

Atom, Ion, Molekul dan Interaksinya: Analisis dan Perhitungan Mekanika Kuantum *ab Initio*

Parsaoran Siahaan^{*)}

^{*)}Chemistry Study Program, Diponegoro University,
Jl. Prof. Soedarto, S.H., Tembalang 50275 Semarang,
Indonesia.

^{*)}Corresponding autor,

e-mail: siahaan_parsaoran@yahoo.com

Abstrak

Penggambaran sifat-sifat energi ionisasi atom yang teratur dengan sistem periodik, teori kuantum dan persamaan Schrodinger masih dapat ditingkatkan untuk memahami lebih dalam sifat atom dan molekul. Pengembangan tersebut bahkan mampu mengungkap sifat-sifat unsur berukuran nano, atau menjelaskan sifat-sifat senyawa setelah berinteraksi non-kovalen. Pengembangan tersebut adalah penggunaan metode komputasi untuk menyelesaikan persamaan kuantum *ab initio* yang dapat memprediksi sifat-sifat setiap keadaan hipotetik atom, molekul dan kluster hasil interaksinya.

Kata kunci: kuantum *ab initio*, energi ionisasi, interaksi antarmolekul.

Abstract

The widely explanation of the regularly atomic ionization energy properties by element periodic system, quantum theory and Schrodinger equation is still opened to be developed and explained for understanding the whole inherently properties of the elements and molecules. Developing of the theory even also enable us to explain the nanoparticle elements properties, or to explain the non-covalent interactions properties of compounds. This developing will have been doing by computation method of quantum theory *ab initio* which is able to predict every hypotetic atomic, molecule, and its cluster.

Keywords: quantum *ab initio*, ionization energy, intermolecular interaction.

Introduction

Fungsi makromolekul biologi seperti protein dan DNA tergantung pada struktur, dinamika, dan interaksinya (van Holde, dkk., 2006, Zeng, dkk., 2009, Wu, dkk., 2010, Kim, dkk., 2011, Huang, dkk., 2011). Ketiga fenomena tersebut memerlukan pemahaman yang mendalam tentang ikatan non-kovalen (Dethlefs dan Hobza, 2000, Hobza, dkk., 2006), yang sangat berperan pada supramolekul (Lehn, 1997). Interaksi non-kovalen adalah prinsip dasar pada partikel nano (Mansoori, 2005, Ratner dan Ratner, 2003, Kelsall, dkk., 2005). Untuk mempelajari interaksi non-kovalen dapat dilakukan dengan eksperimen pada fasa gas, mekanika kuantum hingga dinamika molekul dengan ukuran kluster yang makin besar (Dethlefs dan Hobza, 2000, Apra, dkk., 2003, Hobza, dkk., 2006). Kerapatan elektron, konformasi molekul hingga folding protein adalah kajian sangat penting struktur dan dinamika makromolekul biologi dan partikel nano karena dapat mempengaruhi sifat-sifat fisikokimianya. Oleh karena itu, memahami molekul kompleks seperti protein perlu diawali dengan memahami sistem sederhana.

Pemahaman interaksi non-kovalen diawali dengan pemahaman tentang atom tetapi bukan lagi teori atom Dalton, Joule Thomson, Rutherford, dan bahkan teori atom Bohr. Teori Bohr diperoleh berdasarkan penemuan spektrum atom hidrogen dan teori kuantum Planck, dan berhasil merumuskan persamaan (1) bahwa elektron pada atom adalah terkuantisasi dan mempunyai energi tertentu (Atkins dan Paula, 2006),

$$E_n = - \frac{13,6Z^2}{n^2} eV \quad (1)$$

dengan $n=1,2,3,\dots$ dan $\Delta n = \pm 1$. Bila $n=0$ maka energi adalah nol dan ini tidak diperbolehkan. Teori Bohr secara kualitatif berhasil mendukung penyusunan sistem periodik berdasarkan konfigurasi elektron, memperbaiki sistem nomor atom dan nomor massa. Berdasarkan konfigurasi elektron, unsur-unsur secara kualitatif dikelompokkan secara teratur menjadi logam, semi logam dan non logam. Logam pada golongan 1 dan

2 dapat bereaksi dengan non logam pada golongan 6 dan 7, sedangkan golongan 8 adalah gas mulia dan merupakan unsur stabil. Sifat-sifat kualitatif molekul dapat diprediksi dari sifat-sifat atom unsurnya, sedangkan sifat-sifat kualitatif interaksi antar molekul dapat diprediksi dari sifat-sifat molekulnya. Sifat-sifat di atas hanya terbatas pada kondisi stabil. Bila diukur pada kondisi tidak stabil memerlukan metode eksperimen *ultravast* (Mohammed, 2009) karena keadaan tidak stabil hanya berlangsung dalam daerah mikro-nano detik. Selain itu, teori Bohr hanya cocok untuk atom-atom seperti hidrogen yang berelektron tunggal.

Energi dan sifat-sifat lain atom-atom berelektron banyak, molekul, kluster serta agregat seperti partikel nano tidak dapat diperoleh dengan persamaan (1), tetapi melalui persamaan Schrodinger (Levine, 2000, Leach, 2001), yaitu:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (2)$$

Indeks n adalah menggambarkan bahwa energi, E , dan fungsi gelombang, ψ , adalah terkuantisasi. Hamiltonian \hat{H} pada persamaan (2) untuk atom menggambarkan pasangan inti-elektron k dan i , dan pasangan elektron-elektron i dan j , ditulis dengan

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_k \frac{1}{m_k} \nabla_k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_k \sum_i \frac{Z_k e^2}{r_{ik}} + \sum_j \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (3)$$

Pada molekul, atom dan molekul berinteraksi atau kluster, Hamiltonian \hat{H} persamaan (3) yang menggambarkan pasangan inti-inti k dan l , pasangan inti-elektron k dan i , dan pasangan elektron-elektron i dan j , menjadi

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_k \frac{1}{m_k} \nabla_k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{k>l} \sum_{i>j} \frac{Z_k Z_l e^2}{R_{kl}} - \sum_k \sum_i \frac{Z_k e^2}{r_{ik}} + \sum_j \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (4)$$

Pada atom tidak ada variabel jarak antarinti atau R_{kl} . Bila q_k dan q_i adalah posisi inti dan elektron, persamaan (2) dapat ditulis

$$\hat{H}\psi(q_i, q_k) = E\psi(q_i, q_k) \quad (5)$$

Menurut pendekatan Born-Oppenheimer, kecepatan gerak inti dapat diabaikan

terhadap elektron, sehingga persamaan (5) untuk gerak elektron dapat ditulis

$$(\hat{H}_{el} + V_{NN})\psi_{el} = U\psi_{el} \quad (6)$$

$$\hat{H}_{el} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_k \sum_i \frac{Z_k e^2}{r_{ik}} + \sum_j \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (7)$$

Energi potensial tolakan elektron, V_{NN} ,

$$V_{NN} = \sum_k \sum_{k>l} \frac{Z_k Z_l e^2}{R_{kl}} \quad (8)$$

Persamaan (6), meskipun telah mengabaikan gerak elektron, masih sangat kompleks untuk atom, molekul, atom dan molekul berinteraksi, atau kluster, yang berelektron banyak sehingga sangat sulit diselesaikan secara analitik. Persamaan (6) adalah persamaan diferensial, sehingga solusinya adalah harga energi E dan fungsi gelombang ψ . Permasalahannya adalah menentukan q_k dan q_i dengan keadaan paling stabil. Pendekatan yang digunakan untuk mengatasi kekompleksan tersebut adalah metode variasi dengan fungsi coba-coba dengan cara iterasi. Metode ini dikenal dengan metode Hartree-Fock atau disingkat dengan HF, yaitu:

$$E_{HF} = \langle D | \hat{H}_{el} + V_{NN} | D \rangle \quad (9)$$

D adalah determinan Slater fungsi gelombang Hartree-Fock sehingga persamaan (9) dapat ditulis

$$E_{HF} = 2 \sum_{i=1}^{n/2} H_{ii}^{core} + \sum_{i=1}^{n/2} \sum_{j=1}^{n/2} (2J_{ij} - K_{ij}) + V_{NN} \quad (10)$$

dengan

$$H_{ii}^{core} \equiv \langle \phi_i(1) | \hat{H}^{core}(1) | \phi_i(1) \rangle$$

$$J_{ij} \equiv \langle \phi_i(1)\phi_j(2) | 1/r_{12} | \phi_i(1)\phi_j(2) \rangle$$

$$K_{ij} \equiv \langle \phi_i(1)\phi_j(2) | 1/r_{12} | \phi_j(1)\phi_i(2) \rangle$$

Penyelesaian persamaan (9) memakai fungsi orbital ϕ_i dilakukan dengan cara iterasi hingga memperoleh harga E_{HF} konvergen. Fungsi ϕ_i , persamaan (11) adalah kombinasi linier fungsi basis set χ_r ,

$$\phi_i = \sum_r c_{ri} \chi_r \quad (11)$$

dengan

$$\chi_r = \sum_u d_{ur} g_u$$

Fungsi tipe-Gaussian g (GTF) yang dapat digunakan adalah fungsi Gaussian primitif

$$g_{ijk} = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{3/4} \left[\frac{(8\alpha)^{i+j+k} i! j! k!}{(2i)! (2j)! (2k)!} \right]^{1/2} x_b^i y_b^j z_b^k e^{-\alpha (x_b^2 + y_b^2 + z_b^2)} \quad (12)$$

Pada persamaan (12), konstanta d_{ur} adalah koefisien kontraksi, variabel i, j, k bilangan bulat positif, konstanta α adalah eksponen orbital, dan variabel x_b, y_b, z_b koordinat kartesian pada titik awal inti b .

Persamaan (10) terlalu kompleks diselesaikan secara analitik, sehingga diperlukan metode komputasi. Software yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan di atas diantaranya adalah *GAMESS* (Schmidt, 1993, Dykstra, dkk., 2005) dan *NWChem* (Apra, dkk., 2003).

Tulisan ini dimaksudkan menambah pemahaman tentang peran komputasi untuk menjelaskan energi ionisasi dan interaksi non-kovalen ion logam L^{n+} dengan molekul netral $M, L^{n+} \dots M$, pada fasa gas.

Methods

Materials and Equipment

Perhitungan dilakukan dengan software *GAMESS*, dan gambar molekul dibuat dengan software *Chemcraft*.

Experiments

1. Menghitung energi atom netral dan ion.

Perhitungan untuk He⁺:

```
$CONTRL SCFTYP=UHF RUNTYP=ENERGY MULT=1
COORD=ZMT NZVAR=0 ICHARG=0 $END
$BASIS GBASIS=N31 NGAUSS=6 NDFUNC=1 NPFUNC=1
$END
$STATPT NSTEP=100 HSEND=.TRUE. $END
$DATA
Helium_ion
C1
He
x 1 1.
$END
```

Perhitungan untuk He⁺:

```
$CONTRL SCFTYP=UHF RUNTYP=ENERGY ICHARG=1
MULT=2 COORD=ZMT NZVAR=0 $END
$BASIS GBASIS=N31 NGAUSS=6 NDFUNC=1
NPFUNC=1 $END
$STATPT NSTEP=100 HSEND=.TRUE. $END
$DATA
helium_ion
C1
He
x 1 1.
$END
```

Perhitungan untuk F⁻:

```
$CONTRL SCFTYP=UHF RUNTYP=ENERGY ICHARG=-1
MULT=1 COORD=ZMT NZVAR=0 $END
$BASIS GBASIS=N31 NGAUSS=6 NDFUNC=1
NPFUNC=1 $END
$STATPT NSTEP=100 HSEND=.TRUE. $END
$DATA
flor_ion
C1
F
x 1 1.
$END
```

2. Menghitung energi CH₄, H₂O, HCl, dan NaCl, sistein (Cys), dan alanin (Ala).

```
SYSTEM MWORDS=10 MEMDDI=100 PARALL=.TRUE.
$END
$CONTRL SCFTYP=UHF COORD=ZMT NZVAR=0
RUNTYP=OPTIMIZE MULT=1 $END
$BASIS GBASIS=N31 NGAUSS=6 NPFUNC=1 NDFUNC=1
$END
$DATA
AIR
C1
H1
O2 H1 1.
H3 O2 2. H1 110.
$END
```

3. Menentukan energi interaksi Na⁺...CH₄, Na⁺...H₂O, Na⁺...HCl, Na⁺...NaCl.

```
SYSTEM MWORDS=40 MEMDDI=200 $END
$CONTRL SCFTYP=UHF RUNTYP=OPTIMIZE
COORD=ZMT ICHARG=1 MULT=1 NZVAR=0 $END
$BASIS GBASIS=N31 NGAUSS=6 NDFUNC=1
NPFUNC=1 $END
$STATPT NSTEP=200 HSEND=.TRUE. $END
$DATA
CH4...Na OPT
C1
C1
H2 C1 1.
H3 C1 1. H2 109.
H4 C1 1. H3 109. H2 -199.99
H5 C1 1. H3 109. H2 120.
Na H5 1.7 C1 93.65 H3 107.139
$END
```

4. Analisis hasil perhitungan.

Results and Discussions

Energi Ionisasi

Energi negatif adalah gambaran kestabilan atom dan ion, kolom 2 tabel 1. Harganya berbeda bila dihitung dengan persamaan (1). Energi ionisasi pertama, E_{I_1} , pada golongan 1, Gambar 1, dari atas ke bawah menurut eksperimen adalah makin kecil, kolom 4 Tabel 1 dan Gambar 2, yaitu 1312,0; 513,3; 495,8; 418,8 kJ/mol; masing-masing untuk H, Li, Na, dan K. Hasil perhitungan, kolom 3 tabel 1, adalah 1308,11; 514,17; 478,23; 386,89 kJ/mol. Kecenderungannya sesuai dengan hasil eksperimen, meskipun harga absolutnya berbeda, dan dapat diperbaiki dengan menggunakan teori dan basis set yang lebih tinggi (Schmidt, 1993).

1	2	3	4	5	6	7	8
H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca					Br	Kr

Gambar 1. Sistem periodik

Harga E_{I_1} hasil eksperimen untuk periode kedua yaitu Li, Be, B, C, N, O, F, Ne adalah makin besar kecuali B dan O yaitu 513,3; 899,4; 800,6; 1086,2; 1402,3; 1313,9; 1681,0; 2372,3 kJ/mol. Hasil perhitungan adalah 514,17; 765,13; 756,09; 1033,88; 1689,04; 1642,06; 1504,13; 2261,98 kJ/mol; dan sesuai dengan hasil eksperimen kecuali untuk F. Golongan 8, He, Ne, Ar, Kr, sebagai unsur paling stabil, berturut-turut mempunyai harga E_{I_1} makin kecil, hasil eksperimen yaitu 2372,3; 2080,6; 1520,4; 1350,7; dan hasil perhitungan adalah 2261,98; 1897,43; 1414,37; 1285,87.

Energi ionisasi kedua hasil perhitungan, E_{I_2} , Tabel 1 dan Gambar 3, juga menunjukkan kecenderungan yang sama pada satu golongan dan satu periode dengan eksperimen meskipun harga absolutnya juga masih berbeda.

Tabel 1. Energi ionisasi (EI) eksperimen dan perhitungan *ab initio* HF/6-31G*

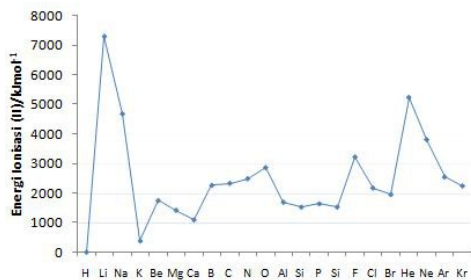
Unsur	E/kJmol ⁻¹	EI(1,2)/kJmol ⁻¹	
		<i>ab initio</i>	Eksp. *)
H	-1308,11	EI ₁ :1308,11	EI ₁ :1312,0
H ⁺	0		
Li	-19511,07	EI ₁ :514,17	EI ₁ :513,3
Li ⁺	-18996,90	EI ₂ :7300,32	EI ₂ :7298,0
Li ²⁺	-11696,58		
Na	-424914,69	478,23	495,8
Na ⁺	-424436,46	4678,25	4562,4
Na ²⁺	-419758,21		
K	-1572989,45	386,89	418,8
K ⁺	-1572602,56	3025,67	3051,4
K ²⁺	-1569576,89		
Be	-38245,51	765,13	899,4
Be ⁺	-37480,38	1747,86	1757,1
Be ²⁺	-35732,53		
B	-64382,61	756,09	800,6
B ⁺	-63626,52	2262,93	2427,0
B ²⁺	-61363,59		
C	-98931,10	1033,88	1086,2
C ⁺	-97897,22	2331,08	2352,0
C ²⁺	-95566,14		
N	-142788,98	1689,04	1402,3
N ⁺	-142485,84	2485,15	2856,1
N ²⁺	-138614,79		
O	-196345,22	1642,06	1313,9
O ⁺	-194703,16	2861,19	3388,2
O ²⁺	-191841,96		
F	-260882,70	1504,13	1681,0
F ⁺	-259378,56	3222,97	3374,0
F ²⁺	-256155,59		
Mg	-524038,28	637,39	737,7
Mg ⁺	-523400,89	1419,71	1450,7
Mg ²⁺	-521981,18		
Ca	-1776699,39	493,99	589,7
Ca ⁺	-1776205,39	1091,87	1145,0
Ca ²⁺	-1775113,52		
Al	-634995,49	536,16	577,4
Al ⁺	-634459,33	1692,25	1816,6
Al ²⁺	-632767,08	2702,56	2744,6
Al ³⁺	-630064,53		
Si	-758329,50	786,5	736,4
Si ⁺	-757593,06	1577,1	1527,1
Si ²⁺	-756065,96		
P	-894482,13	1011,7	1171,9
P ⁺	-893310,22	1903,2	1637,2
P ²⁺	-891673,05		
S	-1043354,61	999,6	663,9
S ⁺	-1042690,68	2251,0	2194,4
S ²⁺	-1040496,27		
Cl	-1206280,63	1136,68	1251,1
Cl ⁺	-1205143,95	2170,09	2297,0
Cl ²⁺	-1202973,86		
Br	-6753016,20	1038,71	1139,9
Br ⁺	-6751977,49	1947,95	2104,0
Br ²⁺	-6750029,54		
He	-7496,22	2261,98	2372,3
He ⁺	-5234,24	5234,24	5250,4
He ²⁺	0		
Ne	-337309,55	1897,43	2080,6

Ne ⁺	-335412,12	3808,07	3952,2
Ne ²⁺	-331604,05		
Ar	-1383044,47	1414,37	1520,4
Ar ⁺	-1381630,10	2545,34	2665,2
Ar ²⁺	-1379084,76		
Kr	-7224561,83	1285,87	1350,7
Kr ⁺	-7223275,96	2243,25	2350,0
Kr ²⁺	-7221032,71		

*) Atkin dan Paula, 2006.



Gambar 2. Kecenderungan EI₁, perhitungan *ab initio* HF/6-31G*



Gambar 3. Kecenderungan EI₂, perhitungan *ab initio* HF/6-31G*

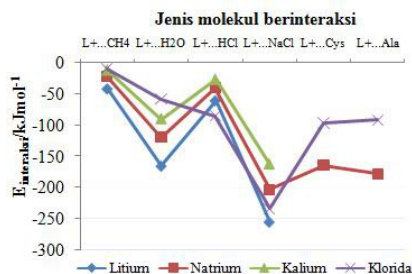
Setelah memahami sifat-sifat ion logam sebagai partikel yang keberadaannya dalam larutan, interaksi non-kovalen dengan pelarut atau dengan zat terlarut lain adalah fenomena penting memahami fungsi makromolekul biologi seperti protein, karena kestabilan struktur dan dinamika protein tergantung pada lingkungan kimianya (Aberle, dkk., 1996, Zheng, dkk., 2003, Cailliez dan Lavery, 2006, Lechband dan Prakasam, 2006). Kestabilan Kadherin penyusun *tight junction* dan *adhesive junction* dalam sel sangat tergantung pada interaksi non-kovalen dengan ion Ca²⁺ (Cailliez dan Lavery, 2005). Ion dalam larutan berinteraksi dengan pelarut atau disebut tersolvasi. Ion dapat juga berinteraksi menghasilkan interaksi ionik. Semua ion, kolom 3 Tabel 2, dapat

berinteraksi dengan CH₄, H₂O, HCl, dan NaCl. Grafik energi adalah gambaran kecenderungan kemampuan berinteraksi, Gambar 4 dan Gambar 5. Ion Li⁺ pada golongan 1 dan Be²⁺ pada golongan 2 mempunyai energi interaksi paling besar. Hal ini sesuai dengan kekuatan ion yang makin besar dengan ukuran ion makin kecil. Kekuatan interaksi ion Na⁺ dengan CH₄, HCl, H₂O, dan NaCl, masing-masing adalah -22,15; -40,11; -119,43; dan -203,39 kJ/mol. Energi interaksi L⁺...H₂O dapat dibandingkan dengan entalpi hidrasi ion Li⁺, Na⁺, K⁺, dan Ca²⁺ {X[±](g)→X[±](aq)} masing-masing sebesar -520, -405, -321, dan -1650 kJ/mol pada 298K. Energi interaksi Li⁺ lebih kecil dibandingkan dengan ion Ca²⁺ yang bermuatan lebih besar. Interaksi antara Ca²⁺ dengan H₂O terjadi melalui atom oksigen, sedangkan dengan CH₄ simetrik diantara dua atom H, Gambar 6. Energi interaksi antara Ca²⁺ dengan Cys dan Ala, Gambar 7, sangat besar yaitu -518,12 dan -532,08 kJ/mol, Gambar 5, dan dapat menjelaskan kestabilan kadherin pada sel (Cailliez dan Lavery, 2005). Energi tersebut sesuai dengan energi ikatan kovalen HCl dan energi kisi NaCl {Na⁺(g)+Cl⁻(g)→NaCl(s)} masing-masing sebesar 431 kJ/mol dan 787 kJ/mol (Atkins dan Paula, 2006). Harga absolut energi interaksi dapat dikoreksi dengan metode BSSE (*basis set superposition error*) (Hobza, dkk., 2006).

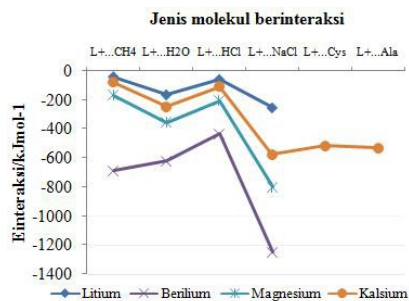
Tabel 2. Energi interaksi Lⁿ⁺...M, perhitungan *ab initio* HF/6-31G*

Unsur	E/10 ³ kJmol ⁻¹	E _{int} /kJmol ⁻¹
CH ₄	-105,55	
H ₂ O	-199,60	
HCl	-1207,90	
NaCl	-1631,48	
Li ⁺ ...CH ₄	-124,59	-41,092799
Li ⁺ ...H ₂ O	-218,76	-165,700930
Li ⁺ ...HCl	-1226,96	-60,139971
Li ⁺ ...NaCl	-1650,74	-255,930890
Na ⁺ ...CH ₄	-530,01	-22,153917
Na ⁺ ...H ₂ O	-624,16	-119,434910
Na ⁺ ...HCl	-1632,38	-40,109379
Na ⁺ ...NaCl	-2056,12	-203,385650

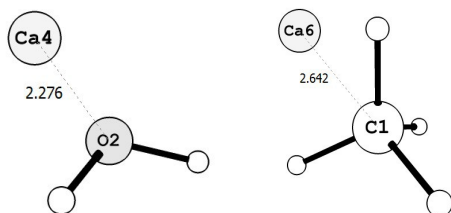
K ⁺ ...CH ₄	-1678,16	-11,221859
K ⁺ ...H ₂ O	-1772,29	-89,558839
K ⁺ ...HCl	-2780,53	-26,402122
K ⁺ ...NaCl	-3204,25	-162,448140
Be ²⁺ ...CH ₄	-141,97	-688,507250
Be ²⁺ ...H ₂ O	-235,95	-619,147250
Be ²⁺ ...HCl	-1244,07	-435,443330
Be ²⁺ ...NaCl	-1668,47	-1250,248900
Mg ²⁺ ...CH ₄	-627,70	-168,307040
Mg ²⁺ ...H ₂ O	-721,93	-352,934340
Mg ²⁺ ...HCl	-1730,09	-202,468250
Mg ²⁺ ...NaCl	-2154,27	-801,206150
Ca ²⁺ ...CH ₄	-1880,74	-79,109790
Ca ²⁺ ...H ₂ O	-1974,96	-247,339880
Ca ²⁺ ...HCl	-2983,12	-107,385170
Ca ²⁺ ...NaCl	-3407,17	-574,812080
Cl ⁻ ...CH ₄	-1312,04	-9,875967
Cl ⁻ ...H ₂ O	-1406,14	-58,594830
Cl ⁻ ...HCl	-2414,47	-85,125516
Cl ⁻ ...NaCl	-2838,20	-234,234840



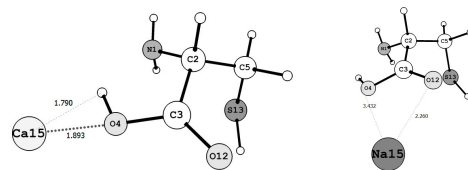
Gambar 4. Kecenderungan energi interaksi Lⁿ⁺...M, perhitungan *ab initio* HF/6-31G*



Gambar 5. Kecenderungan energi interaksi Lⁿ⁺...M, perhitungan *ab initio* HF/6-31G*

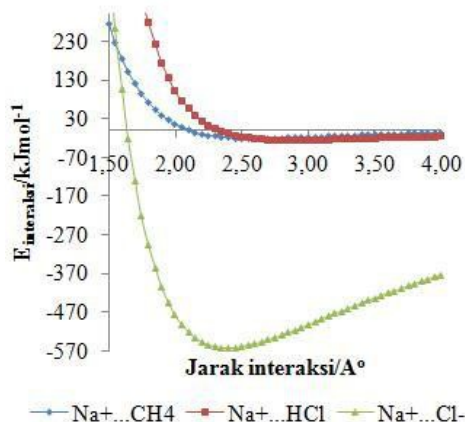


Gambar 6. Konfigurasi interaksi Ca²⁺...H₂O dan Ca²⁺...CH₄



Gambar 7. Konfigurasi interaksi Ca²⁺...Cys dan Ca²⁺...Ala

Grafik energi interaksi non-kovalen, Gambar 8, memenuhi salah satu persamaan Mie atau Lennard Jones, tetapi belum ditentukan apakah memenuhi potensial Mie atau Lennard-Jones (Siahaan dkk., 2007).



Gambar 8. Kecenderungan energi interaksi Lⁿ⁺...HCl, perhitungan *ab initio* HF/6-31G*

Tolak-menolak pada interaksi Na⁺...HCl terjadi pada jarak yang lebih jauh dibandingkan dengan Na⁺...CH₄, Gambar 8, Perbedaan ini disebabkan sifat CH₄ yang non-polar. Sebaliknya, sifat polar HCl menghasilkan energi interaksi lebih besar pada jarak interaksi lebih kecil dibandingkan dengan molekul CH₄. Namun demikian, energi interaksi tersebut jauh lebih kecil dibandingkan dengan interaksi Na⁺...Cl⁻. Pengaruh kepolaran pada energi interaksi telah dibuktikan dengan eksperimen NMR oleh Siahaan dkk., 2007.

Conclusions

Metode komputasi telah meningkatkan wawasan akan peran energi ionisasi dan energi interaksi non-kovalen pada sistem sederhana menuju sistem kompleks.

Future work

Aplikasi pada molekul besar seperti peptida, protein penyusun sel, vitamin, dan kitosan.

Acknowledgement

This work was supported by Indonesian Research and Technology Ministry, and cooperation with Muhammad A. M. (Department of Chemistry, ITB).

References

1. Van Holde, K.E., Johnson, W.C., dan Shing Ho, P., **2006**, *Principles of Physical Biochemistry*, 2nd ed., Pearson Education, Inc., New Jersey.
2. Zheng, K., Laurence, J. S., Kuczera, K., Verkhivker, G., Middaugh, C. R., dan Siahaan, T.J., **2009**, Characterization of Multiple Stable Conformers of the EC5 Domain of E-cadherin and the Interaction of EC5 with E-cadherin Peptides, *Chem. Biol. Drug*, 73, 584–598.
3. Wu, Y., Jin, X., Harrison, O., Shapiro, L., Honig, B.H., and Ben-Shaul, A., **2010**, Cooperatively, between Trnas and Cis Interactions in Cadherin-Mediated Junction Formation, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 107, 17592-17597.
4. Kim, S.A., Tai, C.Y., Mok, L.P., Mosser, E.A., and Schuman, E.M., **2011**, Calcium-dependent Dynamics of Cadherin Interactions at Cell-Cell Junctions, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 108,9857-9862.
5. Huang, H., Yuan, Q., Shah, J.S., Misra, R.D.K., **2011**, A new family of folate-decorated and carbon nanotube-mediated drug delivery system: Synthesis and drug delivery response, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 63, 1332–1339.
6. Dethlefs, K.M. dan Hobza, P., **2000**, Noncovalent Interactions: A Challenge for Experiment and Theory, *Chem. Rev.*, 100, 143-167.
7. Hobza, P., Zahradnik, R., dan Dethlefs, K.M., **2006**, The World of Non-Covalen Interactions, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 71, 443-531.
8. Lehn, J.M., **1995**, *Supramolecular Chemistry*, VCH, Weinheim.
9. Mansoori, G.A., **2005**, *Principles of Nanotechnology: Molecular Based Study of Condensed Matter in Small Systems*, World Scientific, Ltd., Singapore.
10. Ratner, M. dan Ratner, D., **2005**, *Nanotechnology*, Pearson Education, Inc., New Jersey.
11. Kelsall, R.W. Hamley, I.W., Geoghegan, M., (editors), **2005**, *Nanoscale Science and Technology*, John Wiley & Sons, Ltd., England.
12. Apra, E., Bylasca, E.J., Dean, D.J., Fortunelli, A., Gao, F., Krstie, P.S., Wells, J.C., Windus, T.L., **2003**, NWChem for Materials Science, *Computational Materials Science*, 28, 209-221.
13. Atkins, P., Paula J.D., **2006**, *Physical Chemistry*, 8th ed., Oxford University Press, New York.
14. Mohammed, O.F., Jas, G.S., Lin, M.M., Zewail, A.H., **2009**, Primary Peptide Folding Dynamics Observed with Ultravast Temperature Jump, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 46, 5628-5632.
15. Levine, I.N., **2000**, *Quantum Chemistry*, 5th ed., Prentice Hall, Inc., New Jersey.
16. Leach, A.R., **2001**, *Molecular Modelling*, 2nd ed., Pearson Edu. Ltd., England.
17. Schmidt, M. W., Baldrige, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, H. J., Koseki, S., Matsunaga, N., Nguyen, K. A., Su S. J., Windus, T.L., Dupuis, M., Montgomery, J. A., **1993**, General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS), *J. Comput. Chem.* 14, 1347-1363.
18. Dykstra, C.E., Frenking, G., Kim, K.S., Scuseria, G.E., (editors), **2005**, *Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later*, Gordon, M. S., Schmidt, M. W., Chapter 41, 1167-1189, Theory and Applications of Computational Chemistry, the first forty years, Elsevier, Amsterdam.
19. Aberle, H., Schwartz, H., Kemler, R., **1996**, Cadherin-Catenin Complex: Protein Interactions and Their Implications for Cadherin Function, *J. Cell. Biol.*, 61, 514-523.
20. Zheng, K., Makagiansar, I.T., Wang, M., Urbauer, J.L., Kuczera, K., Siahaan, T.J., **2004**, Expression, Purification, and Structural Study of the EC4 domain of E-Cadherin, *Protein, Expr. Purif.*, 33, 72-79.
21. Cailliez, F., Lavery, R., **2006**, Dynamics and Stability of E-Cadherin Dimer, *Biophys. J.*, 91, 3964-3971.
22. Cailliez, F., Lavery, R., **2005**, Cadherin Mechanics and Complexation: The Importance of Calcium Binding, *Biophys. J.*, 89, 3895-3903.
23. Lechband, D., Prakasam, A., **2006**, Mechanism and Dynamics of Cadherin Adhesion, *Annu. Rev. Biomed. Eng.* 8, 259-287.
24. Siahaan, P., Radiman, C.L., Rahayu, S.I., Martoprawiro, M.A., dan Ziessow, D., **2007**, Investigation of Molecular Interaction Between Phenylacetylene and Hexamethylphosphoric Triamide by ¹³C NMR Relaxation Time Studies and *ab initio* QM calculations, *Indo. J. Chem.*, 7, 273-277.