

STRUKTUR DAN DINAMIKA HIDRASI ION Ag^+ MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL MEKANIKA MOLEKUL

STRUCTURAL AND DYNAMIC PROPERTIES OF Ag^+ ION IN WATER USING MOLECULAR DYNAMICS MECHANICS MOLECULES SIMULATIONS

Oleh: Ismi Fawaid dan Dr. Crys Fajar Partana, M.Si., Kimia FMIPA UNY

e-mail: carok.ismi694@gmail.com dan fajar_partana@uny.ac.id

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui: 1) struktur dan 2) dinamika hidrasi ion Ag^+ menggunakan simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler. Subjek penelitian ini adalah struktur dan dinamika ion Ag^+ . Prosedur yang dilakukan dalam penelitian ini dengan menentukan koordinat Ag^+-H_2O dalam koordinat kartesian, kemudian memilih himpunan basis yang cocok (sesuai dengan grafik Lennard-Jones). Selanjutnya menentukan potensial pasangan 2bd dan 3bd. Dan yang terakhir adalah menghitung dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler yang akan menghasilkan trajectory yang kemudian diolah lagi dan menghasilkan berupa grafik RDF, CND, ADF dan pertukaran ligan air dengan Ag^+ . Hasil penelitian menunjukkan bahwa struktur dari sistem hidrasi ion Ag^+ dengan simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler 2bd mengikat air sebagai ligan adalah 8 yang sesuai dengan hasil rasmol dengan jarak 3 Å yang menunjukkan hasil bahwa ligan air untuk DM MM2bd adalah 8. Sedangkan hasil dinamika dari sistem hidrasi ion Ag^+ dengan molekul air menunjukkan hasil dari simulasi DM MM2bd terjadi perpindahan ligan yang menunjukkan bahwa ligan air dalam hidrasinya bersifat dinamis.

Kata kunci : Simulasi dinamika molekuler, potensial 2-badan, potensial 3-badan, air.

Abstract

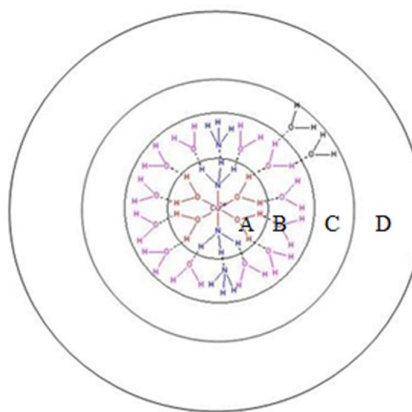
The purpose of this research was to know : 1) structural and 2) dynamic properties of Ag^+ ions in water using molecular dynamics mechanics molecules simulations. The subject of this research is molecular dynamics mechanics molecules simulations. Object of this research is structural dan dynamics of Ag^+ ion. The precedures used in this research, first was determine the coordinate of Ag^+-H_2O in cartesian coordinates. Second, find out the good of basis sets (as Lennard-Jones graph). Third, determine pair potential 2-body and 3-body and the last one, run using molecular dynamics molecular mechanics simulations which produce trajectory form to processed to be RDF, CND, ADF and ligand water exchange with Ag^+ graphs. The results showed that the structure of Ag^+ ion hydration system using MM2bd was binding water as ligand is 8 which is suit in rasmol in linux software where sets on 3 Å on distance, the results was on same ligand, 8 for MM2bd. Whereas, the dynamics of Ag^+ ion with water molecule showed the result on MM2bd simulation there were movement of water ligand during simulations from the second moved to inner shell which mean the water ligand binding to the Ag^+ ion was unstable.

Keyword : dynamics molecular simulation, 2-body potential, 3-body potential, water.

PENDAHULUAN

Logam berat merupakan benda yang berbentuk padat maupun cair yang massa jenisnya lebih dari 5 gram/cm^3 [1]. Dalam tubuh makhluk hidup ion logam berat jumlahnya sangat sedikit atau disebut "trace". Beberapa mineral trace ada yang berupa essential dan non-essential. Untuk ion yang bersifat non-essential sifatnya *toxic* (beracun) bagi makhluk hidup misalnya: ion logam merkuri ($\text{Hg}_{(l)}$), kadmium (Cd), perak (Ag), kromium (Cr) dan timbal (Pb) [2]. Salah satu dari logam transisi yang termasuk dalam logam berat yaitu perak (Ag) dalam tabel periodik berada pada golongan IB periode 4. Perak biasanya terdapat dalam limbah pabrik produksi perak. Limbah yang mengandung perak sangat berbahaya jika dibuang ke lingkungan yang dapat menimbulkan gangguan kesehatan jika masuk ke dalam tubuh manusia. Urutan toksisitas Ag adalah sebagai berikut : $\text{Hg}^{2+} > \text{Cd}^{2+} > \text{Ag}^+ > \text{Ni}^{2+} > \text{Pb}^{2+} > \text{As}^{3+} > \text{Cr}^{2+} > \text{Sn}^{2+} > \text{Zn}^{2+}$ [3]. Pencemaran lingkungan oleh ion Ag(I) dapat masuk ke dalam rantai makanan dan apabila manusia mengkonsumsi makanan yang telah terkontaminasi ion Ag(I) akan terakumulasi kemudian dapat mengakibatkan pigmentis yang disebut argyria. Mengingat bahaya yang ditimbulkan oleh ion Ag maka batas maksimum untuk perak yang diperbolehkan dalam air limbah harus sangat kecil. Berdasarkan Peraturan Menteri Energi dan Sumber Daya Mineral Republik Indonesia No.45 Tahun 2006 tentang baku mutu TCLP (*Toxicity Characteristic Leaching Procedure*) pencemar dalam limbah untuk penentuan karakteristik sifat racun, kandungan perak (Ag) yang diperbolehkan sebesar 40 mg/L (TCLP-A) dan $5,0 \text{ mg/L}$ (TCLP-B) [4]. Penelitian tentang solvasi ion menjadi sangat diperlukan mengingat banyaknya proses kimiawi di alam. Peristiwa solvasi terjadi karena adanya interaksi elektrostatik, terjadinya ikatan hidrogen atau interaksi van der Waals antara molekul solut dan molekul solven. Pada lapisan yang pertama memiliki daya hidrasi yang cukup kuat. Zat terlarut yang berada dalam lapisan pertama merupakan ligan yang terhidrasi dengan ion pusat (kation). Ligan yang berada dalam lapisan pertama dapat berpindah ke lapisan kedua dan sebaliknya membentuk kompleks. Pertukaran ligan dapat mempengaruhi aktivitas.

Dengan menggunakan bantuan komputer dan program perangkat lunak yang semakin maju seperti saat ini dapat menjadi dasar dilakukannya penelitian yang mengkaji lebih dalam mengenai hidrasi ataupun solvasi [5]. Secara garis besar struktur dan dinamika hidrasi dapat ditentukan melalui eksperimen dan simulasi komputer.



Gambar 1. Lapisan pelarut ion; A = lapisan pertama, B = lapisan kedua, C = lapisan ketiga dan D = lapisan fasa ruah

Untuk simulasi melalui eksperimen dapat dilakukan dengan memakai peralatan seperti: difraksi sinar-X, difraksi sinar neutron, spektroskopi dan NMR (*Nuclear Magnetic Resonance*). Sedangkan yang menggunakan simulasi dapat dilakukan dengan dua cara yaitu simulasi *Monte Carlo* (MC) dan *Molecular Dynamics* (MD).

METODE PENELITIAN

Subjek pada penelitian ini adalah simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler. Objek pada penelitian ini adalah struktur dan dinamika ion Ag^+ . Variabel penelitian adalah jumlah molekul air, densitas struktur dan dinamika ion Ag^+ . Peralatan yang digunakan dalam penelitian menggunakan perangkat keras satu set komputer dengan spesifikasi Prosesor Intel Core i3 2,10 GHz, RAM efektif 3,76 GB, VGA NVIDIA 2 GB, Hard Disk dengan partisi sebesar 1 TB. Dan perangkat lunak berupa yang mendukung penelitian seperti Gauss View, Gaussian 98W, Turbomole 5.10, program simulasi DM MM. Penelitian diawali dengan menentukan koordinat $\text{Ag}^+ \text{-H}_2\text{O}$ dalam kartesian dengan bantuan aplikasi gauss view dan dimodelkan dalam koordinat tiga dimensi. Tahap selanjutnya adalah pemilihan himpunan

basis yang cocok (sesuai dengan grafik Lennard-Jones) setelah mendapatkan basis set yang sesuai digunakan sebagai acuan untuk menghitung persamaan fungsional potensial dan 3-badan [6]. Tahap selanjutnya adalah penyusunan potensial pasangan dan potensial 3-badan yang akan menghasilkan persamaan potensial pasangan:

$$\Delta E^{2bd} = E_{MW}^{ab} - E_M^{ab} - E_W^{ab}$$

Dengan MW menunjukkan ion-air, dan M dan W menunjukkan energi dari ion dan air. Dari data tersebut diolah kembali untuk memperoleh suatu bentuk fungsi persamaan matematika yang mewakili energi tersebut dengan algoritma. Algoritma yang digunakan dalam penyusunan fungsi potensial dengan metode kuadrat terkecil dari Lavenberg-Marguart. Bentuk persamaannya sebagai berikut:

$$\Delta E_{Fit}^{2bd} = \sum_{i=1}^n \frac{q_M q_i}{r_{Mi}} + \frac{A_i}{r_{Mi}^a} + \frac{B_i}{r_{Mi}^b} + \frac{C_i}{r_{Mi}^c} + \frac{D_i}{r_{Mi}^d}$$

$a, b, c, d, A_i, B_i, C_i,$ dan D_i adalah parameter fitting, r_{Mi} jarak atom ke- i dari ion Ag^+ dan H_2O , q_i dan q_M adalah muatan atom dari Ag^+ dan H_2O . Untuk persamaan fungsi koreksi tiga badan ($H_2O-Ag^+-H_2O$) yang akan diperoleh adalah sebagai berikut:

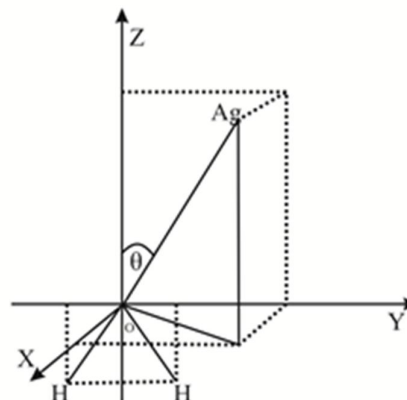
$$\Delta E_{corr}^{3bd} = (E_{WMW}^{ab} - E_M^{ab} - 2E_{MW}^{ab}) - \Delta E_{MW}^{2bd}(r_1) - \Delta E_{MW}^{2bd}(r_2) - \Delta E_{MW}^{2bd}(r_3)$$

Dengan ab menyatakan $ab\ initio$, $2bd$ merupakan energi potensial pasangan, MW dan WW menyatakan interaksi ion-air dan air-air; r_1, r_2 dan r_3 merupakan jarak ion-air₁, ion-air₂, air₁-air₂. Selanjutnya melakukan perhitungan dengan simulasi dinamika molekul mekanika molekul (DM MM). Simulasi solvasi ion Ag^+ dengan air diawali dengan menggunakan simulasi MM2bd yang selanjutnya dilakukan simulasi MM3bd. Tahap konfigurasi akhir hasil dari simulasi MM2bd dijadikan sebagai konfigurasi awal dari simulasi MM3bd. Jarak wilayah MM ditentukan dengan melihat hasil RDF dari analisis *trajectory* simulasi mekanika molekul 2bd (MM2bd) maka wilayah hidrasi lapisan pertama dan kedua dapat ditentukan.

HASIL DAN DISKUSI

Penentuan Koordinat Ag^+-H_2O

Geometri awal Ag^+ dalam H_2O dimodelkan dalam koordinat kartesian tiga dimensi dengan mengatur besaran sudut dan jarak atom dalam sistem. Geometri sudut H-O-H berdasarkan data eksperimen sebesar $104,5^\circ$ dan panjang ikatan O-H sebesar $0,9601 \text{ \AA}$.



Gambar 2. Sistem koordinasi Ag^+-H_2O

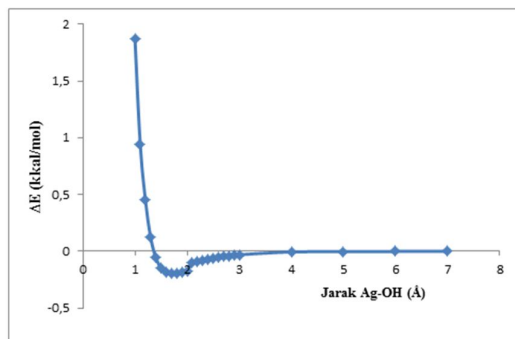
Dengan bantuan *Gauss View*, jika dituliskan dalam koordinat kartesian, geometri awal Ag^+ dalam H_2O terlihat pada tabel di bawah ini: Tabel 1. Koordinat Ag^+-H_2O dalam sistem koordinat kartesian

Atom	X(\AA)	Y(\AA)	Z(\AA)
Ag	-1,247	-0,314	-1,178
O	0,000	0,000	0,000
H	0,000	0,000	0,960
H	0,904	0,000	-0,320

Penentuan Himpunan Basis

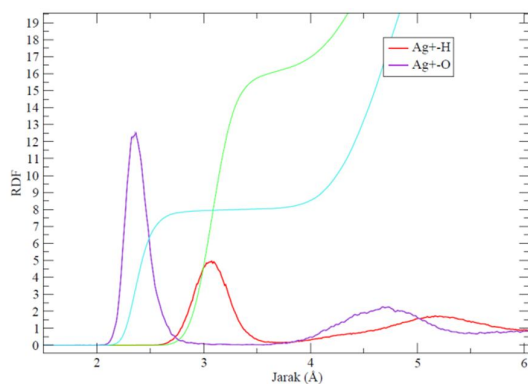
Langkah pertama yang dilakukan adalah mencari jenis himpunan basis atom-atom yang paling cocok untuk digunakan dalam simulasi dinamika molekul mekanika molekul (DM MM) sesuai dengan masing-masing sistem hidrasi yang diteliti. Jenis-jenis himpunan basis pendukung dapat diketahui dengan mengambil dari berbagai jurnal hasil penelitian yang telah dilakukan. Berdasarkan uji coba dari beberapa basis set yang dilakukan, didapatkan himpunan basis yang paling sesuai dengan sistem hidrasi yang akan diteliti dan himpunan basis yang sesuai tersebut membentuk kurva potensial *Lennard-Jones*, himpunan basis yang cocok tersebut adalah LANL2DZ ECP untuk atom

Ag^+ dan DZP-Dunning untuk atom O dan H [7].



Gambar 3. Kurva potensial sistem ion Ag^+ dalam air dengan himpunan basis LANL2DZ ECP-DZP

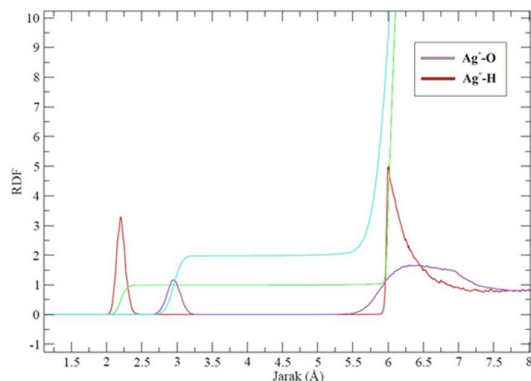
Radial Distribution Functions (RDF)



Gambar 4. Grafik RDF Ag^+ -O dan Ag^+ -H hidrasi dalam air simulasi MM2bd

Gambar 4. merupakan grafik RDF hasil dari kalkulasi simulasi dinamika molekuler dengan metode mekanika molekuler dari sistem hidrasi ion Ag^+ dalam air (Ag^+ - H_2O). Dari gambar yang diperoleh menunjukkan bahwa kurva yang diperoleh menunjukkan bahwa kurva mulai naik pada jarak 2,1 Å dan mencapai puncak pada jarak 2,35 Å serta berakhir pada jarak 2,75 Å. Informasi tersebut menunjukkan bahwa interaksi antara ion Ag^+ dengan atom O dari molekul air (H_2O) terjadi pada jarak 2,3 Å pada lapisan kulit pertama. Dan dalam gambar juga terlihat bilangan integrasi dari atom O adalah 8. bilangan integrasi menunjukkan banyaknya atom O yang terikat oleh sebagai ligan oleh ion Ag^+ pada kulit pertama. Pada Gambar 4 juga memberikan informasi mengenai jarak atom hidrogen (H) dengan molekul air (H_2O) dengan jaraknya adalah 3,1 Å. Jarak tersebut terlihat lebih jauh jika

dibandingkan dengan jarak atom oksigen dengan ion Ag^+ , hal tersebut menunjukkan bahwa puncak pertama dari RDF ion Ag^+ -O dan ion Ag^+ -H tidak terjadi tumpang tindih. Bilangan integrasi atom H terlihat pada angka 16. Bilangan tersebut menunjukkan jumlah atom H yang berada disekitar ion Ag^+ pada kulit pertama. Pada lapisan kedua puncak grafik terlihat pada jarak 4,8 Å untuk atom O dan 5,2 Å untuk atom H.



Gambar 5. Grafik RDF Ag^+ -O dan Ag^+ -H hidrasi dalam air simulasi MM3bd

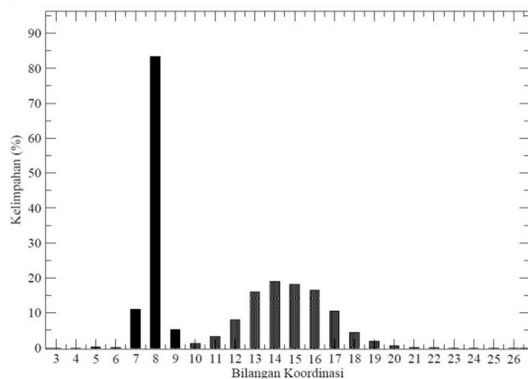
Gambar 5 adalah grafik RDF hasil dari simulasi dinamika molekuler mekanika molekuler/mechanika kuantum dari sistem hidrasi ion Ag^+ dalam air. Pada gambar, kurva menunjukkan mulai naik pada jarak 2,1 Å dan mencapai puncak pada jarak 2,25 Å kemudian mulai turun kembali pada jarak 2,35 Å. Pada puncak 2,3 Å tersebut terjadi interaksi antara atom O dengan dengan molekul air (H_2O) pada kulit pertama. Pada gambar bilangan integrasinya adalah 1, yang menandakan bahwa jumlah ligan yang diikat pada kulit pertama. Pada grafik RDF yang dilakukan pada Ag^+ -O dan Ag^+ -H baik pada simulasi MM2bd maupun MM3bd menghasilkan grafik yang hampir sama karena perbedaannya hanya pada jarak interaksi antar ion baik Ag^+ -O maupun Ag^+ -H. Pada kulit kedua jarak oksigen dengan ion berada pada puncak 6,0 Å yang menunjukkan pada jarak tersebut terjadi interaksi antara atom oksigen dengan ion Ag^+ tetapi pada kulit kedua. **Gambar 8.** juga menyertakan informasi mengenai jarak atom H dari molekul air dengan ion Ag^+ , yang jaraknya tepat berada 2,95 Å dan bilangan integrasi dari atom H adalah 2. Dari data tersebut pada jarak 2,95 Å terjadi interaksi antara atom H dari molekul dengan ion Ag^+ dengan jumlah atom H sebanyak bilangan

integrasinya tersebut yaitu 2. Dalam grafik juga dijelaskan bahwa pada kulit kedua terjadi pada puncak 6,25 Å. Kurva jarak atom oksigen dan hidrogen dari molekul atom air (H₂O) yang ditunjukkan dalam grafik tidak tumpang tindih baik di kulit pertama maupun di kulit kedua. Ringkasan hasil dari analisis RDF dari hidrasi ion Ag⁺ dalam air disajikan pada tabel 4.2 di bawah ini:

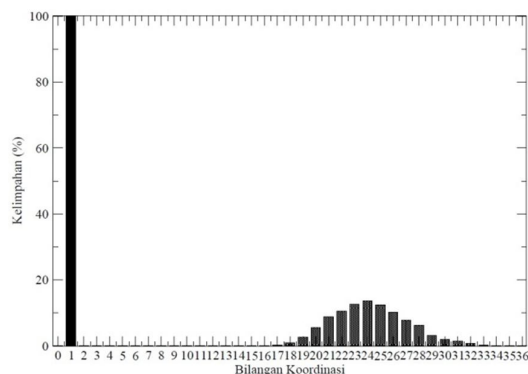
Tabel 2. Nilai karakterisasi dari RDF pada ion Ag⁺ dalam air simulasi dinamika molekuler MM2bd dan MM3bd

Simulasi	α - β	r_{M1}	r_{m1}	N_1	r_{M2}	r_{m2}
MM2bd	Ag ⁺ -O	2,35	2,75	8	4,8	5,4
	Ag ⁺ -H	3,1	3,6	16	5,2	6,0
MM3bd	Ag ⁺ -O	2,25	2,35	1	6,0	7,05
	Ag ⁺ -H	2,95	3,2	2	6,25	7,5

Coordination Number Distributions (CND)



Gambar 6. Grafik CND hidrasi ion Ag⁺ dalam air simulasi MM2bd

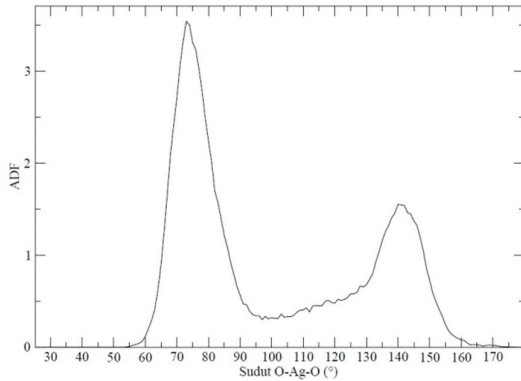


Gambar 7. Grafik CND hidrasi ion Ag⁺ dalam air simulasi MM3bd

Gambar 6 merupakan grafik CND dari hasil kalkulasi simulasi mekanika molekuler ion Ag⁺ dalam air yang memberikan informasi bahwa jumlah ligan yang mengelilingi atom pusat untuk sistem hidrasi ion Ag⁺ dalam air berjumlah 8 dengan probabilitas 84%, maka dapat disimpulkan bahwa ion yang terbentuk merupakan molekul ion yang hampir stabil karena hasil dari kalkulasi menunjukkan bahwa probabilitasnya belum mencapai 100% yang bisa dikatakan stabil, dari grafik menunjukkan pada kulit pertama tidak hanya pada angka 8 jumlah air yang diikat, akan tetapi dimulai dari angka 5 sampai 9 yang puncaknya di angka 8, grafik tersebut menunjukkan bahwa pada kulit pertama masih belum stabil dan bisa dikatan bersifat dinamik dan fleksibel sama seperti pada kulit kedua. Jumlah ligan pada kulit kedua terlihat bervariasi mulai dari 10 sampai 22 dengan probabilitasnya berbeda pula, fakta tersebut menunjukkan bahwa ligan yang berada di kulit kedua sangat dinamik dan fleksibel. Grafik CND pada Gambar 7 memberikan hasil yang berbeda dari grafik dalam Gambar 6 Hasil dari kalkulasi dalam grafik ini menunjukkan bahwa pada kulit pertama bilangan koordinasinya adalah 1 dengan probabilitas 100%. Dengan probabilitas yang menunjukkan 100% bisa dikatakan bahwa ion yang terjadi merupakan ion yang stabil. Sedangkan pada kulit kedua bilangan koordinasinya dimulai dari 17 sampai 33 dengan probabilitas yang berbeda pula yang bisa dikatakan bahwa ligan yang berada di lapisan kedua bersifat dinamik dan bersifat fleksibel yang kemungkinan bisa terjadi perpindahan antar ligan di kulit tersebut.

Angular Distribution Functions (ADF)

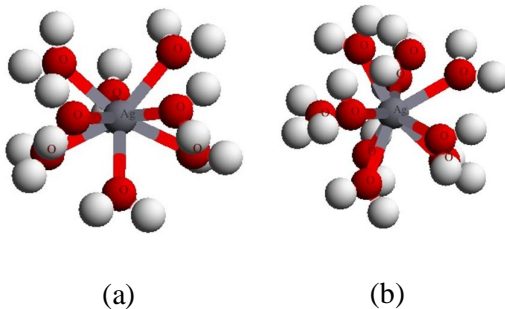
Gambar 8 merupakan hasil dari kalkulasi dari ADF yang diperoleh dari simulasi MM2bd hidrasi ion Ag⁺ dalam air. Pada ADF hasil simulasi yang didapat atau yang terbentuk oleh atom O₁-Ag-O₂ berkisar antara 55° sampai 175°. Dalam grafik ADF pada Gambar 8 terdapat dua puncak sudut utama, puncak pertama terjadi pada sudut 73° dan puncak kedua terjadi pada sudut 139°. Pada sudut 73° merupakan sudut terdekat dan pada sudut 139° sudut terjauh yang terjadi antara molekul air dan ion Ag⁺.



Gambar 8. Grafik ADF sistem hidrasi ion Ag^+ dalam air dengan sudut $\text{O}_1\text{-Ag-O}_2$ simulasi MM2bd

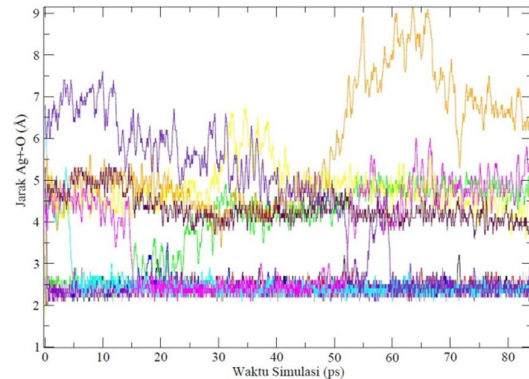
Struktur ion Ag^+ dalam air dari simulasi MM2bd

Struktur hidrasi ion Ag^+ dalam air dianalisis dengan melihat hasil kalkulasi dari RDF, CND dan ADF. Struktur dari sistem hidrasi ion Ag^+ dengan molekul air bisa didapatkan atau dilihat dari hasil *snapshot*. Berdasarkan hasil RDF, CND dan ADF dan *snapshot* dari geometri *hotspot_coords* dengan menggunakan RASMOL pada Linux, rumus struktur sistem hidrasi ion Ag^+ dalam molekul airnya dari simulasi MM2bd[8].

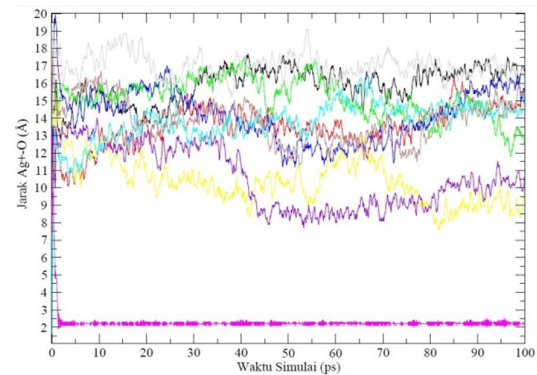


Gambar 9. Struktur hidrasi ion Ag^+ dalam air dari simulasi MM2bd dengan (a) jarak 2 Å (b) jarak 3 Å

Dinamika Hidrasi ion Ag^+ dalam air simulasi MM2bd dan MM3bd



Gambar 10. Grafik pertukaran ligan hidrasi ion Ag^+ dalam air simulasi MM2bd



Gambar 11. Grafik pertukaran ligan hidrasi ion Ag^+ dalam air simulasi MM3bd

Gambar 10 merupakan gambar grafik yang menunjukkan terjadinya pertukaran ligan dari ion Ag^+ dalam air yang didapatkan dari simulasi MM2bd yang ditunjukkan dalam grafik pada jarak 5 Å merupakan dinamika ligan air dengan ion pada lapisan kedua. Dalam grafik menunjukkan bahwa molekul air (ligan air) selama simulasi mengalami perpindahan dari kulit luar ke kulit terdalam yang mulai terjadi pada waktu awal simulasi dan 5 ps yang kemudian kembali terdeteksi mengalami perpindahan ke kulit pertama pada waktu 15 ps begitu sebaliknya pada waktu yang sama ligan air yang berada pada kulit pertama mengalami perpindahan ke kulit kedua [9]. Adanya perpindahan selama simulasi menunjukkan bahwa dinamika dari ligan air dengan ion Ag^+ tidak stabil dikarenakan terjadinya pergerakan dari kulit kedua menuju kulit kedua. Pada simulasi ini, jarak hidrasi ion Ag^+ dengan air ($\text{Ag}^+\text{-O}$) berada dalam jarak rata-rata 2,4 Å.

Gambar 11 merupakan gambar grafik pertukaran ligan hidrasi ion Ag^+ dalam air dari simulasi MM3bd. Dalam grafik menunjukkan bahwa pada awal simulasi ligan air mengalami perpindahan menuju kulit pertama yang kemudian tidak terjadi perpindahan ulang dan tetap sampai akhir simulasi yang menandakan bahwa ligan air dengan ionnya berikatan stabil. Selama simulasi dinamika antara ligan air dengan ion Ag^+ pada kulit pertama terjadi pada jarak 2,3 Å sesuai dengan grafik dan untuk kulit kedua terjadi pada jarak antara 10 sampai 20 Å. Pada kulit kedua, dinamika dari air sangat bervariasi, karena perpindahan yang terjadi naik turun (sesuai dengan grafik) tetapi tidak terjadi overlap dengan berpindah tempat menuju ke kulit pertama [10].

KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa:

1. Struktur dari sistem hidrasi ion Ag^+ dalam air (H_2O) yang menggunakan simulasi MM2bd dan MM3bd secara berurutan megikat air sebagai ligan adalah 8 dan 1, sesuai dengan hasil dari *snapshot* rasmol dari simulasi linux dengan jarak 3 Å yang mengikat ligan air sebanyak 8 pada simulasi MM2bd.
2. Dinamika dari proses simulasi ini melibatkan ion Ag^+ dalam air sebagai ligannya yang menunjukkan hasil dari simulasi MM2bd terjadi pergerakan ligan

dari kulit luar menuju kulit terdalam yang menunjukkan bahwa ligan air yang berikatan dengan ion Ag^+ tidak stabil.

DAFTAR PUSTAKA

[1] Rotzinger, F.P. *Chem. Rev.* 2005, 105, 2003
 [2] Ohtaki, H.; Radnai, T. *Chem. Rev.* 1993, 93, 1157
 [3] Burgess, J. *Metal Ions in Solution.* Jhon Wiley. Chichest, UK, 1978.
 [4] Peraturan Mentrri Lingkungan Hidup dan Kehutanan Republik Indonesia Nomor: P.55/Menlhk-Setjen/2015 tentang cara uji karakteristik limbah bahan berbahaya dan beracun.
 [5] Pranowo, H.D. dan Rode, B.M., 2001. Preferensial Cu^{2+} in Liquid Ammonia: Monte Carlo Simulation Including Three-Body Corrections, *J., Phys. Chem.*,263. 1-6
 [6] Remsungmen, T.; Rode, B.M., *Chem. Phys. Lett.* 2004, 385, 491.
 [7] Loeffler, H.H., Inada, Y., Fuhanashi, S. *J. Phys. Chem. B.* 2006, 110, 5690.
 [8] Pranowo, H.D., Rode, B.M. 1999, *J. Chem. Phys.* 103, 11115.
 [9] Bounds, D.E. *Mol. Phys.* 1985, 54, 1335
 [10] Dunning, Y.H., 1970, *J. Chem. Phys.*, 53, 2823.

Artikel ini telah disetujui pembimbing untuk diterbitkan pada tanggal

.....

Artikel ini telah direview oleh penguji pada tanggal

.....

Dr. Crys Fajar Partana, M.Si
 NIP. 19631230 198901 1 001

Dr. Suwardi, M.Si.
 NIP. 19670722 199512 1 001