

Pemodelan Interaksi Serium(III) dan Air dengan Teori Perhitungan *Ab Initio* serta Penentuan Himpunan Fungsi Basisnya

Eva Vaulina Yulistia Delsy, Tien Setyaningtyas, Ponco Iswanto, Nunik Fitri Utami

Program Studi Kimia MIPA UNSOED
Jl.Dr.Soeparno Purwokerto 53123
e-mail: evasyamsumar@yahoo.com,

Abstrak

Penentuan himpunan fungsi basis (HFB) untuk simulasi ion Ce^{3+} dalam air telah dilakukan dalam penelitian ini. Penentuan HFB harus dilakukan karena HFB yang tersedia adalah HFB untuk unsur Ce(III), sedangkan model sistem kimia yang dikaji dalam penelitian ini adalah Ce dalam bentuk ion (Ce^{3+}). Penentuan HFB dimulai dengan menerapkan semua HFB Ce yang diusulkan dari web basis set. Pemilihan HFB dilakukan dengan menggunakan dua metode. Pertama, mencocokkan kurva energi interaksi terhadap jarak dengan kurva potensial interaksi dua partikel Lennard-Jones 6-12 (metode *scan 2 body*). Ke dua, optimasi struktur kompleks $[Ce(H_2O)_n]^{3+}$ kemudian dibandingkan dengan data eksperimen (metode *water cluster*). Tidak ada transfer muatan yang terjadi pada interaksi Ce^{3+} dengan air. HFB H dan O ditetapkan menggunakan DZP Dunning. Jenis simulasi Dinamika Molekuler yang direkomendasikan untuk mengkaji ion Ce^{3+} di dalam air adalah MK/MM dengan menggunakan HFB Stuttgart RSC ANO/ECP dan *Quantum Mechanical Charge Field* (QMCF) dengan menggunakan HFB SBKJC VDZ ECP pada tingkat teori Hartree-Fock (HF).

Kata Kunci : HFB, ion Ce^{3+} , Lennard Jones, *scan 2 body*, Water Cluster, Hartree Fock, QCMF

Abstract

Determination of the set of basis function (HFB) for the simulation of Ce^{3+} ion in water has been performed in this study. The determination must be made because the HFB is the HFB available for Ce(III) element, while the model chemical systems studied in this research is in the form of Ce ions (Ce^{3+}). Determination HFB is starting by applying all of the proposed Ce web basis set. HFB election conducted using two methods. First, the interaction energy curve to match the distance with a two-particle interaction potential curve of Leonard-Jones 6-12 (2 body scan method). Second, optimization of the complex structure of $[Ce(H_2O)_n]^{3+}$ and compared with experimental data (method of water cluster). There is no charge transfer occurred in the interaction of Ce^{3+} with water. HFB of H and O are set using DZP Dunning. This type of simulation Molecular Dynamics is recommended to assess the ion Ce^{3+} in water is MK/MM using the HFB Stuttgart RSC ANO/ECP and Quantum Mechanical Charge Field (QMCF) by using the HFB SBKJC VDZ ECP at Hartree-Fock (HF) theory.

Keywords : HFB, Ce^{3+} ion, Lennard Jones, 2 body scan, Water Cluster, Hartree Fock, QCMF

1. PENDAHULUAN

Air merupakan penyusun utama dalam sel (sekitar 70%) dan merupakan unsur yang menentukan bagi semua sel. Hidrasi ion dalam tubuh terjadi ketika mengkonsumsi mineral.

Mineral akan mengalami hidrasi dan ionisasi sebelum menjalankan proses metabolisme dalam tubuh. Hidrasi ion merupakan peristiwa dimana ion terlarut dikelilingi oleh molekul air. Hidrasi akan menstabilkan ion dan menyebabkan kristal menjadi larut. Hidrasi ini akan meningkatkan

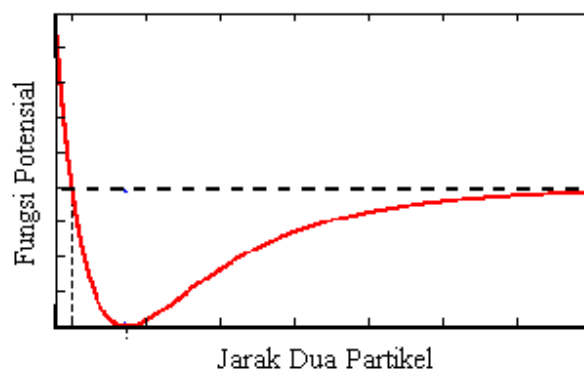
ukuran efektif dari ion (Holum, 1998). Oleh karena itu hidrasi ion menjadi topik penelitian yang menarik dan penting untuk dikaji.

Beberapa ion logam yang banyak dibutuhkan dalam proses biologi misalnya untuk menjalankan sistem syaraf dan mengaktifkan enzim adalah logam golongan transisi. Logam transisi yang banyak dikembangkan dalam pengobatan adalah kromium (Cr^{3+}) yang digunakan untuk kerja insulin dan metabolisme glukosa, zink (Zn^{2+}) untuk menstabilkan bentuk konformasi dari berbagai protein dan meningkatkan imunitas tubuh, mangan (Mn^{2+}) untuk aktifitas beberapa enzim pada metabolisme karbohidrat (Holum, 1998). Logam lainnya yang juga mulai dikembangkan sebagai senyawa obat adalah logam tanah jarang (LTJ). Serium (Ce) merupakan salah satu unsur LTJ yang banyak dikembangkan dalam aplikasi biomedis seperti perlindungan elemen sel primer dari terapi yang menggunakan radiasi, mencegah kerusakan retina dari peroksida intraseluler dan perlindungan terhadap saraf tulang belakang (Patil *et al.*, 2006). Senyawaan Serium(III) memiliki fungsi yang sangat penting, seperti Serium (III) oksalat yang digunakan sebagai obat kanker dan anti mual.

Kajian sifat struktur dan dinamika hidrasi ion logam sangat penting karena berkaitan dengan sifat koordinasi dan reaktivitas ion logam tersebut di dalam larutan. Penelitian yang mengkaji sifat struktur dan dinamika hidrasi ion logam telah dilakukan dengan alat antara lain *Extended X-ray Absorption Fine Structure* (EXAFS), *large-angle X-ray diffraction* (LAXS) dan *nuclear magnetic resonance* (NMR) (Rode, 2004), namun alat-alat tersebut memiliki keterbatasan yaitu tidak dapat mengamati pertukaran ligan yang cepat. Proses pertukaran ligan dari lapisan hidrasi satu ke lapisan lainnya merupakan parameter dinamika yang penting untuk diamati karena terkait dengan reaktivitas ion (Armunanto, 2003). Masalah keterbatasan tersebut dapat diatasi dengan eksperimen komputer (kimia komputasi). Eksperimen komputer dapat menjembatani antara eksperimen dan teori.

Kemampuan eksperimen komputer meningkat seiring dengan kemajuan komputer dan dapat digunakan untuk sistem yang kompleks (Witoelar, 2002). Metode eksperimen

komputer yang digunakan untuk menentukan sifat hidrasi ion adalah simulasi Dinamika Molekular (DM) dan Monte Carlo (MC) (Remsungnen, 2004). Metode MC memberikan gambaran tentang struktur dan energi dalam kesetimbangan, namun tidak dapat memberikan gambaran dinamika atau sifat yang bergantung pada waktu. Metode DM dapat menggambarkan sifat dinamika suatu ion. Simulasi DM telah dikembangkan seiring meningkatnya akurasi dan optimalisasi kebutuhan perhitungan di komputer, yaitu simulasi DM klasik, Car Parrinello (CPMD), Mekanika Kuantum/Mekanika Molekular (MK/MM) dan *Quantum Mechanical Charge Field* (QMCF). Kajian dilakukan dengan simulasi komputer, namun peristiwa yang terjadi di dalam sistem larutan seperti interaksi antara zat terlarut dengan pelarut, juga harus dimodelkan secara akurat. Metode perhitungan kimia komputasi yang akurat untuk pemodelan molekul adalah *ab initio* (Rode, 2006). Jika metode *ab initio* digunakan, maka penentuan Himpunan Fungsi Basis (HFB) yang sesuai dengan model interaksi zat terlarut-pelarut harus dilakukan karena HFB yang tersedia adalah HFB untuk unsur. Ada dua cara yang dapat dilakukan. Pertama, mencocokkan kurva energi interaksi terhadap jarak dengan kurva potensial interaksi dua partikel Lennard-Jones 6-12. Kurva potensial Lennard-Jones 6-12 ditunjukkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Kurva Potensial Lennard-Jones 6-12

Kedua, dengan optimasi struktur kompleks $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n]^{m+}$ dimana n = jumlah molekul air, M = ion logam sebagai ion pusat dan m = muatan ion logam (Remsungnen, 2004). Struktur kompleks teroptimasi kemudian dicocokkan dengan data geometri hasil percobaan

seperti jarak ion logam dengan air dan data sudut.

Penelitian ini dilakukan untuk mencari HFB yang sesuai untuk model interaksi ion Ce^{3+} dengan air. Kajian ini juga diharapkan dapat mendeteksi ada atau tidaknya peristiwa transfer muatan yang dapat mempengaruhi perhitungan energi interaksi serta menggambarkan model atau pola yang terjadi pada interaksi Ce^{3+} -air. Hasil kajian ini diharapkan dapat memberi rekomendasi penggunaan jenis simulasi DM untuk simulasi ion Ce^{3+} dalam air.

2. METODE PENELITIAN

Bahan dan Alat Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian teoritik yang menggunakan satu ion logam transisi Ce^{3+} serta model molekul air $(H_2O)_n$ dengan $n= 1, 2, 3, \dots, 6$. Seperangkat komputer *Processor Intel Pentium 4 3,0GHz, Hard Disk 512MB, RAM 80GB, program GaussView* untuk menggambarkan molekul Ce^{3+} - $(H_2O)_n$, serta program *Gaussian 98W* dan *Gaussian 03W* (Foresman dan Frisch 1996).

Prosedur Kerja

Pencarian HFB kandidat

HFB untuk unsur Ce dan O-H (Air) dilihat pada pustaka Web Basis Set dengan alamat <https://bse.pnl.gov>

Perhitungan Energi Interaksi terhadap jarak dengan metode *scan 2-body*

Konfigurasi tiga dimensi 1 ion Ce^{3+} yang saling berhubungan dengan 1 molekul air digambarkan dengan menggunakan program *Gauss View*. Perhitungan energi *single point* kemudian dilakukan dengan kondisi tingkat teori HF, *charge=3, spin multiplicity=2* dan menggunakan HFB kandidat. HFB yang tidak menghasilkan transfer muatan selama perhitungan energi *single point* digunakan untuk menghitung energi interaksi. Energi interaksi dihitung dengan pendekatan supramolekular:

$$E_{interaksi} = E_{kompleks} - E_{Ce(III)} - E_{air}$$

$E_{interaksi}$ adalah energi interaksi untuk interaksi Ce^{3+} -air. $E_{kompleks}$ adalah energi dari kompleks Ce^{3+} - H_2O . $E_{Ce(III)}$ adalah energi *single point* ion Ce^{3+} dalam konfigurasi kompleks tanpa molekul air. E_{air} adalah energi *single point* semua molekul air dalam kompleks tanpa ion Ce^{3+} . Selain perhitungan energi *single point*, diberikan variasi jarak kompleks Ce^{3+} - H_2O yaitu 1,6; 1,8; 2,0; 2,2; 2,4; 2,6; 2,8; 3,0; 3,2; 3,4; 3,6; 3,8; 4,0; 4,5; 5,0; 5,5; 6,0; 6,5; 7,0; 7,5; 8,0; 9,0 dan 10,0 Å untuk masing-masing HFB yang digunakan.

Perhitungan data geometri optimum interaksi ion Ce^{3+} -air metode *water cluster*

Metode yang digunakan untuk perhitungan interaksi air-ion logam yang mengalami transfer muatan adalah *water cluster*. Pertama, konfigurasi tiga dimensi 1 ion Ce^{3+} yang saling berhubungan dengan 1 molekul air digambarkan. Kemudian geometri interaksi ini dioptimasi dengan kondisi seperti metode *scan 2-body*. Perlakuan ini diulangi terhadap interaksi antara 1 Ce^{3+} dengan 2,3,4,5 dan 6 molekul air. Energi interaksi dihitung dengan pendekatan supramolekular:

$$E_{interaksi} = E_{kompleks} - E_{Ce(III)} - E_{air}$$

$E_{interaksi}$ adalah energi interaksi untuk interaksi Ce^{3+} -air tertentu. $E_{kompleks}$ adalah energi dari kompleks $Ce(H_2O)_n$ (dimana $n = 1,2,3,4,5$ dan 6). $E_{Ce(III)}$ adalah energi *single point* ion Ce^{3+} dalam konfigurasi kompleks tanpa molekul air dan E_{air} adalah energi *single point* semua molekul air dalam kompleks tanpa ion Ce^{3+} . Selain perhitungan optimasi geometri, rata-rata jarak Ce^{3+} -O dicatat untuk masing-masing kompleks.

Penentuan HFB yang cocok untuk interaksi Ce^{3+} -air

Penelitian ini menghasilkan dua jenis data perhitungan yaitu menggunakan metode *scan 2-body* dan *water cluster*. Untuk metode *scan 2-body*, data hasil perhitungan yang meliputi jarak, $E_{kompleks}$, $E_{Ce(III)}$, E_{air} , dan $E_{interaksi}$ yang didapatkan kemudian di plot sesuai kurva

energi interaksi terhadap jarak. Apabila kurva energi terhadap jarak yang didapatkan mendekati kurva Lennard Jones 6-12 maka HFB tersebut dinyatakan sesuai untuk interaksi ion Ce^{3+} -air. Data perhitungan dengan metode *water cluster* dicocokkan dengan data percobaan jarak Ce-O. HFB yang terpilih yaitu HFB yang paling mendekati data percobaan.

Penentuan tingkat teori perhitungan untuk kompleks $[\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})_n]^{3+}$

Tingkat teori perhitungan *ab initio* Hartree-Fock (HF), Møller-Plesset second-order (MP2) dan Couple Cluster Single and Doubles (CCSD) diterapkan pada HFB terpilih untuk interaksi ion Ce^{3+} -air. Proses optimasi kemudian dilakukan menggunakan tingkat teori perhitungan tersebut. Jarak Ce^{3+} -air yang dioptimasi dibandingkan dengan data eksperimen. Apabila jarak Ce^{3+} -air mendekati nilai eksperimen maka tingkat teori perhitungan tersebut dapat digunakan untuk kompleks $[\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})_n]^{3+}$. Cara lain yang dapat dilakukan adalah dengan melihat data energi interaksi. Jika nilai energi interaksi HF, MP2 dan CCSD tidak jauh berbeda, maka tingkat teori perhitungan yang paling rendah yang dipilih karena tidak membutuhkan waktu perhitungan yang lama.

Rekomendasi jenis simulasi DM yang dapat digunakan untuk simulasi Ce^{3+} di dalam air

Pemberian rekomendasi jenis simulasi DM dilakukan dengan melihat kurva energi terhadap jarak yang didapatkan dengan metode *scan 2-body* dan ada atau tidaknya transfer muatan selama perhitungan energi. Apabila kurva yang didapatkan sesuai kurva Lennard digunakan untuk interaksi ion Ce^{3+} di dalam air adalah metode MK/MM dan QMCF. Apabila kurva yang didapatkan tidak sesuai kurva Lennard Jones 6-12 maka jenis simulasi DM yang dapat digunakan untuk interaksi ion Ce^{3+} di dalam air adalah metode QMCF. Jika ada transfer muatan selama perhitungan energi maka jenis simulasi yang dapat digunakan adalah QMCF.

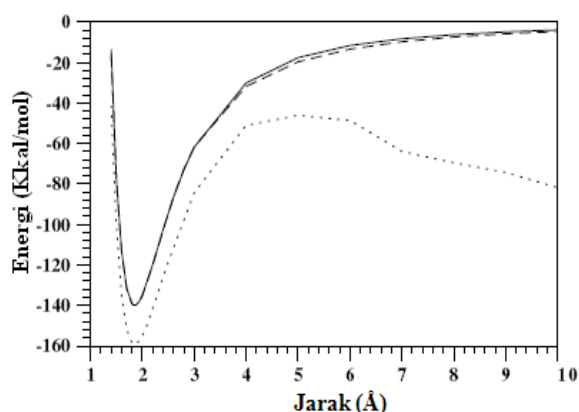
3. HASIL DAN PEMBAHASAN

HFB Kandidat

HFB yang dipakai dalam penelitian diperoleh dari alamat website <https://bse.pnl.gov>. HFB H dan O ditetapkan menggunakan DZP Dunning (Armunanto, 2003), sedangkan HFB Ce dipilih dari kandidat yang telah ditetapkan oleh website tersebut. HFB untuk unsur Ce dipilih yang memiliki ECP (*effective core potential*) yaitu CRENBL ECP, SBKJC VDZ ECP, Stuttgart RSC 1997 ECP, Stuttgart RSC ANO/ECP, Stuttgart RSC Segmented/ECP. ECP akan membuat waktu perhitungan menjadi lebih cepat karena memfokuskan perhitungan hanya pada elektron valensi dan menunjukkan potensial efektif yang dimiliki oleh elektron inti (Alkauskas, 2004).

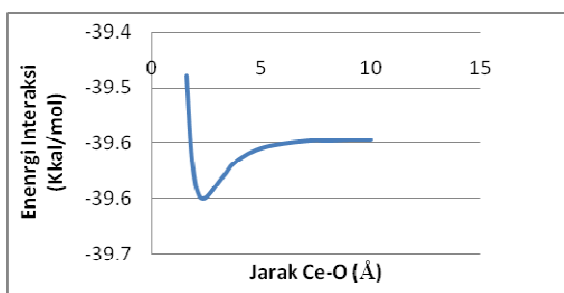
HFB untuk MK/MM

Transfer muatan yang terjadi selama perhitungan energi dilakukan dengan melihat nilai *spin density*. Transfer muatan terjadi jika nilai *spin density* berkurang atau bertambah 0,5 selama perhitungan energi kompleks. Penentuan ada atau tidaknya transfer muatan penting untuk dilakukan karena pada jarak Ce^{3+} - H_2O yang lebih besar akan memberikan nilai energi yang lebih negatif dari energi sebenarnya, seperti yang terjadi pada penelitian yang dilakukan oleh Remsungnen (2004). Gambar 2 menunjukkan adanya transfer muatan (kurva titik-titik) yang terjadi pada Fe^{3+} dengan menggunakan HFB Stuttgart ECP yang dimodifikasi, kurva garis putus-putus merupakan kurva yang dihasilkan dengan HFB Stuttgart ECP dan kurva garis penuh merupakan kurva fungsi pasangan potensial (Remsungnen, 2004). Tidak adanya transfer muatan selama perhitungan energi merupakan syarat penggunaan metode DM MK/MM (*scan 2-body*). Hasil penelitian menunjukkan bahwa tidak terjadi transfer muatan selama perhitungan energi dengan HFB kandidat sehingga metode *scan 2-body* dapat digunakan.



Gambar 2. Kurva energi interaksi terhadap jarak Fe^{3+} -O menggunakan HFB Stuttgart ECP untuk Fe^{3+} dan DZP Dunning untuk Air

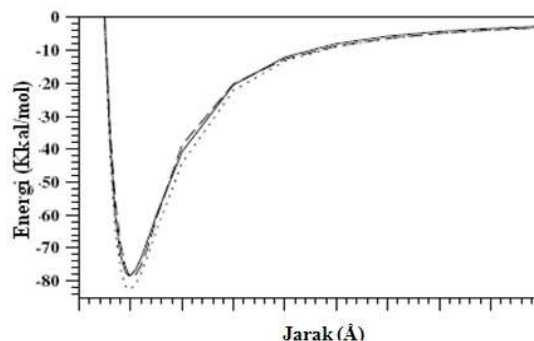
Penentuan HFB perlu dilakukan karena HFB yang tersedia adalah HFB untuk unsur Ce, sedangkan model sistem kimia yang dikaji dalam penelitian ini adalah Ce dalam bentuk ion (Ce^{3+}). Penentuan HFB dengan metode *scan 2-body* dilakukan dengan memplot energi interaksi terhadap variasi jarak Ce^{3+} - H_2O . Hasil yang didapatkan dicocokkan dengan kurva potensial Lennard-Jones 6-12. Gambar 3 menunjukkan kurva energi interaksi terhadap jarak Ce-O hasil perhitungan dengan HFB terbaik, yaitu Stuttgart RSC ANO/ECP (untuk ion Ce^{3+}) dan DZP Dunning (untuk air).



Gambar 3. Kurva energi interaksi terhadap jarak Ce-O menggunakan HFB Stuttgart RSC ANO/ECP untuk Ce^{3+} dan DZP Dunning untuk Air, dengan Metode Perhitungan *Ab Initio*

Hasil penelitian ini sesuai dengan penelitian yang dilakukan oleh Remsungnen (2004) yang menggunakan metode *scan 2-body* untuk menentukan HFB yang dapat digunakan untuk

mengkaji simulasi ion Fe^{2+} dalam air. Garis putus-putus pada Gambar 4. merupakan kurva energi yang didapatkan dengan menggunakan HFB Stuttgart ECP. Plot titik-titik merupakan kurva energi yang didapatkan dengan menggunakan modifikasi HFB Stuttgart ECP. Kedua kurva kemudian dibandingkan dengan profil kurva fungsi pasangan potensial (kurva garis penuh).



Gambar 4. Kurva energi interaksi terhadap jarak Fe^{2+} -O menggunakan HFB Stuttgart ECP untuk Fe^{2+} dan DZP Dunning untuk Air

HFB untuk QMCF

Berbagai tingkat teori perhitungan *ab initio* dapat mempengaruhi lama perhitungan. HF hanya menghitung rata-rata interaksi elektron, dan mengabaikan korelasi antara elektron. MP2 menghitung interaksi antara elektron dalam sistem yang dimodelkan sehingga membutuhkan waktu yang lebih lama dibandingkan dengan HF. CCSD menghitung energi dan optimasi ganda sehingga membutuhkan waktu lebih banyak daripada MP2. Durasi perhitungan berbeda-beda untuk tiap tingkat teori. Sebagai contoh SBKJC VDZ ECP membutuhkan waktu 2 menit untuk HF, 8 menit untuk MP2 dan 51 menit untuk CCSD. Penentuan HFB dengan metode *water cluster* dilakukan dengan mengoptimasi kompleks $[\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})_n]^{3+}$. Kompleks Ce- H_2O hanya dapat teroptimasi dengan menggunakan HFB SBKJC VDZ ECP dan Stuttgart RSC Segmented/ECP. Jarak Ce-O dibandingkan dengan data eksperimen menggunakan XRD (Tabel 1.)

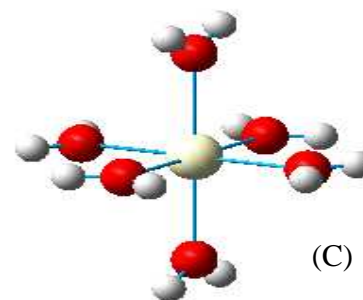
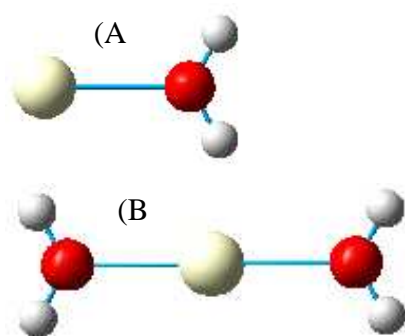
Tabel 1. Perbandingan jarak Ce-O antara dua HFB dengan tingkat teori berbeda dengan data eksp

HFB	Jarak Ce-O (Å)		
	HF	MP2	CCSD
SBKJC VDZ ECP	2,34	2,30	2,32
Stuttgart RSC Segmented/ECP	2,31	2,25	
Data Eksperimen	2,210- 2,513		

Data eksperimen menunjukkan bahwa Ce^{3+} memiliki jarak rata-rata Ce-O adalah 2,210-2,513 Å (Feng *et al.*, 2009). Jarak Ce-O yang didapatkan tidak berbeda jauh dengan data eksperimen. HFB dan tingkat teori perhitungan terpilih berturut-turut adalah SBKJC VDZ ECP dan HF karena tidak membutuhkan waktu perhitungan yang lama. Tingkat teori HF juga telah digunakan pada beberapa interaksi ion-air seperti ion Al^{3+} (Hofer, 2008). Metode *water cluster* juga menghasilkan data energi interaksi. Tabel 2 menunjukkan pengaruh jumlah molekul air terhadap jarak optimum Ce^{3+} -O.

Tabel 2. Energi interaksi Ce-air dengan SBKJC VDZ ECP pada tingkat teori HF

HFB SBKJC VDZ ECP	Energi Interaksi (kcal/mol)	Jarak Ce-O
Ce-1H ₂ O	-40,08	2,34
Ce-2H ₂ O	-77,80	2,43
Ce-6H ₂ O	-241,25	2,54



Gambar 5. Konfigurasi optimum (A) = $[CeH_2O]^{3+}$, (B) = $[Ce(H_2O)_2]^{3+}$, (C) = $[Ce(H_2O)_6]^{3+}$ dengan menggunakan HFB SBKJC VDZ ECP pada tingkat teori HF

Semakin banyak molekul air yang terikat pada Ce akan meningkatkan energi interaksi. Jarak Ce-O meningkat seiring dengan bertambahnya jumlah molekul air. Hal ini dikarenakan semakin banyak interaksi antara ligan dengan logam dan ligan dengan ligan (Remsungnen, 2004).

Rekomendasi Jenis Simulasi DM yang Dapat Digunakan untuk Simulasi Ion Ce^{3+} dalam Air

Hasil penelitian dengan metode *scan 2-body* menunjukkan kurva energi interaksi terhadap jarak menggunakan HFB Stuttgart RSC ANO/ECP pada tingkat teori HF sesuai dengan kurva Lennard Jones 6-12. Jenis simulasi DM MM/MK dapat digunakan untuk simulasi ion Ce^{3+} dalam air dengan menggunakan HFB dan tingkat teori perhitungan tersebut. Jenis simulasi yang juga dapat digunakan untuk simulasi ion Ce^{3+} dalam air adalah metode QMCF dengan menggunakan HFB SBKJC VDZ ECP pada tingkat teori perhitungan HF.

4. KESIMPULAN DAN SARAN

Kesimpulan

1. Tidak terjadi transfer muatan selama perhitungan energi interaksi Ce^{3+} -air dengan HFB CRENBL ECP, SBKJC VDZ ECP, Stuttgart RSC 1997 ECP, Stuttgart RSC ANO/ECP, Stuttgart RSC Segmented/ECP.

2. Jenis simulasi DM yang direkomendasikan untuk mengkaji ion Ce^{3+} didalam air adalah MK/MM dengan menggunakan HFB Stuttgart RSC ANO/ECP pada tingkat teori HF dan QMCF dengan menggunakan HFB SBKJC VDZ ECP pada tingkat teori HF.

Saran

Perlu dilakukan simulasi ion Ce^{3+} di dalam air untuk mengetahui geometri kompleks $[Ce(H_2O)_n]^{3+}$ dan kekuatan interaksi ion Ce^{3+} dengan molekul air.

UCAPAN TERIMAKASIH

Penulis mengucapkan terima kasih atas kerja samanya kepada :

1. *Austrian-Indonesian Center for Computational Chemistry(AIC)* Kimia UGM Yogyakarta
2. *Soedirman Group for Computational Chemistry (SGC)* Kimia UNSOED Purwokerto

DAFTAR PUSTAKA

1. Alkauskas, A., A. Baratoff and C. Bruder, 2004, Gaussian form of Effective Core Potential and Response Function Basis Set Derived from Troullier-Martins Pseudopotential: Results for Ag and Au, <http://quantumtheory.physik.unibas.ch/bruder/audriusphyschem.pdf>, diakses 11 November 2009.
2. Armunanto, R., C.F. Schwenk, A.H.B. Setiaji and B.M. Rode, 2003, Classical and QM/MM molecular dynamics simulations of Co^{2+} in water, *Chemical Physics Letters* 295: 63.
3. Foresman, J.B. and Æ. Frisch, 1996, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* 2nd Edition, Gaussian Inc, USA.
4. Feng, X., J.S. Zhao, X.G. Shi, F. Ruan and L.Y. Wang, 2009, *Crystal structure of triaqua-(pyrazine-2,3-dicarboxylato)cerium(III)*, *Ce(H₂O)₃(C₆H₂N₂O₄)*, CCDC no. 1267/2654.
5. Hofer, T.S., B.R. Randolph, and B.M. Rode, 2008, Al(III) Hydration Revisited. An ab Initio Quantum Mechanical Charge Field Molecular Dynamics Study, *J. Phys. Chem. B* 112: 11726–11733.
6. Holum, J.R., 1998, *Fundamentals of General, Organic and Biological Chemistry*, John Wiley and Sons Inc, USA.
7. Patil, S., Amanda S., Eric H., William S. and Sudipta S., 2006, Protein Adsorption and Cellular Uptake of Cerium Oxide Nanoparticles as a Function of Zeta Potential, *Journal Biomaterials*. [28\(31\): 4600–4607](https://doi.org/10.1002/jbm.b.30171).
8. Remsungnen, T., and B.M. Rode, 2004, Molecular Dynamics Simulation of the Hydration of Transition Metal Ions: the Role of Non-Additive Effects in the Hydration Shells of Fe^{2+} and Fe^{3+} Ions, *Chemical Physics Letters* 385: 491.
9. Rode, B.M., Chinapong K., Kristof P., 2004, Structure and Dynamics of the Cr(III) Ion in Aqueous Solution: *Ab Initio* QM/MM Molecular Dynamics Simulation, *Wiley InterScience, Online*.
10. Rode, B.M. and T.S. Hofer, 2006, How to Access Structure and Dynamics of Solution: the Capabilities of Computational Methods, *Pure Appl. Chem.*, Vol. 78, No. 3, pp. 525
11. Witoelar, A., 2002, *Perancangan dan Analisa Simulasi Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard Jones*, http://www.witoelar.com/aree/tech/Simulasi_Dinamika_Molekul.pdf, diakses tanggal 7 November 2009.