

# STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI ION $V^{2+}$ DALAM AIR BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL MEKANIKA MOLEKUL

## STRUCTURE AND DYNAMIC SOLVATION OF $V^{2+}$ ION WITH WATER BASED ON MOLECULES MECHANICS MOLECULES DYNAMICS SIMULATION

Oleh: Silva Avicennia & Crys Fajar Partana  
Kimia FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta  
silvacennia@gmail.com & crsfajar@gmail.com

### Abstrak

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk mempelajari struktur dan dinamika solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul. Subjek pada penelitian ini adalah hidrasi ion  $V^{2+}$  dan objek penelitian ini adalah struktur dan dinamika solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air. Langkah awal yang dilakukan dalam penelitian ini adalah menentukan basis set yang terbaik. Kemudian menentukan potensial 2-badan dan 3-badan menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul yang akan menghasilkan file *trajectory*, lalu diolah lagi dan menghasilkan data berupa grafik RDF, CND, ADF dan dinamika ligan air. Berdasarkan analisis yang telah dilakukan bahwa struktur dari sistem hidrasi ion  $V^{2+}$  dengan simulasi DM MM2bd dan MM3bd adalah bipiramida pentagonal jumlah ligannya adalah 7. Sedangkan sifat dinamika dari sistem solvasi ion  $V^{2+}$  dengan molekul air menunjukkan bahwa pada simulasi MM2bd tidak terjadi perpindahan ligan air dan pada simulasi MM3bd terjadi perpindahan ligan air yang menandakan bahwa ligan air yang berikatan dengan ion  $V^{2+}$  tidak stabil.

Kata kunci: Air, potensial 2-badan, potensial 3-badan, simulasi dinamika molekul,  $V^{2+}$ .

### Abstract

*The purpose of this research was to study the structure and dynamic of solvation of  $V^{2+}$  ion in water using molecules dynamics mechanics molecules simulation. The subject of this research was hydration of  $V^{2+}$  ion and the object of this research was the structure and dynamics solvation of  $V^{2+}$  ion in water. The first steps of this research to determine the best basis set with. Then, determined the potential of 2-body and 3-body based on molecules dynamics mechanics molecules simulation which would generate trajectory files which were processed and generated data on graph of RDF, CND, ADF and water ligand dynamic. Based the analysis, that the structure and hydration system of  $V^{2+}$  ion with the simulation DM MM2bd and MM3bd is pentagonal bipyramid with the number of ligands is 7. While the dynamic of solvation system of  $V^{2+}$  ion with water showed result that the MM2bd simulation didn't occur the movement of water ligand and the MM3bd simulation occur the movement of water ligand which sign that water ligand binds with  $V^{2+}$  ion was not stable.*

Keywords: 2-body potential, 3-body potential, dynamics molecular simulation,  $V^{2+}$ , water.

## PENDAHULUAN

Sistem cairan yang berada di alam umumnya dalam campuran atau disebut larutan. Solvasi yang terjadi dalam pelarut air disebut hidrasi. Vanadium adalah salah satu logam transisi yang memiliki peran dalam metabolisme makhluk hidup. Vanadium mengaktifkan beberapa elemen jalur insulin (Srivastava & Mehdi, 2005). Vanadium mempunyai efek

peningkatan insulin baik secara in vitro maupun in vivo (Mazban & Mcneill, 2003). Sebagian besar sistem dalam tubuh makhluk hidup merupakan cairan yang didominasi oleh air maupun senyawa biomolekul, sehingga interaksi antara air dan vanadium sangat dimungkinkan terjadi.

Metode yang digunakan untuk menentukan struktur dari hidrasi ion logam dapat

diklasifikasikan menjadi tiga tipe: metode penyebaran seperti X-ray difraksi dan neutron difraksi, metode spektroskopi seperti X-ray absorption fine structure (EXAFS) dan nuclear magnetic resonance (NMR), dan beberapa peralatan kimia teoritis, termasuk berbagai macam dari teknik simulasi, seperti monte carlo (MC) dan molecular dynamics (MD) (Armunanto, Schwenk, Setiaji, & Rode, 2003).

Basis set dalam penelitian simulasi dinamika molekuler memiliki peran yang penting dan sebagai syarat utama untuk menentukan struktur dan dinamika suatu molekul. Semakin kecil nilai BSSE (*Basis Set Superposition Error*), maka pemilihan basis set suatu unsur juga semakin tepat.

Pengetahuan tentang struktur dan dinamika proses solvasi dari ion vanadium merupakan salah satu petunjuk untuk mengetahui pola proses solvasi yang melibatkan pelarut air yang terjadi dalam tubuh makhluk hidup.

## METODE PENELITIAN

### Bahan dan Alat Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian teoritik yang menggunakan satu ion logam transisi  $V^{2+}$  serta molekul air. Seperangkat komputer prosesor Intel Core i3 2,40 GHz, RAM efektif 7,6 GB, VGA NVIDIA 1 GB, Hard disk dengan partisi sebesar 500 GB, program GaussView, program Gaussian 98W, Turbomole versi 5.10, paket program simulasi DM MM, dan software pembantu lain.

### Prosedur Kerja

#### Penentuan Koordinat $V^{2+}$ - $H_2O$ dalam Koordinat Kartesian

Geometri awal  $V^{2+}$  dalam  $H_2O$  dimodelkan dalam koordinat kartesian tiga dimensi dengan mengatur besar sudut dan jarak antar atom dalam sistem. Dengan bantuan Gauss View, dapat dihasilkan bentuk struktur berupa sistem koordinat  $V^{2+}$ - $H_2O$ .

#### Pemilihan Himpunan Basis Terbaik

Pemilihan himpunan basis terbaik untuk  $V^{2+}$  dan  $H_2O$  yaitu dengan melakukan uji coba

pasangan himpunan basis yang tidak menimbulkan muatan yang signifikan terhadap ion  $V^{2+}$  memiliki nilai kesalahan superposisi himpunan basis (*basis set superposition error*, BSSE) yang relatif kecil.

### Penyusunan Potensial Pasangan dan Potensial 3-badan

Dalam penyusunan persamaan potensial pasangan  $V^{2+}$ - $H_2O$  diperlukan titik-titik energi pada berbagai sudut  $\theta$  ( $\theta$ ) dan  $\phi$  ( $\phi$ ) serta pada berbagai variasi jarak kation dan ligan. Sudut  $\theta$  ( $\theta$ ) di variasi mulai dari  $0^\circ$  sampai  $90^\circ$  dengan interval tertentu (0, 5, 10, 15, 20, 30, 50, 70, 80, 90), sedangkan sudut  $\phi$  ( $\phi$ ) divariasi mulai sudut nol ( $0^\circ$ ) derajat sampai  $180^\circ$  (0, 30, 50, 70, 90, 120, 150, dan 180). Jarak kation dan ligan diatur mulai dari 1,4 Å sampai 15 Å.

Fungsi potensial pasangan untuk ion  $V^{2+}$ - $H_2O$  disusun melalui perhitungan metode *ab initio* pada tingkat *Unrestricted Hartree-Fock* (UdHF) menggunakan himpunan basis yang paling cocok untuk sistem tersebut. Data geometri air dibuat tetap selama proses perhitungan. Kemudian ditentukan besarnya energi minimum untuk sistem pada jarak tertentu sesuai dengan persamaan fungsi potensial:

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

Dengan MW menyatakan interaksi ion-air, M dan W merupakan energi dari ion dan air. Data titik-titik energi pada berbagai sudut  $\theta$  ( $\theta$ ) dan  $\phi$  ( $\phi$ ) serta jarak yang diperoleh, selanjutnya diolah lebih lanjut melalui *fitting* 2-badan. *Fitting* energi dilakukan untuk memperoleh suatu bentuk fungsi persamaan matematika yang mewakili energi tersebut dengan algoritma. Algoritma yang digunakan dalam penyusunan fungsi potensial secara analitis dengan metode kuadrat terkecil dari Lavenberg-Marguart. Bentuk persamaannya:

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

a, b, c, d,  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$  dan  $D_i$  adalah parameter *fitting*,  $r_{Mi}$  jarak atom ke-i dari  $V^{2+}$  dan  $H_2O$ ,  $q_i$  dan  $q_M$  adalah muatan atom dari  $V^{2+}$  dan  $H_2O$ .

Tabel 1. Parameter akhir untuk interaksi atom O dan H dalam air dengan V(II)

Atom	$A_i$ (kkal $\text{\AA}^5/\text{mol}$ )	$B_i$ (kkal $\text{\AA}^9/\text{mol}$ )	$C_i$ (kkal $\text{\AA}^{11}/\text{mol}$ )	$D_i$ (kkal $\text{\AA}^{12}/\text{mol}$ )
O	-1811,55	72312,41	-282612,72	228328,16
H	1307,299	-1018,016	-54,975	36,4484

Parameter akhir dari fungsi potensial pasangan terdapat dalam Tabel 1.

Bentuk persamaan fungsi koreksi badan tiga ( $\text{H}_2\text{O}-\text{V}^{2+}-\text{H}_2\text{O}$ ) yang akan diperoleh adalah sebagai berikut:

$$\Delta E_{3b}^{corr} = A_1 \exp(-A_2 r_{v^{2+}-o_1}) \exp(-A_2 r_{v^{2+}-o_2}) \times \exp(-A_3 r_{o_1-o_2}) - r_{v^{2+}-o_2}^2$$

dengan  $r_1$ ,  $r_2$  dan  $r_3$  menyatakan jarak ion-air<sub>1</sub>, ion-air<sub>2</sub> dan air<sub>1</sub>-air<sub>2</sub>. Nilai parameter akhir diperoleh menggunakan algoritma Levenberg-Marquart terdapat dalam Tabel 2.

### Simulasi DM MM

Simulasi solvasi ion  $\text{V}^{2+}$  dengan air, diawali dengan menggunakan simulasi molekul

Tabel 2. Parameter akhir untuk fungsi koreksi 3-badan

$A_1$ (kkal/mol)	$A_2$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )	$A_3$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )
0,27	0,45	0,07

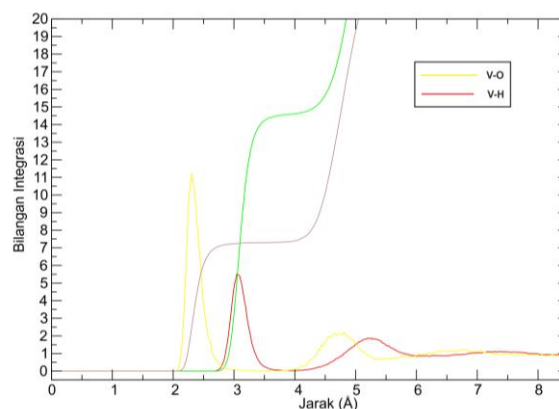
MM2bd. Tahap konfigurasi akhir hasil dari simulasi MM2bd dijadikan sebagai konfigurasi awal dari simulasi MM3bd

### HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

Himpunan basis yang sesuai dengan sistem dan membentuk kurva potensial *Lennard-Jones* adalah SBKJC ECP untuk atom  $\text{V}^{2+}$  dan DZP untuk atom O dan H.

Simulasi dinamika molekul mekanika molekul ion  $\text{V}^{2+}$  dalam air dilakukan pada kondisi 1 ion dalam 499 molekul air ( $\text{H}_2\text{O}$ ) dengan suhu 298,16 K dan densitas larutan sebesar 0,99072 g  $\text{cm}^{-3}$ . *Cut-off* ditetapkan sebesar 12,0  $\text{\AA}$ . Di dalam simulasi ini terlebih dahulu memasukkan persamaan potensial 2-badan kemudian dilanjutkan dengan simulasi mekanika molekul 3-badan.

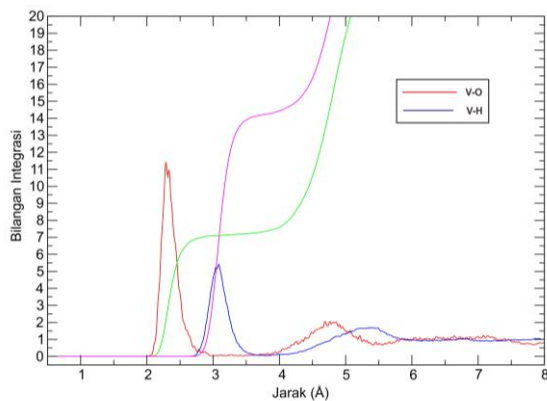
### Radial Distributiom Function (RDF)



Gambar 1. Grafik RDF  $\text{V}^{2+}-\text{O}$  dan  $\text{V}^{2+}-\text{H}$  solvasi ion  $\text{V}^{2+}$  dalam air hasil simulasi MM2bd

Grafik RDF hasil dari simulasi MM2bd dari sistem solvasi ion  $\text{V}^{2+}$  dalam air ditunjukkan pada Gambar 1. Pada gambar menunjukkan kurva naik pada jarak 2,1  $\text{\AA}$  dan mencapai puncak pada jarak 2,3  $\text{\AA}$  lalu berakhir pada jarak 2,8  $\text{\AA}$ . Pada jarak 2,3  $\text{\AA}$  tersebut terjadi interaksi antara ion  $\text{V}^{2+}$  dengan atom O dari molekul air ( $\text{H}_2\text{O}$ ) pada kulit pertama. Pada grafik menunjukkan bilangan integrasi dari atom O adalah 7. Bilangan integrasi ini menunjukkan banyaknya atom O yang terikat sebagai ligan oleh ion  $\text{V}^{2+}$  pada kulit pertama sebanyak 7.

Pada Gambar 1. juga memberikan informasi mengenai interaksi antara atom H dari molekul air ( $\text{H}_2\text{O}$ ) dengan ion  $\text{V}^{2+}$  yang terjadi pada jarak 3  $\text{\AA}$ . Jarak tersebut lebih jauh jika dibandingkan dengan atom O dengan ion  $\text{V}^{2+}$ , hal ini menunjukkan bahwa puncak pertama dari RDF ion  $\text{V}^{2+}-\text{O}$  dan ion  $\text{V}^{2+}-\text{H}$  tidak terjadi tumpang tindih. Bilangan integrasi atom H terlihat pada angka 14. Bilangan tersebut menunjukkan jumlah atom H yang berada disekitar ion  $\text{V}^{2+}$  pada kulit pertama.

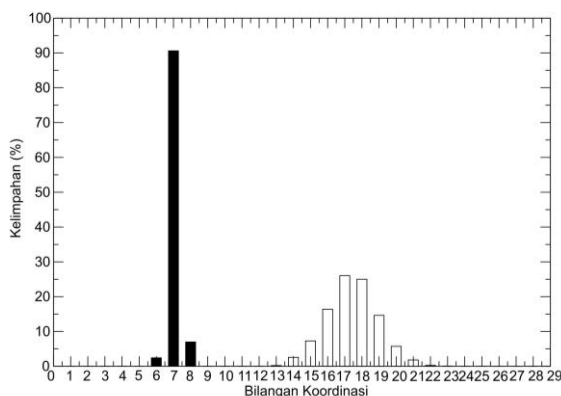


Gambar 2. Grafik RDF  $V^{2+}$ -O dan  $V^{2+}$ -H solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air hasil simulasi MM3bd

Grafik simulasi RDF hasil dari simulasi MM3bd dari sistem solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air ditunjukkan pada Gambar 2. Pada gambar kurva menunjukkan naik pada jarak 2 Å dan mencapai puncak pada jarak 2,3 Å kemudian turun kembali pada jarak 2,6 Å. Pada jarak 2,3 Å tersebut terjadi interaksi antara ion  $V^{2+}$  dengan atom O dalam molekul air ( $H_2O$ ) pada kulit pertama. Pada grafik menunjukkan bilangan integrasi dari atom O adalah 7 yang menandakan jumlah ligan yang diikat pada kulit pertama.

Gambar 2. juga menunjukkan informasi jarak atom H dari molekul air dengan ion  $V^{2+}$ , yang puncaknya berada pada jarak 3 Å dan bilangan integrasi dari atom H adalah 14. Grafik menunjukkan bahwa kurva jarak atom oksigen dan hidrogen dari molekul air tidak tumpang tindih baik di kulit pertama maupun kulit kedua.

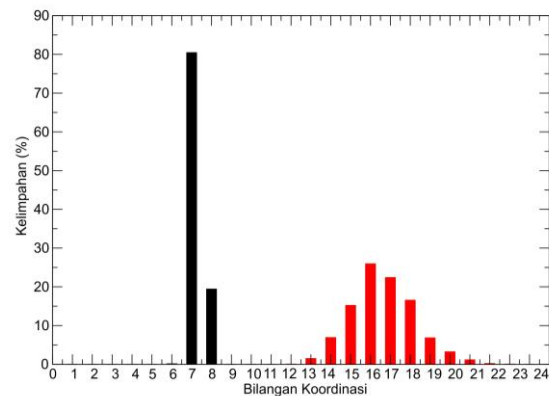
### Coordination Number Distribution (CND)



Gambar 3. Grafik CND solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air MM2bd

Gambar 3. memberikan informasi bahwa jumlah ligan yang mengelilingi atom pusat untuk solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air berjumlah 7 dengan probabilitas 90%. Dari grafik menunjukkan ligan

pada kulit pertama tidak hanya pada angka 7, tetapi angka 6 hingga 8 dan puncaknya pada angka 7. Ligan pada bilangan koordinasi 6 memiliki probabilitas 2,5% dan pada bilangan koordinasi 8 memiliki probabilitas 7,5%. Ligan tersebut kurang stabil karena probabilitasnya belum mencapai 100%. Jumlah ligan pada kulit kedua juga belum stabil karena dari 13 sampai 22 dengan probabilitas yang bervariasi, hal ini menunjukkan ligan yang berada pada kulit kedua sangat dinamik dan fleksibel.



Gambar 4. Grafik CND solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air MM3bd

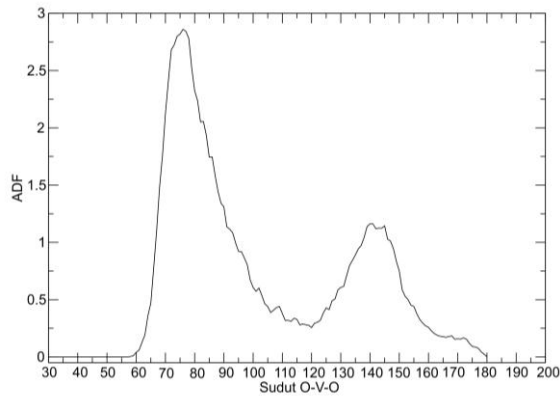
Gambar 4. menunjukkan grafik CND dari simulasi MM3bd. Hasil dari kalkulasi ini menunjukkan bahwa pada kulit pertama bilangan koordinasinya adalah 7 dengan probabilitas 80%. Akan tetapi, grafik menunjukkan ligan pada kulit pertama tidak hanya pada angka 7, tetapi pada bilangan koordinasi 8 dengan probabilitas 20%. Sehingga dapat dikatakan bahwa ligan pada kulit pertama kurang stabil dan bersifat dinamik. Sedangkan pada kulit kedua bilangan koordinasinya dimulai dari 13 hingga 22 dengan probabilitas yang berbeda pula.

Dari hasil pada grafik CND menunjukkan bahwa hasil yang diperoleh tidak jauh berbeda. Dalam kulit pertama, grafik MM2bd menunjukkan bilangan koordinasi 7 dan grafik MM3bd menunjukkan bilangan koordinasi 7 pula, serta probabilitas keduanya tidak jauh berbeda pula. Akan tetapi keduanya masih belum stabil. Untuk kulit kedua, bilangan koordinasi berkisar antara 13 hingga 22 untuk MM2bd dan MM3bd, serta masing-masing memiliki probabilitas yang bervariasi. Pada kulit kedua ini, molekul air (ligan oksigen dan hidrogen) yang diikat bersifat dinamik.

### Angular Distribution Function (ADF)

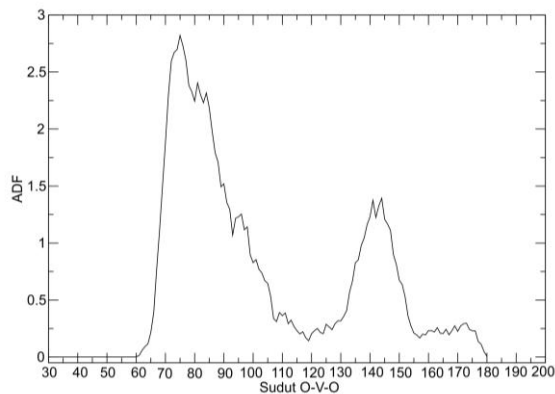
Gambar 5. menunjukkan grafik ADF dari simulasi MM2bd solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air. Grafik ini menunjukkan bahwa hasil simulasi

yang terbentuk oleh atom  $O_1-V-O_2$  berkisar antara  $56^\circ$  hingga  $180^\circ$ .



Gambar 5. Grafik ADF sistem hidrasi ion  $V^{2+}$  dalam air simulasi MM2bd

Pada grafik ADF terbentuk dua puncak utama, puncak pertama terjadi pada sudut  $76^\circ$  dan puncak kedua pada sudut  $141^\circ$ .



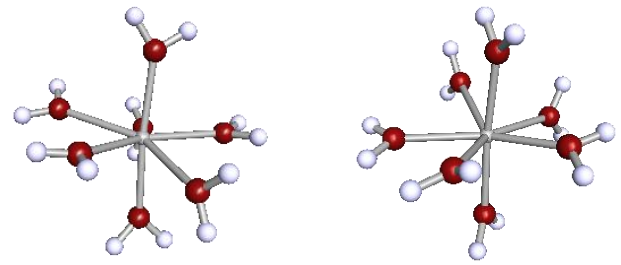
Gambar 6. Grafik ADF sistem hidrasi ion  $V^{2+}$  dalam air simulasi MM3bd

Gambar 6. menunjukkan grafik ADF dari simulasi MM3bd solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air. Grafik ini menunjukkan bahwa hasil simulasi yang terbentuk oleh atom  $O_1-V-O_2$  berkisar antara  $58^\circ$  hingga  $180^\circ$ . Pada grafik ADF terbentuk dua puncak utama, puncak pertama terjadi pada sudut  $74^\circ$  dan puncak kedua pada sudut  $141^\circ$ . Pada grafik ini juga menunjukkan beberapa sudut dengan puncak kecil selama simulasi. Munculnya puncak-puncak kecil ini disebabkan karena ligan yang diikat oleh ion mengalami perpindahan sehingga terjadi perubahan sudut ikat antara ion dengan ligan.

### Struktur solvasi ion $V^{2+}$ dalam air dari simulasi MM2bd dan MM3bd

Struktur solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air dianalisis dengan melihat hasil kalkulasi dari RDF, CND, dan ADF. Struktur ini dilihat dari geometri *hotspot\_coords* menggunakan software TmoleX.

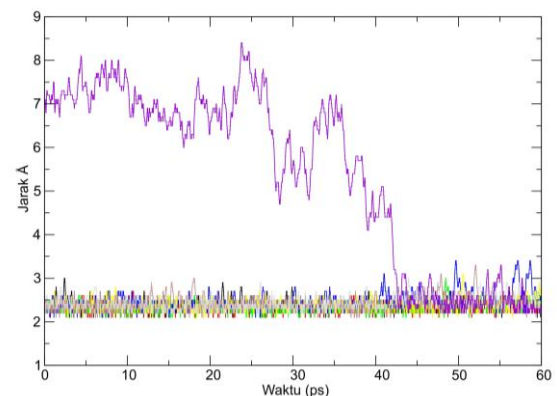
Rumus struktur sistem solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air dari simulasi MM2bd dan MM3bd dalam Gambar 7.



a. Simulasi MM2bd      b. Simulasi MM3bd  
Gambar 7. Struktur solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air pada kulit pertama dari simulasi MM2bd (a) dan MM3bd (b)

Struktur tersebut menunjukkan bahwa satu atom pusat (V) mengikat tujuh ligan ( $H_2O$ ) sehingga memiliki bentuk geometri bipiramida pentagonal.

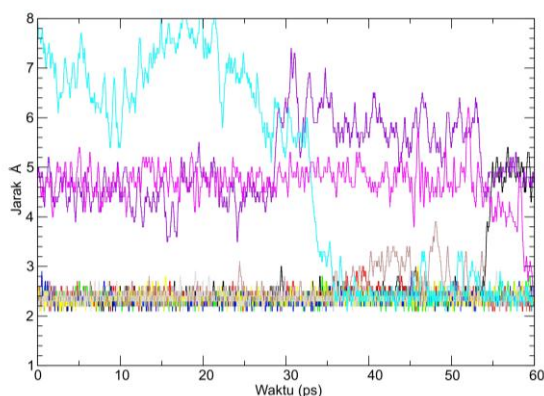
Dinamika solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air dilakukan dengan mengolah data hasil trajectory baik untuk MM2bd maupun MM3bd menggunakan kalkulasi *Distcalc* pada Linux. Dari olahan data tersebut maka akan menghasilkan grafik yang memberikan informasi mengenai waktu tinggal ligan (ps) dalam kulit pertama dan kulit kedua. Selain itu, grafik ini juga memperlihatkan perpindahan ligan air dari kulit pertama menuju kulit kedua maupun sebaliknya. Gambar 8. dan Gambar 9. menunjukkan ada tidaknya pertukaran ligan.



Gambar 8. Grafik dinamika ligan solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air simulasi MM2bd

Gambar 8. merupakan grafik yang menunjukkan pergerakan ligan dari ion  $V^{2+}$  dalam air dari hasil MM2bd. Dari grafik tersebut menunjukkan bahwa ligan air mengalami perpindahan dari kulit kedua ke kulit pertama yang terjadi pada waktu 43 ps. Kemudian tidak terjadi perpindahan, hal ini menandakan bahwa ligan air dengan ionnya

berikatan stabil. Dalam simulasi ini, jarak solvasi ion  $V^{2+}$  dengan air berada dalam kisaran jarak 2,4 Å.



Gambar 9. Grafik dinamika ligan solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air simulasi MM3bd

Gambar 9. merupakan grafik yang menunjukkan pergerakan ligan dari ion  $V^{2+}$  dalam air dari hasil MM3bd. Dari grafik tersebut menunjukkan bahwa ligan air mengalami perpindahan dari kulit kedua ke kulit pertama yang terjadi pada waktu 36 ps, kemudian pada waktu 54 ps ligan dari kulit pertama mengalami perpindahan ke kulit kedua. Perpindahan ini menunjukkan bahwa dinamika ligan air tidak stabil. Dalam simulasi ini, jarak solvasi ion  $V^{2+}$  dengan air berada dalam kisaran jarak 2,4 Å. Sehingga dinamika ligan solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air antara simulasi MM2bd lebih stabil dibandingkan dengan MM3bd.

## SIMPULAN DAN SARAN

### Simpulan

Berdasarkan data RDF, ADF, dan CND maka diperoleh struktur solvasi ion  $V^{2+}$  dalam air memiliki bentuk geometri bipiramida pentagonal. Data eksperimen menunjukkan pada simulasi MM3bd di kulit pertama pada jarak 2,17 Å terdapat 6 atom O dan pada jarak 2,8 Å terdapat 12 atom O dan memiliki bilangan koordinasi 6, hasil penelitian menunjukkan pada simulasi MM2bd dan MM3bd di kulit pertama pada jarak 2,3 Å terdapat 7 atom O dan pada jarak 3 Å terdapat 14 atom H dan memiliki bilangan koordinasi 7.

Dinamika dari proses simulasi MM2bd menunjukkan tidak terjadi pergerakan ligan air selama simulasi berlangsung sedangkan pada simulasi MM3bd menunjukkan terjadinya pergerakan ligan dari kulit kedua ke kulit pertama dan sebaliknya. Sehingga menunjukkan bahwa

ligan air yang berikatan dengan ion  $V^{2+}$  dalam MM2bd lebih stabil.

### Saran


Perlu dilakukan penelitian ulang untuk memperoleh MM3bd yang lebih baik agar diperoleh hasil akurat sesuai eksperimen. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut menggunakan simulasi atau metode yang lain untuk mengetahui keakuratan penelitian yang telah dilakukan.

### DAFTAR PUSTAKA


- Armunanto, R., Schwenk, C. F., Setiaji, A. H. B., & Rode, B. M. (2003). Classical and QM/MM molecular dynamics simulations of  $Co^{2+}$  in water. *Chemical Physics*, 295(1), 63–70. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2003.08.006>
- Companion, Audrey L. 1991. *Ikatan Kimia*. Bandung: Penerbit ITB.
- Cramer, C.J., 2004. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. Wiley.
- Dorland. *Kamus Saku Kedokteran Dorland*. Edisi 25. Alih bahasa. dr. Poppy Kumala, dr. Sugiarto Komala, dr. Alexander H. Santoso, dr. Johannes Rubijanto Sulaiman, dr. Yuliasari Rienita. Jakarta: Penerbit Buku Kedokteran EGC, 1998.
- Hirata, F., 2003. *Molecular Theory of Solvation*. New York: Kluwer Academic Publishers.
- Lilly, E., & Rode, B. M. (2002). QM / MM – MD simulation of hydrated vanadium ( II ) ion. QM / MM – MD simulation of hydrated vanadium ( II ) ion, (March 2014). [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(02\)01209-5](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(02)01209-5)
- Nechay, B. R. (1984). Mechanisms of Action of Vanadium. *Annual Review of Pharmacology and Toxicology*, 24(1), 501–524.
- Marzban, L., & Mcneill, J. H. (2003). Insulin-Like Actions of Vanadium : Potential as a Therapeutic Agent, 267(May), 253–267. <https://doi.org/10.1002/jtra.10034>
- Moertolo, Ali., dkk. 1984. *Kimia Kuantum untuk Penggemar Kimia di Indonesia*. Surabaya: PT Bina Ilmu.
- Partana, C. F. (2010). STRUKTUR SOLVASI ION SKANDIUM (I) DALAM AMMONIA, 59–65.
- Poulikakos, D., & Maruyama, S. (2003). Review. *Microscale Thermophysical Engineering*, 7(3), 181–206. <https://doi.org/10.1080/10893950390219047>

- Pranowo, Harno Dwi. 2011. Pengantar Kimia Komputasi. Penerbit Lubuk Agung: Bandung.
- Pranowo, H.D. 2016. *Bahan Ajar Kimia Komputasi*. Semarang: Universitas Negeri Semarang.
- Rode, B. M., & Hofer, T. S. (2006). HOW TO ACCESS STRUCTURE AND DYNAMICS OF SOLUTIONS: THE CAPABILITIES OF COMPUTATIONAL METHODS (Special Topic Article) How to access structure and dynamics of solutions: The capabilities of computational methods. *Pure Appl. Chem*, 78(3), 525–539.
- Schuchardt, K. L., Didier, B. T., Elsethagen, T., Sun, L., Gurumoorthi, V., Chase, J., Windus, T. L. (2007). Basis set exchange: A community database for computational sciences. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 47(3), 1045–1052. <https://doi.org/10.1021/ci600510j>
- Schwenk, C. F., Loeffler, H. H., & Rode, B. M. (2003). Structure and Dynamics of Metal Ions in Solution: QM / MM Molecular Dynamics Simulations of  $Mn^{2+}$  and  $V^{2+}$ , 199(23), 1618–1624.
- Siu, C., Liu, Z., Tse, J. S., & Al, O. (2002). Size-Dependent H<sub>2</sub> Elimination Reaction, 10846–10860.
- Srivastava, A. K., & Mehdi, M. Z. (2005). Insulino-mimetic and anti-diabetic effects of vanadium compounds. *Diabetic Medicine*, 22(1), 2–13. <https://doi.org/10.1111/j.1464-5491.2004.01381.x>

Artikel ini telah disetujui untuk diterbitkan oleh  
Pembimbing pada tanggal  
...23 April 2018

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

Artikel ini telah direview untuk diterbitkan  
oleh Penguji Utama pada tanggal  
...23 April 2018

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