



Prosiding

BIDANG
KIMIA

SEMINAR & RAPAT TAHUNAN

BKS-PTN B Tahun 2012

BIDANG ILMU MIPA

Badan Kerjasama Perguruan Tinggi Negeri
Wilayah Barat

Tema :

*Peran MIPA dalam Pengembangan
SDM dan SDA*

Hotel Madani Medan
11 - 12 Mei 2012



Penyelenggara
FMIPA
UNIVERSITAS
NEGERI MEDAN



Jl. Willem Iskandar, Psr V Medan 20221

Telp. (061) 6625970 Medan

www.semirataunimed.com Email: semiratabks2012@yahoo.co.id

BKS PTN-B MIPA

2012

mti

ISBN:978-602-9115-24-6

PROSIDING

**SEMINAR NASIONAL DALAM RANGKA SEMIRATA
BKS-PTN WILAYAH BARAT BIDANG MIPA
TAHUN 2012**

Thema: Peran MIPA Dalam Peningkatan Kualitas SDM dan SDA

KIMIA

Editor :

Prof.Dr.Ramlan Silaban,MS

Prof.Drs.Manihar Situmorang,MSc.,PhD

Dr.Marham Sitorus,MSi

Drs.Rahmat Nauli,MSi

Dra.Ani Sutiani,MSi



Penerbit

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Negeri Medan

PENENTUAN PERUBAHAN ENTALPI PADA PROSES PEMBENTUKAN SENYAWA KOMPLEKS ANTARA LOGAM Ag^+ DENGAN LIGAN NH_3 , Pyr, dien, dan en MENGGUNAKAN PROGRAM NWCHEM 6.2

Asep Wahyu Nugraha*, Muhamad A. Martoprawiro**, Ratu Evina Dibyantini*

*Jurusan Kimia FMIPA UNIMED Medan

**Jurusan Kimia FMIPA ITB Bandung

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk melakukan kajian teoritis pada penentuan perubahan entalpi dalam proses pembentukan senyawa kompleks dari logam Perak dengan ligan-ligan NH_3 , en, pyr, dan dien serta penentuan senyawa kompleks yang paling stabil. Penelitian ini telah dilaksanakan di Laboratorium Kimia FMIPA UNIMED Medan dan Laboratorium Kimia Fisika FMIPA ITB Bandung. Alat alat yang digunakan adalah seperangkat server dengan software NWCHEM 6.2. Berdasarkan hasil perhitungan dan analisis hasil perhitungan dapat dikemukakan beberapa kesimpulan sebagai berikut: Metode perhitungan komputasi yang paling optimal dalam penentuan Energi unsur Ag, senyawa dari ligan-ligan NH_3 , pyr, en, dan dien, dan senyawa kompleks yang terbentuk adalah basis set perhitungan Density functional specific (DFT Orbital). Besarnya perubahan energi pada proses pembentukan senyawa kompleks dikemukakan sebagai berikut: $\Delta H [Ag(NH_3)_2]^+ = -480.4552$ kJ/mol, $\Delta H [Ag(Pyr)_2]^+ = -496.2108$ kJ/mol, $\Delta H [Ag(dien)]^+ = 1231322.929$ kJ/mol, $\Delta H [Ag(en)_2]^+ = 495503.8086$ kJ/mol, dan Senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk adalah senyawa kompleks $[Ag(Pyr)_2]^+$.

Kata-kata kunci: Perak, ligan, senyawa kompleks, perubahan entalpi, dan nwchem.

ABSTRACT

The objective of this research have been the theoretical study for the determined changes in the enthalpy for the formation of complex compound from Argentum metals with the NH_3 , en, pyr, and dien ligands and the determined the stability of complex compound. This research have been done in the Chemistry Laboratory FMIPA Unimed Medan and the theoretical chemistry FMIPA ITB Bandung. The equipment was used the server with the nwchem 6.2 software. The result data obtained some conclusions were the methods of calculation to determined energy Ag element and NH_3 , pyr, en, and dien ligands compound was the Density functional specific (DFT) basic set, $\Delta H [Ag(NH_3)_2]^+ = -480.4552$ kJ/mol, $\Delta H [Ag(Pyr)_2]^+ = -496.2108$ kJ/mol, $\Delta H [Ag(dien)]^+ = 1231322.929$ kJ/mol, $\Delta H [Ag(en)_2]^+ = 495503.8086$ kJ/mol and the stable complex compound was the $[Ag(Pyr)_2]^+$ compound.

Key words: Argentum, ligan, complex compound, changes in the enthalpy, and the nwchem.

PENDAHULUAN

Logam Perak merupakan salah satu logam yang memiliki karakteristik yang unik, salah satu sifat yang menonjol dari Perak adalah Perak termasuk logam yang sulit berreaksi dengan unsur-unsur atau senyawa-senyawa lainnya. Perak digunakan sebagai bahan baku kerajinan, perhiasan, perlengkapan automotif, peralatan medis, dan berbagai penggunaan lainnya. Karena pemakaiannya yang banyak mengakibatkan sangat penting untuk mempelajari khususnya dalam hal pemurnian logam tersebut. Salah satu metoda pemurnian dilakukan dengan pembentukan senyawa kompleks. Dalam penelitian ini akan dikaji penentuan perubahan entalpi pada proses pembentukan kompleks Perak dengan ligan-ligan NH_3 , en, pyr, dan dien.

Pengetahuan tentang senyawa kompleks dapat digunakan untuk berbagai keperluan diantaranya untuk pemurnian logam, ekstraksi pada pengolahan logam, dan berbagai kebutuhan lainnya. Pada saat ini penelitian tentang senyawa kompleks telah dilakukan diantaranya sintesis dan karakterisasi spektroskopi senyawa kompleks $Co(Bpy)^{2+}$ dan $Co(Phen)^{2+}$ (Sukro, 2003). Selain itu Bastian dan Sigel (1996) telah meneliti tentang konstanta stabilitas kompleks $Cu(Bpy)^{2+}$ dan $Cu(Phen)^{2+}$, serta Bruckner (2004) telah meneliti kompleks dari Perak (II) dan (III) Porphyrin, Corroles, dan Carbaporphyrin.

Selain itu kajian termodinamika dan kimia kuantum telah diteliti oleh beberapa peneliti diantaranya: Tewari B Y dkk (1998) yang membahas tentang Studi Termodinamika dan Kimia Kuantum pada konversi Chorismate menjadi Pirupat dan 4 hidroksi benzoat. de la Pena L H dkk (2010) yang membahas tentang pengaruh mekanika kuantum terhadap energi bebas pelarutan ion menggunakan metode komputasi. Simonson T dkk (1996) membahas tentang simulasi klasik dan kuantum pada larutan triptopan. Waheed Q dkk (2011) membahas tentang koreksi mekanika kuantum terhadap simulasi molekul dinamis klasik pada air dan es.

Penemuan yang mendasar dalam kimia anorganik diperoleh dari penelitian SM Jorgensen (1837 – 1914) seorang ahli kimia dari Denmark dan Alfred Werner (1866 – 1919) seorang ahli kimia Swiss. Ketika mereka memulai penelitiannya sifat senyawaan koordinasi masih merupakan teka teki dimana gagasan yang mutakhir mengenai valensi dan struktur tidak dapat diterima. Untuk menjawab berbagai permasalahan tentang senyawa kompleks Werner mengembangkan suatu konsep mengenai ligan di sekeliling ion logam pusat – konsep suatu kompleks koordinasi – dan mendeduksi struktur geometrinya.

Kebanyakan ligan merupakan anion atau molekul netral yang merupakan donor elektron. Ligan yang dapat menyumbangkan satu pasang elektron disebut monodentat seperti F^- , Cl^- , Br^- , NH_3 , H_2O . Ligan yang dapat memberikan dua pasang elektron disebut ligan bidentat seperti etilendiamin, difos, glim, karboksilat, ditiokarbamat, dan lainnya. Ligan polidentat adalah tri -, kuadri -, penta -, heksadentat. Contohnya dietilen triamin, terpiridil, EDTA, dan lainnya.

Perilaku senyawa kompleks juga dapat ditinjau dari Teori medan kristal, dimana ion logam M^{m+} yang terletak pada pusat suatu set oktahedral dari titik-titik muatan. Ion logam memiliki orbital d, elektron pada orbital d tersebut akan memiliki kemungkinan yang sama mengenai kehadirannya dalam salah satu dari lima orbital d di mana saja karena semuanya setara. Salah satu penerapan teori medan ligan adalah untuk menentukan sifat elektrostatis sederhana (medan kristal), atau dalam bentuk yang lebih canggih adalah untuk memahami dan mengaitkan sifat magnetik dari kompleks logam transisi. Sifat magnetik senyawa-senyawaan ini dapat digunakan untuk mengidentifikasi dan mengkarakterisasi senyawa kompleks. Untuk menentukan sifat paramagnetik senyawa kompleks adalah jumlah elektron yang tidak berpasangan, semakin banyak elektron pada orbital d yang tidak berpasangan mengakibatkan sifat paramagnetiknya semakin besar.

Logam Perak merupakan salah satu logam yang memiliki karakteristik yang unik, salah satu sifat yang menonjol dari Perak adalah Perak termasuk logam yang sulit berreaksi dengan unsur-unsur. Pemakaian Perak termasuk banyak selain digunakan sebagai perhiasan, Platina juga digunakan dalam industri sebagai katalis, sebagai bahan baku dari kerajinan, perlengkapan automotif, peralatan medis, dan berbagai pemakaian lainnya. Karena pemakaiannya yang banyak mengakibatkan sangat penting untuk mempelajari khususnya dalam hal pemurnian logam tersebut. Salah satu metoda pemurnian dilakukan dengan pembentukan senyawa kompleks. Perak adalah logam putih, dapat ditempa, dan liat. Rapatannya tinggi (10,5 gr/ml) dan melebur pada $960,5^\circ C$ (Vogel, 1990).

$Ag(II)$ dan $Ag(III)$ terdapat dalam kompleks dengan ligan yang cocok; cara yang cocok adalah untuk mengoksidasi Ag^+ dengan adanya ligan. Jadi oksidasi dengan $S_2O_8^{2-}$ dengan adanya piridin menghasilkan ion merah $[Agpy_4]^{2+}$ sedangkan dalam larutan alkali periodat diperoleh $[Ag(IO_6)_2]^{7-}$ (Cotton, 1989).

Kebanyakan ligan adalah anion atau molekul netral yang merupakan donor pasangan elektron. Beberapa jenis ligan yang umum adalah F^- , Cl^- , Br^- , CN^- , NH_3 , dan H_2O , jenis-jenis ligan ini dapat menyumbangkan satu pasang elektron kepada atom pusat yang disebut sebagai ligan monodentat. Ligan yang mengandung dua atau lebih atom yang masing-masing secara serempak membentuk dua ikatan donor-elektron kepada ion logam yang sama disebut bidentat. Ligan polidentat adalah ligan yang dapat menyumbangkan tiga, empat, lima, dan enam secara serempak kepada atom pusat, yaitu tri -, kuadri -, penta -, dan heksadentat.

Saat ini penggunaan program-program aplikasi kimia komputer sebagai instrumen dalam penelitian kimia makin hari makin signifikan keberadaannya, mengingat ada beberapa keunggulan yang dapat diperoleh melalui penggunaan komputer dengan program ini seperti yang disebutkan diatas. Satu hal yang sangat penting untuk dipahami adalah hasil-hasil yang diperoleh dari perhitungan dengan program simulasi komputer hanya berupa nilai prediksi, yang dalam keadaan tertentu dapat menjadi terdeviasi jauh dari keadaan real dan fakta laboratorium. Namun dengan pesatnya perkembangan program ini telah memberikan berbagai pendekatan perhitungan terhadap sistem molekuler yang juga semakin berkembang sehingga perhitungannya telah dibuat terstruktur serta dengan algoritme tertentu yang memungkinkan pembuatan softwarena, maka nilai prediksi yang diberikan dari hasil perhitungan menjadi lebih dekat ke fakta eksperimen.

Simulasi komputer dalam suatu penelitian berguna untuk mengetahui sifat-sifat elektronis dan optimasi geometris suatu molekul. Hal ini dilakukan hanya untuk mempermudah penelitian kimia, karena dalam menentukan sifat-sifat tersebut suatu molekul tidak lagi harus diamati melalui eksperimen di laboratorium.

NWChem merupakan program komputasi kimia yang didisain untuk bekerja dengan kinerja tinggi pada system supercomputer paralel. Kemampuan dalam melakukan perhitungan energy elektronik molekul dan melakukan analisis menggunakan Hartree-Fock selfconsistent field (SCF) theory, Gaussian density

function theory (DFT), and second-order perturbation theory. Pada semua metoda, optimasi geometri digunakan untuk menentukan energi minimum dan keadaan transisi.

Dalam perhitungan Energi senyawa dan interaksi antar molekul dilakukan uji coba terhadap berbagai model perhitungan untuk menentukan model perhitungan yang paling optimal digunakan. Model perhitungan yang digunakan dalam program NWChem 6.2 (Molecular Sciences Software Group, 2007), adalah:

1. Basis set standard.
2. Basis set Resolution of Identity (RI) fitting
3. Basis set Density functional specific.
4. Basis set Density functional Coulomb and Exchange fitting.
5. Basis set Effective core potentials and their respective
6. Basis set Douglas-Kroll (DK) all-electron
7. Basis set Dyall's Modified Dirac (DmD) all-electron
8. Polarization functions:
9. Diffuse functions:
10. Core-valence functions:

Yin H (2011) mengemukakan salah satu aplikasi dari program NWChem dalam perhitungan energi yang melibatkan pelarut sebagai lingkungan dari reaksi tersebut. Dalam perhitungan energi menggunakan pendekatan hybrid antara Mekanika Quantum (QM) dan Molekular Mechanic (MM). Perhitungan energi total pelarut menggunakan Molekular Mechanic (MM) sedangkan zat terlarut menggunakan Mekanika Quantum (QM). Energi total diperoleh dari penjumlahan QM zat terlarut dengan MM pelarut yang dikemukakan dalam persamaan:

$$E = E_{qm}(r, R; \Psi) + E_{mm}(r, R)$$

dimana r dan R merupakan koordinat dari daerah QM dan MM, dan Ψ menunjukkan fungsi gelombang elektronik zat terlarut pada keadaan dasar. Energi QM, E_{qm} dinyatakan dalam kontribusi internal dan eksternal yang dinyatakan dalam persamaan 1

$$E_{qm} = E_{qm}^{int}(r, \Psi) + E_{qm}^{ext}(r, R, \rho) \quad (1)$$

Bagian pertama dari energi QM E_{qm}^{int} sesuai dengan pernyataan energi zat terlarut dalam fasa gas, sedangkan pernyataan bagian kedua E_{qm}^{ext} sebanding dengan pernyataan Potensial Elektrostatik Efektif (ESP) yang dinyatakan dengan persamaan 1

$$E_{qm}^{ext} = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{|R - r_i|} \equiv E_{ESP}(r, R, Q) \quad (2)$$

Pada persamaan 2 atom-atom QM ditunjukkan oleh muatan ESP (Q_i) yang merupakan potensial elektrostatik bagian luar daerah zat terlarut yang sama dengan yang dihasilkan dari kerapatan (ρ). Siklus termodinamika digunakan dalam menentukan perbedaan energi bebas dinyatakan dalam persamaan 3.

$$\Delta W_{AB} = (\Delta W_{AA}^{CC \rightarrow DFT} - \Delta W_{BB}^{CC \rightarrow DFT}) + (\Delta W_{AA}^{DFT \rightarrow ESP} - \Delta W_{BB}^{DFT \rightarrow ESP}) + \Delta W_{AB}^{ESP} \quad (3)$$

Dalam studi yang dilakukan Yin H (2011) simulasi dilakukan pada kotak yang memiliki sisi-sisi 35,2Å mengandung 1438 molekul air. Dalam perhitungannya digunakan metode Potensial Energy Surface (PES) menggunakan Quasi Trajectory (QCT) dan Time-Dependent Wave Packet (TDWP) dilakukan oleh Jorfi M (2011). Waheed Q (2011) mengemukakan sifat-sifat struktur dan termodinamika senyawa yang dipelajari dengan simulasi dinamis molekul klasik menggunakan tiga model yaitu model Simple Point Charge (SPC), model modifikasi SPC/E, atau model TIP3P.

METODE PENELITIAN

Penelitian ini telah dilaksanakan di Laboratorium Kimia FMIPA UNIMED Medan dan Laboratorium Kimia Fisika FMIPA ITB Bandung. Alat alat yang digunakan adalah seperangkat alat komputer dengan software NWChem 6.2.

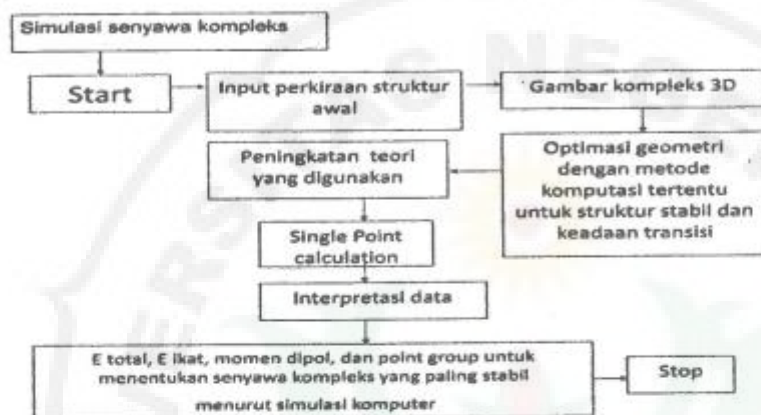
Prosedur Kerja

Untuk menentukan data-data kestabilan, harga energi aktivasi keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks, dan menentukan data-data kestabilan senyawa kompleks yang terbentuk, mengikuti prosedur sebagai berikut:

- a. Membuat data input untuk molekul yang akan disimulasikan menggunakan z-matrix untuk menentukan geometri atom dalam molekul.
- b. Mengcopy file berupa data z-matrix ke computer yang telah ada nwchem.
- c. Membuka program pada server jika belum ada terminal yang membuka server.
- d. Memindahkan file dalam server ke tempat yang diinginkan.

- e. Untuk menjalankan program nwchem untuk senyawa yang diinginkan
- f. Untuk memastikan bahwa perhitungan telah selesai dengan melihat tulisan "Optimization Converged".

Berdasarkan hasil dari kajian komputasi kimia diperoleh data-data sehingga dapat ditentukan mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks dan menentukan senyawa kompleks yang paling stabil.



Gambar 1. Desain Penelitian

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil Penelitian

Simulasi komputer menggunakan program NWCHEM terhadap senyawa kompleks dalam laporan ini disajikan untuk senyawa kompleks Ag dengan ligan NH_3 , en, pyr, dan dien

Tabel 1. Hasil simulasi komputasi beberapa unsure dan senyawa kompleks

No.	Nama Senyawa	Besarnya Energi (kJ/ mol)
1.	Perak	-13636894.48
2.	NH_3	-147243.1124
3.	Pyridine	-646120.6196
4.	dien	-821962.7588
5.	en	-495855.6143
6.	$\text{Ag}(\text{NH}_3)_2$	-13931861.16
7.	$\text{Ag}(\text{Pyr})_2$	-14929631.93
8.	Agdien	-13227534.31
9.	$\text{Ag}(\text{en})_2$	-14133101.9

Pembahasan

Dalam perhitungan Energi unsur, senyawa ligan dan senyawa kompleks dilakukan uji coba terhadap berbagai model perhitungan untuk menentukan model perhitungan yang paling optimal digunakan. Pemilihan basis set yang diuji cobakan berdasarkan pertimbangan unsur-unsur yang diamati merupakan unsur-unsur yang dapat dihitung menggunakan basis set perhitungan tersebut. Berdasar hasil uji coba ternyata basis set perhitungan Density functional specific yang memberikan hasil perhitungan yang optimal. Sehingga set basis perhitungan tersebut digunakan untuk melakukan optimasi geometri dan menentukan besarnya energy dari unsur maupun senyawa. Berdasarkan hasil perhitungan yang dilakukan menggunakan program nwChem 6.2 dengan set basis perhitungan "DZVP (DFT Orbital)".

Tabel 2. Data Hasil Perhitungan Energi senyawa kompleks menggunakan nwChem 6.2

No.	Nama Senyawa Kompleks	Besarnya Energi
-----	-----------------------	-----------------

1.	$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	-13931861.16
2.	$[\text{Ag}(\text{Pyr})_2]^+$	-14929631.93
3.	$[\text{Ag}(\text{dien})]^+$	-13227534.31
4.	$[\text{Ag}(\text{en})_2]^+$	-14133101.9

Berdasarkan data-data yang dikemukakan pada tabel 2 diperoleh bahwa besarnya energi senyawa kompleks $[\text{Ag}(\text{Pyr})_2]^+$ memiliki nilai paling rendah. Hal ini menunjukkan bahwa senyawa kompleks tersebut merupakan senyawa kompleks yang paling stabil.

Tabel 3. Harga Perubahan Energi senyawa kompleks

Nama Senyawa Kompleks	Besarnya Energi (kJ/mol)			Besarnya Perubahan Entalpi (kJ/mol)
	Perak	Ligan	Senyawa Kompleks	
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	-13636894.48	-147243.1124	-13931861.16	-480.4552
$[\text{Ag}(\text{Pyr})_2]^+$	-13636894.48	-646120.6196	-14929631.93	-496.2108
$[\text{Ag}(\text{dien})]^+$	-13636894.48	-821962.7588	-13227534.31	1231322.929
$[\text{Ag}(\text{en})_2]^+$	-13636894.48	-495855.6143	-14133101.9	495503.8086

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil perhitungan dan analisis hasil perhitungan dapat dikemukakan beberapa kesimpulan sebagai berikut:

1. Metode perhitungan komputasi yang paling optimal dalam penentuan Energi unsur Ag, senyawa dari ligan-ligan NH_3 , Cl, en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien, dan senyawa kompleks yang terbentuk adalah basis set perhitungan Density functional specific (DFT Orbital).

1. Besarnya perubahan entalpi pada proses pembentukan senyawa kompleks dikemukakan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \Delta H [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+ &= -480.4552 \text{ kJ/mol} \\ \Delta H [\text{Ag}(\text{Pyr})_2]^+ &= -496.2108 \text{ kJ/mol} \\ \Delta H [\text{Ag}(\text{dien})]^+ &= 1231322.929 \text{ kJ/mol} \\ \Delta H [\text{Ag}(\text{en})_2]^+ &= 495503.8086 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

5. Senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk adalah senyawa kompleks $[\text{Ag}(\text{Pyr})_2]^+$

Saran

Saran-saran yang diajukan menyangkut beberapa permasalahan yang belum dapat diselesaikan pada tahun pertama penelitian, yaitu:

1. Penentuan metode komputasi yang paling optimal digunakan dalam proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan NH_3 , Cl, en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
2. Penentuan jenis senyawa kompleks dari logam Platina yang paling stabil
3. Penentuan keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan NH_3 , Cl, en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
4. Penentuan besarnya Energi Aktivasi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan NH_3 , Cl, en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
5. Penentuan perubahan energi dalam proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan NH_3 , Cl, en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
6. Penentuan senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk dalam reaksi antara logam Platina

UCAPAN TERIMA KASIH

Dalam pelaksanaan penelitian ini banyak pihak terlibat yang telah memberikan kontribusinya, diantaranya

1. Direktorat Jenderal Pendidikan Tinggi, Direktorat Penelitian dan Pengabdian Kepada Masyarakat yang telah menyetujui dan memberikan Dana Penelitian pada Skim Penelitian Pekerti pada tahun 2011 dan 2012.

2. Lembaga Penelitian Unimed yang telah memberikan bantuan mulai dari penyusunan proposal sampai penyusunan laporan Penelitian.
3. Laboratorium Kimia, Jurusan Kimia, dan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA) Unimed yang telah memberikan berbagai kemudahan kepada peneliti sehingga penelitian ini dapat berlangsung dengan baik.
4. Laboratorium Kimia, Jurusan Kimia, dan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA) ITB Bandung yang telah memberikan berbagai kemudahan kepada peneliti sehingga penelitian ini dapat berlangsung dengan baik.

DAFTAR PUSTAKA

- Bastian M and Sigel H., 1997, Extent of Intramolecular Aromatic Ring Stacking in Ternary Cu^{2+} Complexes Formed by 2,2-bipyridin or 1,10 Phenantrolin and Flavin mononucleotide (FM^{2-})¹², *J Inorg. Chem*, Vol 36, 1619–1624.
- Cotton dan Wilkinson, 1989, *Kimia Anorganik Dasar*, (Terjemahan Sahati Suharto), Universitas Indonesia Press, Jakarta
- Bruckner, Christian, 2004, The Silver Complexes Of Porphyrins, Corroles, and Crba porphyrins: Silver in the oxidation states II and III, *J. Chem. Ed.*, Vol 81, No 11, 1665 – 1669.
- de la Pena, Lisandro Hernandez and Gilles H. Peslherbe, 2010, Quantum Effect on the Free Energy of Ionic Aqueous Clusters Evaluated by Nonequilibrium Computational Methods, *J Phys Chem. B*, Vol 114 No 16, 5404 – 5411
- Jorfi, M., 2011, State-to-State Quantum Dynamics Calculations of the C+OH Reaction on the Second Excited Potential Energy Surface, *The Journal of Physical Chemistry A*, 115, 8791-8796
- Molecular Sciences Software Group December, 2007, NWChem User Documentation Release 5.1W.R. Wiley Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest National Laboratory P.O. Box 999, Richland, WA 99352
- Nugraha AW, Muhammad A Martoprawiro, Ratu E Dilyantini, 2011, Kajian Teoritis Pembentukan Senyawa Kompleks logam Perak dan Platina dengan beberapa ligan menggunakan Program NWChem, Laporan Penelitian Hibah Pekerti, FMIPA Unimed, Medan
- Nugraha, A W, 2004, Kajian Kimia Kuantum terhadap turunan senyawa triptamin sebagai obat menggunakan program Hyper Chem 5.01, *J. Saintika Lemlit UNIMED*, Vol 4 (1) Maret, p 43 – 49.
- Nurmalis dan Nugraha, AW, 2007, Sintesis dan Karakterisasi Kompleks antara logam Perak dengan ligan-ligan NH_3 , Cl^- , en , difos , glim , acac , py , bpy , dan dien Melalui Pendekatan Komputasi Kimia dan Eksperimen, Laporan Penelitian Dosen Muda, FMIPA Unimed, Medan
- Simonson Thomas, Chung F. Wong, and Axel T. Bringer, 1997, Classical and Quantum Simulation of Tryptophan in Solution, *J. Phys. Chem. A*, Vol 101, No. 10, 1935 – 1945
- Sukro dkk, 2003, Studi terhadap kompleks Kobalt – Phenantrolin dan Kobalt Bipyridin: Suatu Pendekatan Eksperimen dan Kimia Komputasi, *Teknosains*, Vol 16A, 1, 1-7.
- Tewari B. Yadu, Jiangang Chen, Marcia J Holden, Kendall N Houk, and Robert N Goldberg, 1998, Thermodynamic and Quantum Chemical Study of the Conversion of Chorismate to (Pyrupate + 4-Hydroxybenzoate), *J Phys Chem. B* Vol. 102, No. 43, 8634 – 8639.
- Vogel, 1990, *Buku Teks Analisis Anorganik Kualitatif Makro dan Semimikro*, 5th ed., Longman Group Ltd., London
- Waheed, Qaiser and Olle Edholm, 2011, Quantum Corrections to Classical Molecular Dynamics Simulations of Water and Ice, *Journal of Chemical Theory and Computation (JCTC)*, 7, 2903 – 2909
- Yin Hongyun, Dunyou Wang, and Marat Valiev, 2011, Hybrid Quantum Mechanical/ Molecular Mechanics Study of the SN^2 Reaction of $\text{CH}_3\text{Cl}+\text{OH}^-$ in Water, *The Journal of Physical Chemistry A*, 115, 12047 – 12052