Natalis I UIN Malang, Juni 2005

**Many Body Effects on  $Zn^{2+}$ -H<sub>2</sub>O Complex**

*Himmatul Barroroh*

**Analisis Karakteristik Pebelajar**

**Kaitannya dengan Tahap-tahap Perkembangan Penalaran Moral**

*Ahmad Abtokfi*

**Edge-Magic Total Labeling**

**pada Graph  $mP_2$  (m Bilangan Asli Ganjil)**

*Abdussakjr*

**Status Terumbu Karang di Negara-negara Asia Tenggara**

*Sukarsono*

**Dendrogram Plasma Nutfah Padi (*Oryza sativa* L.)**

**Berdasarkan Sifat Ketahanan terhadap Blas (*Pyricularia oryzae*)**

**Menggunakan Primer RGA**

*Suyono*

# MANY BODY EFFECTS ON $Zn^{2+}$ - $H_2O$ COMPLEX

Himmatul Barroroh

## ABSTRACT

Many body effects of  $Zn^{2+}$ - $H_2O$  system has been investigated in order to know the features and effects of non-additivity contribution to pairwise additivity assumption in constructing intermolecular potential energy function for  $Zn^{2+}$ - $H_2O$  system.

The effects was investigated by calculate ion-ligan interaction energies at optimized  $Zn(H_2O)_n^{2+}$  complexes. Optimization was carried out under *ab initio* method on RHF level using LANL2 DZ ECP basis sets for Zn, and SBKJC DZP ECP basis sets for O and H atoms. The features has been calculated including average binding energy per ligand molecule ( $\Delta E_{avbin}$ ), average pairwise interaction energies, ( $\Delta E_{avpi}$ ), to evaluate error due to apply pairwise additivity assumption on calculation of interaction energies, % non-additivity, ( $\% \Delta E_{avbin}$  and  $\% \Delta E_{avpi}$ ), and ligand-ligand repulsion energies, ( $\Delta E_{rp}$ ).

The result showed that as the  $Zn^{2+}$ -O distance increased, where the number of ligand, n, increased, there was a tendency of ligand stabilization energy per molecule to decrease of 38%, ( $\% \Delta E_{avbin}$ ). Ligand-ligand repulsion energy ( $\Delta E_{rp}$ ) for each of  $Zn^{2+}$ -( $H_2O$ ) pairs counted about 3.1-4.2 kcal mol<sup>-1</sup>. Error on average pairwise interaction energy, ( $\% \Delta E_{avpi}$ ), due to neglect of many body effects on  $Zn(H_2O)_6^{2+}$  complex reached 22% or as high as -20.1 kcal mol<sup>-1</sup>.

**Key words:** *many body effects, metal-ligand complex, complex stabilization energy*

## ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian tentang pengaruh efek many-body untuk sistem  $Zn^{2+}$ - $H_2O$ . Dengan mengetahui efek many-body, dapat ditetapkan perlu tidaknya digunakannya kontribusi *non-additivity* selain asumsi *pairwise additivity* dalam penyusunan fungsi energi potensial intermolekuler dalam sistem  $Zn^{2+}$ - $H_2O$ .

Efek many-body pada interaksi antara ion-ligand diselidiki melalui perhitungan *ab initio* optimasi kompleks ion-ligand  $Zn(H_2O)_n^{2+}$ , dimana n=1-6, pada tingkat RHF dengan menggunakan basis set LANL2 DZ ECP untuk  $Zn^{2+}$  dan SBKJC DZP ECP untuk atom O dan H. Kemudian dihitung energi ikat rerata per molekul ligand, ( $\Delta E_{avbin}$ ). Untuk mengevaluasi adanya kemungkinan kesalahan berkenaan dengan digunakannya asumsi *pairwise additivity* pada perhitungan energi interaksi yang mengabaikan efek many-body, maka dihitung energi interaksi pasangan rerata, ( $\Delta E_{avpi}$ ) antara M dan L dalam kompleks MLn, persentase *non-additivity*, ( $\% \Delta E_{avbin}$  dan  $\% \Delta E_{avpi}$ ) serta energi tolakan antar ligand, ( $\Delta E_{rp}$ ).

Hasil penelitian menunjukkan bahwa seiring meningkatnya jarak  $Zn^{2+}$ -O dimana n semakin besar, maka didapati kecenderungan penurunan energi stabilisasi ligand per molekul ( $\Delta E_{avbin}$ ) dengan persentase ( $\% \Delta E_{avbin}$ ) sebesar 38%. Energi tolak ligand-ligand ( $\Delta E_{rp}$ ) untuk setiap interaksi pasangan berkisar antara 3,1-4,2 kkal mol<sup>-1</sup>. Persentase kesalahan energi interaksi pasangan rerata ( $\% \Delta E_{avpi}$ ) pada  $[Zn(H_2O)_6]^{2+}$  mencapai 22% atau sama dengan -20,1 kkal mol<sup>-1</sup>.

**Kata kunci:** *efek many body, kompleks logam-ligand, energi stabilisasi kompleks*



## PENDAHULUAN

Gas-gas seperti udara atau argon mencair pada temperatur yang cukup rendah, hal ini adalah manifestasi gaya tarik antar molekul. Pada temperatur rendah gerak molekuler menjadi lebih lambat sehingga menyebabkan pengaruh gaya tarik intermolekuler menjadi signifikan, molekul tarik menarik satu sama lain untuk membentuk fasa cair. Di sisi lain terdapat fakta bahwa atom-atom gas mulia terpisah pada keseimbangan pada jarak antar partikel tertentu, apabila jarak antar partikel ini berusaha direduksi, maka suatu gaya tolakan kuat akan terjadi di antara molekul-molekul tersebut. Atas dasar itulah maka diperkenalkan suatu energi potensial yang disebut sebagai potensial intermolekuler yang merupakan fungsi jarak antar partikel. Jika atom-atom saling mendekati dari jarak yang jauh, energi potensial menurun dari nol menuju nilai negatif sampai pada jarak keseimbangan, hal ini mengindikasikan gaya tarik antar molekul. Jika atom-atom tersebut terus didekatkan melampaui diameter atomiknya, maka energi potensial tersebut akan meningkat tajam mencapai nilai positif, hal ini terkait dengan gaya tolakan antar molekul (Kihara, 1978).

Sifat umum kompresibilitas dan kerapatan yang relatif tinggi dari cairan, merupakan manifestasi keberadaan gaya intermolekuler baik tolakan maupun tarikan. Gaya-gaya yang dikenal berperan pada zat alir dalam bentuk gas dapat juga dianggap memiliki peran yang sama untuk sistem cairan, selain gaya tolakan yang lebih besar pada jarak yang pendek dan gaya interaksi badan-banyak. Dewasa ini telah banyak dilakukan penelitian tentang keadaan cair, terutama yang menyangkut interaksi intermolekuler. Telah diketahui bahwa potensial pasangan sistem keadaan gas dapat digunakan sebagai dasar utama unsur penyusun potensial sistem keadaan cair, dimana potensial pasangan cairan dapat didefinisikan melalui potensial pasangan gas yang bersesuaian dengan suatu faktor koreksi tertentu (Marcus 1977).

Energi intermolekuler – disebut juga energi potensial-didefinisikan sebagai beda antara energi molekul total dan jumlah dari energi-energi molekul terpisah. Pada pemisahan tak hingga, energi intermolekuler adalah nol. Ketika dua molekul mendekat satu sama lain, mula-mula energi intermolekulernya menjadi negatif; dia mencapai keadaan keseimbangannya dimana dia memiliki energi terendah, dan jika molekul-molekul dibawa menjadi lebih dekat satu sama lain dari keadaan ini, energinya akan meningkat dan terkadang dapat menjadi positif. Untuk sepasang molekul, potensial intermolekuler merupakan fungsi dari orientasi relatifnya dan jarak di antara kedua pusat molekul.

Terdapat dua cara untuk menentukan fungsi potensial intermolekuler: melalui metode ab initio dan semiempirik. Penentuan dari data eksperimental untuk dibuat *fitting* fungsinya biasanya dianggap sulit karena dua alasan. Pertama, biasanya tidak terdapat satu kurva potensial unik yang menghasilkan pengamatan experimental tertentu, meskipun dengan semakin banyak data yang dimiliki, akan dapat diperoleh range yang lebih sempit dari potensial yang dapat diterima. Kedua, biasanya tidak terdapat rute analitik sederhana untuk berangkat dari pengamatan eksperimental kepada diperolehnya suatu potensial, dan biasanya harus digunakan metode *trial-error* untuk memperoleh hubungannya. Karena itu metode perhitungan ab initio menjadi lebih menarik.

Dari berbagai kontributor energi intermolekuler, terdapat dua klasifikasi yang terpenting yaitu kontribusi dari energi interaksi jarak-dekat dan energi interaksi jarak-jauh. Energi interaksi jarak-dekat berasal dari tumpang tindih fungsi gelombang atau orbital-orbital atom atau molekul yang berinteraksi. Energi interaksi jarak-dekat bervariasi pada jarak sepanjang  $R$  sebagai  $\exp(-kR)$ ,  $k$  adalah konstanta, seperti potensial Born-Mayer. Energi interaksi jarak-jauh dapat dibagi menjadi tiga jenis, yaitu energi elektrostatik, energi induksi dan energi dispersi. Energi interaksi jarak-jauh bervariasi pada jarak sepanjang  $R$  sebagai invers pangkat dari  $R$  ( $R^{-n}$ ), termasuk energi Coulombik diantara dua muatan ( $n=1$ ). Karena itu, suatu potensial inter-molekuler,  $V^{int}$  dapat dipisahkan menjadi 4 bentuk:

$$V^{int} = V^{short} + V^{elec} + V^{ind} + V^{disp} \quad (1)$$

Dimana keempat suku adalah kontribusi dari energi-energi interaksi jarak-dekat, elektrostatik, induksi dan dispersi. Suku jarak-pendek sudah memasukkan seluruh efek-efek "kimiawi", termasuk interaksi tolak menolak dan menurun secara eksponensial terhadap jarak intermolekuler. Suku elektrostatik memasukkan interaksi diantara momen-momen multipole permanen dari monomer. Suku induksi menggambarkan pengaruh polarisasi awan muatan dari setiap monomer oleh medan polarisasi statik akibat hadirnya monomer lain, dan suku dispersi menggambarkan interaksi akibat korelasi dari fluktuasi sesaat multipole-multipole dari dua monomer.

Pendekatan yang digunakan secara umum dalam simulasi komputer untuk membangun potensial intermolekuler adalah suatu metode perhitungan energi potensial secara eksak untuk sistem yang

berisi  $N$  partikel ke dalam suatu suku yang melibatkan molekul pasangan, triplets, ... ,  $N$ -tuplets.

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

indeks  $i,j,k, \dots$  mengacu pada jumlah molekul dalam sistem. Suku pertama dalam persamaan  $V_2$  merupakan potensial badan dua, memberikan energi interaksi pasangan molekul. Suku ini diketahui mempunyai kontribusi terbesar pada penentuan yang eksak dari energi potensial  $V$ . Suku  $V_3$ , yang melibatkan molekul rangkap tiga, menghitung energi fraksi yang disebabkan khususnya oleh polarisasi dan tolakan sterik, dan disebut dengan efek badan tiga. Kontribusi suku  $V_3$  ini di dalam cairan berharga positif (tolakan) yaitu sekitar 10 – 15% dari total energi. Suku badan empat dan seterusnya diharapkan mempunyai kontribusi yang kecil bila dibandingkan dengan kontribusi dari badan dua dan badan tiga. Suku badan tiga, empat dan seterusnya biasa disatukan dalam istilah suku badan banyak (*many-body*). Asumsi bahwa energi interaksi sama dengan  $\sum V_2(i,j)$  dikenal sebagai pendekatan aditivitas potensial pasangan (*pairwise additive*) dan suku yang tersisa dari deret persamaan sering disebut dengan koreksi non aditif.

Bagian penting dari efek many-body berhubungan dengan polarisabilitas molekul ligan oleh ion. Muatan positif pada ion menginduksi momen dipol yang lebih besar pada molekul ligan, sehingga kemudian meningkatkan energi tolakan di antara ligan. Dalam penelitian ini akan dipelajari pengaruh suku badan banyak (efek many-body) dalam sistem  $Zn^{2+}$ - $H_2O$ .

## DASAR TEORI

Untuk menyelidiki efek many-body pada interaksi antara ion dan ligan, digunakan perhitungan energi optimasi kompleks ion-ligan  $M(\text{Ligan})_n^{2+}$ , dimana  $n=1-6$ ,

Energi stabilisasi kompleks,  $\Delta E_{\text{stb}}$ , dihitung sebagai:

$$\Delta E_{\text{stb}} = E_{\text{MLn}} - E_{\text{M}} - E_{\text{Ln}} \quad (3)$$

dimana  $E_{\text{MLn}}$ ,  $E_{\text{M}}$  dan  $E_{\text{Ln}}$  masing-masing merupakan energi total kompleks  $M(\text{Ligan})_n^{2+}$ , ion logam  $M^{2+}$  dan molekul  $n$  Ligan, masing-masing berada dalam konfigurasi yang sama sebagaimana konfigurasi di dalam kompleks  $M(\text{Ligan})_n^{2+}$ . Energi ikat rerata per molekul Ligan,  $\Delta E_{\text{avbin}}$ , dihitung sebagai:

$$\Delta E_{avbin} = \Delta E_{stb}/n \quad (4)$$

Untuk mengevaluasi adanya kemungkinan kesalahan berkenaan dengan digunakannya asumsi sifat additivitas energi interaksi pasangan (*pairwise additivity*) pada perhitungan energi interaksi yang mengabaikan efek many-body, maka dihitung energi interaksi pasangan rerata  $\Delta E_{avpi}$  antara M dan L dalam kompleks ML<sub>n</sub> sebagai:

$$\Delta E_{avpi} = \sum_{i=1}^n [E_{MLi} - E_M - E_{Li}]/n \quad (5)$$

dimana ML<sub>i</sub> menunjuk pada setiap pasangan ML dalam kompleks ML<sub>n</sub>. Persentase non-additivity,  $\% \Delta E_{avbin}$  dan  $\% \Delta E_{avpi}$  didefinisikan sebagai:

$$\% \Delta E_{avbin} = 100 (1 - \Delta E_{avbin}^{n=1} / \Delta E_{avbin}^{n \neq 1}) \quad (6)$$

dan

$$\% \Delta E_{avpi} = 100 (1 - \Delta E_{avbin} / \Delta E_{avpi}) \quad (7)$$

Energi tolakan antar ligan,  $\Delta E_{tpl}$  dihitung sebagai:

$$\Delta E_{tpl} = E_{Ln} - nE_L \quad (8)$$

## CARA KERJA

Perhitungan efek many-body pada interaksi antara ion-ligan diselidiki melalui perhitungan energi optimasi kompleks ion-ligan Zn(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub><sup>2+</sup>, dimana n=1-6, secara ab initio pada tingkat RHF dengan menggunakan basis set LANL2 DZ ECP yang dikembangkan oleh Hay dan Wadt untuk Zn<sup>2+</sup>, SBKJC DZP ECP untuk O dan H (Marini, 1996). Kemudian dihitung beberapa parameter berikut: Energi stabilisasi kompleks,  $\Delta E_{stb}$ , Energi ikat rerata per molekul Ligan,  $\Delta E_{avbin}$ . Untuk mengevaluasi adanya kemungkinan kesalahan berkenaan dengan digunakannya asumsi sifat additivitas energi interaksi pasangan (*pairwise additivity*) pada perhitungan energi interaksi yang mengabaikan efek many-body, maka dihitung energi interaksi pasangan rerata  $\Delta E_{avpi}$  antara M dan L dalam kompleks ML<sub>n</sub>. Persentase non-additivity,  $\% \Delta E_{avbin}$  dan  $\% \Delta E_{avpi}$ . Energi tolakan antar ligan,  $\Delta E_{tpl}$ .

## HASIL DAN PEMBAHASAN

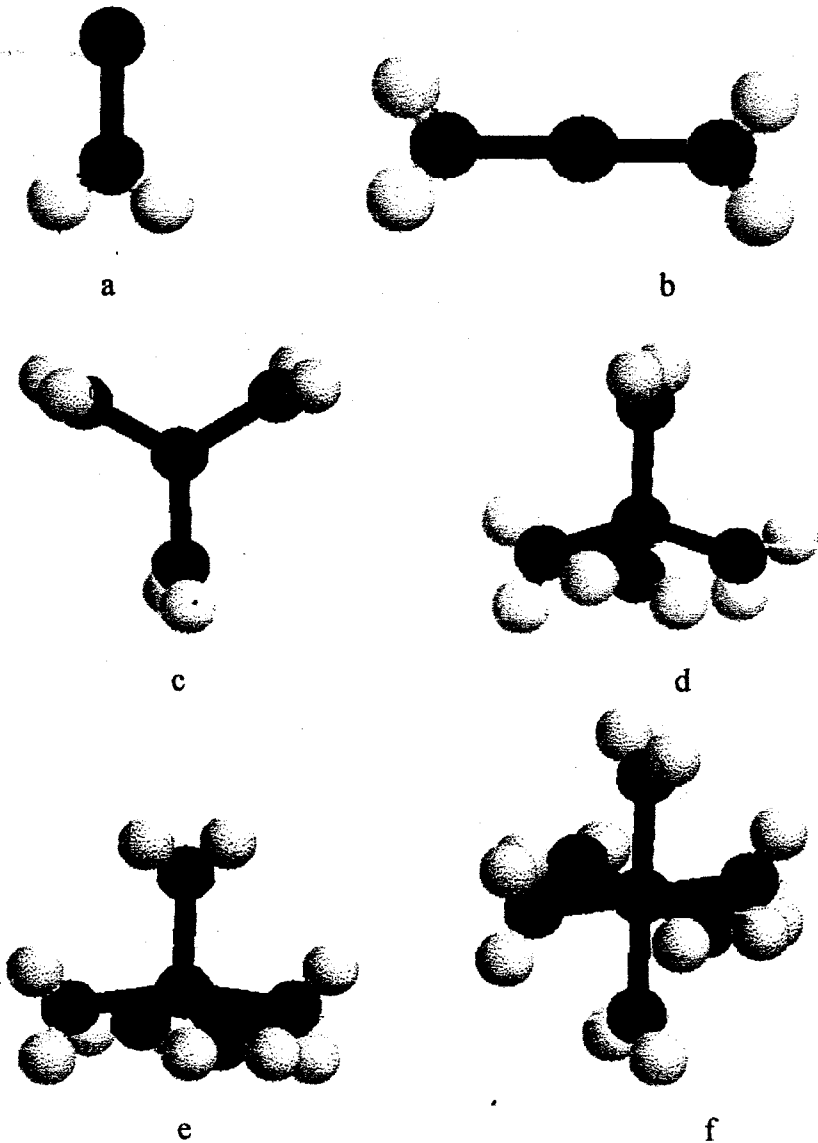
Hasil dari optimasi geometri dan data untuk mengestimasi efek many-body diberikan pada Tabel 1. dan Gambar 1. dibawah ini:

**Tabel 1. Data jarak interaksi Zn-O, energi stabilisasi, energi ikat rerata, energi interaksi pasangan rerata, % non-aditivity dan energi tolakan dalam interaksi logam-ligan Zn<sup>2+</sup> dalam air**

n	r <sub>Zn-O</sub> (Å)	ΔE <sub>stb</sub> (kkal mol <sup>-1</sup> )	ΔE <sub>avbin</sub> (kkal mol <sup>-1</sup> )	ΔE <sub>avpi</sub> (kkal mol <sup>-1</sup> )	%ΔE <sub>avbin</sub>	%ΔE <sub>avpi</sub>	ΔE <sub>rpl</sub> (kkal mol <sup>-1</sup> )
1	1.9	-98.25	-98.25	-98.25	0	0	0
2	1.91	-189.34	-94.67	-98.09	4	3	3.1
3	1.97	-262.61	-87.53	-97.11	12	10	12.5
4	2.01	-328.38	-82.09	-95.94	20	14	22.9
5	2.09	-378.21	-75.64	-93.07	30	19	40.9
6	2.13	-427.95	-71.32	-91.4	38	22	56.4

Tabel 1. menunjukkan bahwa dengan meningkatnya jarak Zn<sup>2+</sup>-O, energi ikat rerata per molekul (ΔE<sub>avbin</sub>) menurun sebagaimana diharapkan untuk n yang semakin besar. Pemanjangan jarak Zn<sup>2+</sup>-O berasal dari adanya tolakan ligan-ligan (ΔE<sub>rpl</sub>). Energi tolak ligan-ligan untuk setiap interaksi pasangan [jumlah total interaksi pasangan = n(n-1)/2] berkisar antara 3.1-4.2 kkal mol<sup>-1</sup> dengan rerata 3.8 kkal mol<sup>-1</sup> tidak menunjukkan perubahan yang nyata dengan semakin bertambahnya jumlah ligan di sekitar ion pusat.

Peningkatan jarak Zn<sup>2+</sup>-O dari n=1 sampai 6 mencapai 0,23 Å, nilai ini dapat dikatakan tidak terlalu besar dibandingkan peningkatan jarak Zn<sup>2+</sup>-N sebesar 0,33 Å (Hannongbua, 1992), tampaknya hal ini berkenaan dengan kebutuhan ligan NH<sub>3</sub> untuk menempati ruang disekitar atom pusat yang lebih besar (*bulky*) dibanding H<sub>2</sub>O. Sementara penurunan energi interaksi per molekul solven (%ΔE<sub>avbin</sub>) pada Zn<sup>2+</sup>-O cukup besar mencapai 38% sedangkan pada Zn<sup>2+</sup>-N hanya sebesar 28%. Kehilangan stabilitas kompleks yang cukup besar pada sistem Zn<sup>2+</sup>-O ini dibanding pada sistem Zn<sup>2+</sup>-N tampaknya terkait dengan sifat oksigen yang bertindak sebagai basa Lewis yang lebih keras (*hard*) daripada sifat basa Lewis N.



**Gambar 1. Struktur konfigurasi hasil optimasi kompleks  $Zn(H_2O)_n^{2+}$ ,  $n=1-6$ .**

Dipandang dari sudut teori Orbital Molekul, orbital molekul  $H_2O$  hasil kombinasi linear orbital-orbital atomnya terdiri atas tingkat energi  $1a_1$ ,  $1b_1$ ,  $2a_1$  dan  $1b_2$  (non bonding / HOMO) yang secara eksperimental melalui spektroskopi fotoelektron masing-masing ditandai dengan energi sebesar 32,2 eV, 17,02 eV, 13,78 eV dan 12,62 eV, berturut-turut. Sementara orbital molekul  $NH_3$  terdiri atas tingkat-tingkat energi  $1a_1$ , 2



buah 1e dan 1 buah 2a<sub>1</sub> (non bonding / HOMO) yang secara eksperimental ditentukan dengan energi masing-masing sebesar 27,0 eV, 15,0 eV dan 10,2 eV. Elektron donor pada basa Lewis berasal dari elektron pada orbital frontier HOMO, sementara situs asam Lewis pada atom pusat Zn<sup>2+</sup> merupakan suatu orbital frontier LUMO-nya. Dengan tingkat energi HOMO pada H<sub>2</sub>O yang lebih negatif daripada NH<sub>3</sub>, maka secara otomatis jarak antara HOMO dan LUMO pada interaksi asam-basa Lewis semakin jauh pada H<sub>2</sub>O, hal ini menyebabkan sifat keras (*hardness*) basa Lewis H<sub>2</sub>O lebih besar daripada NH<sub>3</sub>.

Sifat keras (*hardness*) mengindikasikan keresponsifan suatu atom atau molekul atas kehadiran medan listrik disekitarnya, terutama yang berasal dari atom atau ion-ion tetangga. Konsep ini terkait dengan polarisabilitas, yaitu kemudahan suatu atom atau ion untuk dapat terdistorsi akibat kehadiran suatu medan listrik di sekitarnya. Semakin besar sifat keras (*hardness*) suatu atom atau molekul semakin sukar orbital atom atau molekul tersebut mengalami distorsi. Kemampuan terdistorsi orbital molekul NH<sub>3</sub> lebih besar daripada H<sub>2</sub>O sehingga menyediakan probabilitas keberadaan elektron sampai pada jarak yang cukup jauh dan menyediakan stabilitas kompleks yang lebih besar pada jarak yang jauh.

Berikut data referensi efek many-body dari beberapa penelitian sebelumnya:

**Tabel 2. Efek many-body dalam kompleks oktahedral M(Ligan)<sub>6</sub><sup>n+</sup>, dilaporkan dalam persentase potensial pasangan, energi dalam kkal mol<sup>-1</sup> dan jarak dalam Å.**

M(Ligan)	r <sub>ML</sub> (Å)	ΔE <sub>avbin</sub> (kkal mol <sup>-1</sup> )	ΔE <sub>avpi</sub> (kkal mol <sup>-1</sup> )	%ΔE <sub>avpi</sub>	Referensi
Cu <sup>+</sup> (NH <sub>3</sub> )	2,28	-27,1	-10,2	27	Pranowo, H.D.
Li <sup>+</sup> (NH <sub>3</sub> )	2,02	-20,5	-6,1	23	Hannongbua et. al.
Zn <sup>2+</sup> (NH <sub>3</sub> )	2,28	-68,0	-15,3	18	Hannongbua et. al.
Cu <sup>2+</sup> (NH <sub>3</sub> )	2,29	-63,7	-27,5	30	Pranowo, H.D.
Zn <sup>2+</sup> (H <sub>2</sub> O)	2,13	-71,32	-20,1	22	Penelitian ini

Tabel 2. menunjukkan bahwa asumsi aditivitas pasangan dari energi interaksi kompleks Cu<sup>+</sup> memberikan maksimum kesalahan (%ΔE<sub>avpi</sub>) sebesar 27,2% (-10,2 kkal mol<sup>-1</sup>) untuk kompleks [Cu(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]<sup>+</sup>. Angka ini cukup tinggi jika dibandingkan dengan kompleks kation bermuatan satu amoniak, misalnya Li<sup>+</sup> (23%, atau -6,1 kkal mol<sup>-1</sup>). Hasil penelitian dari Hannongbua pada ion Li<sup>+</sup> dalam amoniak, dimana efek many-body dalam kompleks oktahedral sebesar 23% (-6,1 kkal mol<sup>-1</sup>)

menunjukkan bahwa efek badan-tiga tidak mengubah jumlah ligan amoniak dalam kulit solvasi pertama, yaitu 6, ternyata demikian pula untuk ion  $\text{Cu}^+$  dalam amoniak.

Dalam kasus yang lain, solvasi  $\text{Zn}^{2+}$  dan  $\text{Cu}^{2+}$  dalam amoniak, dimana efek many-body dalam kompleks oktahedral memberikan kontribusi masing-masing sebesar 18% ( $-15,3 \text{ kkal mol}^{-1}$ ) dan 30% ( $-27,5 \text{ kkal mol}^{-1}$ ), bilangan koordinasi berkurang dari 9 dan 8 menjadi 6, jika fungsi koreksi badan-tiga diikutsertakan. Fenomena ini harus dijelaskan dengan mempertimbangkan nilai kesalahan energi nyata dalam penggunaan asumsi additivitas pasangan daripada persentasenya ( $\% \Delta E_{\text{avpi}}$ ). Hal ini juga berarti bahwa efek polarisasi antara  $\text{Zn}^{2+}$  dan ligan ternyata lebih kuat dari pada dalam kasus  $\text{Cu}^+$  maupun  $\text{Li}^+$ , dan mengindikasikan bahwa kontribusi many-body tampaknya harus diperhitungkan dalam sistem kompleks dengan kation divalen. Sementara persentase kesalahan energi interaksi pasangan rerata ( $\% \Delta E_{\text{avpi}}$ ) pada  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  mencapai 22% atau sama dengan  $-20,1 \text{ kkal mol}^{-1}$ , hal ini menyebabkan efek many-body pada sistem  $\text{Zn}^{2+}\text{-H}_2\text{O}$  tidak mungkin diabaikan.

## KESIMPULAN

Seiring meningkatnya jarak  $\text{Zn}^{2+}\text{-O}$  dimana  $n$  semakin besar, maka didapati kecenderungan penurunan energi stabilisasi ligan per molekul ( $\Delta E_{\text{avbin}}$ ). Penurunan energi interaksi per molekul solven ( $\% \Delta E_{\text{avbin}}$ ) pada  $\text{Zn}^{2+}\text{-O}$  cukup besar mencapai 38%. Kehilangan stabilitas kompleks yang cukup besar pada sistem  $\text{Zn}^{2+}\text{-O}$  dibanding pada sistem  $\text{Zn}^{2+}\text{-N}$  tampaknya terkait dengan sifat oksigen yang bertindak sebagai basa Lewis yang lebih keras (*hard*) daripada sifat basa Lewis N.

Pemanjangan jarak  $\text{Zn}^{2+}\text{-O}$  berasal dari adanya tolakan ligan-ligan ( $\Delta E_{\text{rlp}}$ ). Energi tolak ligan-ligan untuk setiap interaksi pasangan [jumlah total interaksi pasangan =  $n(n-1)/2$ ] berkisar antara  $3,1\text{-}4,2 \text{ kkal mol}^{-1}$  dengan rerata  $3,8 \text{ kkal mol}^{-1}$  tidak menunjukkan perubahan yang nyata dengan semakin bertambahnya jumlah ligan di sekitar ion pusat.

Persentase kesalahan energi interaksi pasangan rerata ( $\% \Delta E_{\text{avpi}}$ ) pada  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  mencapai 22% atau sama dengan  $-20,1 \text{ kkal mol}^{-1}$ , hal ini menyebabkan efek many-body pada sistem  $\text{Zn}^{2+}\text{-H}_2\text{O}$  tidak mungkin diabaikan.

**DAFTAR PUSTAKA**

- Anonim, 2001, *Extensible Computational Chemistry Environment Basis Set Database*, EMSL Gaussian Basis Set Order Form, The Molecular Science Computing Facility, Environmental and Molecular Sciences Laboratory, The Pacific Northwest Laboratory, Washington, <http://www.emsl.pnl.gov:2080/forms/basisform.html>, 2/8/2001
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, Gill, P. M. W., Johnson, B. G., Robb, M. A., Cheesman, J. R., Keith, T. A., Petersson, G. A., Montgomery, J. A., Raghavachari, K., Al-Laham, M. A., Zakrzewski, V. G., Ortiz, J. V., Foresman, J. B., Cioslowski, J., Stefanov, B. B., Nayakkara, a., Challacombe, M., Peng, C. y., Ayala, P. L., Chen, W., Wong, M. W., Andres, J. L., Reploge, E. S., Gomperts, R., Martin, R. L., Fox, D. L., Binkley, J. S., defrees, D. J., Baker, J., Stewart, J. J. P., Head-Gordon, M., Gonzales, C., dan Pople, J. a., 1995, *GAUSSIAN 98*, Gaussian Inc., Pittsburgh
- Hannongbua, S., 1998, On the Solvation of Lithium Ion in Liquid Ammonia: Monte Carlo Simulation with a Three Body Potential, *Chem. Phys. Lett.*, 188, 663
- Hannongbua, S., Kerdcharoen, T., dan Rode, B. M., 1992, Zinc(II) in Liquid Ammonia: Intermolecular Potential Including 3-Body Terms and Monte Carlo Simulation, *J. Chem. Phys.*, 96, 6945
- Kettle, S.F.A., 1986, *Symetry and Structure*, John Wiley & Sons, Chichester
- Kihara, T., 1978, *Intermolecular Forces*, John Wiley and Sons, Chichester
- Marcus, Y., 1977, *Introduction to Liquid State Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester
- Marini, G., Texler, N. R., dan Rode, B. M., 1996, Monte Carlo Simulation of Zn(II) in Water Including Three Body Effect, *J. Phys. Chem.*, 100, 6808-6813

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 Frances-University of Innsbruck, Austria

Pranowo, H. D., dan Rode, B. M., 1999, Solvation of Cu<sup>2+</sup> in Liquid Ammonia: Monte Carlo Simulation Including Three Body Correction, *J. Phys. Chem. A.*, 103, 4298-4302

Shriver, D.F., Atkins, P.W., Langford, C.H., 1990, *Inorganic Chemistry*, Oxford University Press, Oxford