

**DETERMINATION OF MANY-BODY EFFECT OF $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ ($n=1-6$)
COMPLEXES BASE ON AB INITIO CALCULATIONS****Penentuan Pengaruh Badan-Banyak pada Kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ ($n=1-6$)
Berdasarkan Perhitungan Ab Initio**

Harno Dwi Pranowo, Karna Wijaya, Bambang Setiaji, Rhano Setyan Janu
*Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry
Gadjah Mada University, Yogyakarta*

ABSTRACT

The computational chemistry calculation to determine the stabilization energy and ligand-ligand repulsion energies of $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ system was done by using LANL2DZ basis set for Co^{2+} and 6-31G* basis set for NH_3 at the level theory of unrestricted Hartree-Fock (UHF).

Result from the calculation shows that the larger number of NH_3 ligand present in the complex give the effect of the lower average binding energy per ligand molecule, i.e. $-503,29$ kJ/mol for $[\text{Co}(\text{NH}_3)]^{2+}$ and then decrease to $-338,025$ kJ/mol for octahedral $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ complex. A correlation between the number of ligand and the metal ion-ligand bond distance was studied. The result shows that the metal ion-ligand bond distance increases along with the larger number of the ligand.

The calculation of average pair interaction energies between Co^{2+} and NH_3 in $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ complexes were done in order to determine the error possibility caused by the neglect of non-additivity contribution. The results indicate that the maximum relative error with respect to the pair potential, $\% \Delta E_{\text{avpi}}$, is 17,64 % $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ complex.

Keywords: *unrestricted Hartree-Fock (UHF); basis set; many-body effect*

PENDAHULUAN

Interaksi unsur transisi dengan pelarutnya telah lama dipelajari karena berkaitan erat dengan berbagai proses dalam kimia, biokimia dan farmakologi. Ion Co^{2+} memiliki peranan yang penting sebagai unsur esensial bagi tubuh [1]. Ion Co^{2+} dapat berperan dalam interaksi dengan rantai samping asam amino membentuk kompleks yang stabil. Porfirin, dan kobalamin merupakan salah satu contoh makromolekul yang mengandung ion Co^{2+} sebagai atom pusat [2].

Interaksi ion dengan pelarutnya banyak dipelajari dengan dua kategori metode eksperimen yaitu metode hamburan (*scattering*) dan metode spektroskopi. Difraksi sinar-X, difraksi neutron, difraksi elektron, hamburan sinar-X sudut kecil, hamburan neutron merupakan contoh metode hamburan, sedangkan *Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS)*, X-ray

Absorption Near Edge Structure (XANES), resonansi magnetik inti dan Raman infra merah merupakan jenis metode spektroskopi [3].

Selain metode eksperimen, metode kimia komputasi seperti simulasi Monte Carlo, dan dinamika molekular telah memungkinkan studi tentang simulasi sistem solvasi larutan encer terhadap ion logam bervalensi satu atau dua seperti pada kajian terhadap struktur hidrasi ion Na^+ [4], struktur ligan di sekitar Li^+ [5] dan Mg^{2+} [6], hidrasi ion Cu^{2+} dalam air [7] dan amoniak cair [8], dan struktur hidrasi ion Cu^+ dalam air dan amoniak cair [9].

Kelemahan utama dari simulasi Monte Carlo atau dinamika molekular yang hanya menggunakan potensial pasangan sebagai model interaksi antar spesies dalam sistem adalah pengukuran energi interaksi antar spesies yang terlalu besar (*overestimate*). Hal ini dapat ditunjukkan oleh jumlah ligan yang lebih besar daripada data

eksperimen akibat dari pengabaian kontribusi non-aditivitas. Simulasi Monte Carlo yang telah dilakukan pada sistem Co^{2+} dalam amoniak cair dengan hanya menggunakan potensial pasangan sebagai model interaksi menunjukkan bahwa bilangan koordinasi kulit pertama yang mengelilingi Co^{2+} adalah 8 [10].

Tujuan dari penelitian ini adalah menyelidiki pendekatan pengaruh badan-banyak terhadap interaksi spesies Co^{2+} dengan molekul NH_3 berdasarkan perhitungan *ab initio* terutama pada energi dan struktur dari sistem tersebut. Dalam penelitian ini akan dipelajari hubungan antara energi stabilisasi kompleks dengan jumlah amoniak yang ada dalam kompleks tersebut. Dengan mengetahui pengaruh badan banyak pada sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$, dapat diprediksi hasil yang diperoleh untuk simulasi terhadap sistem tersebut yang hanya menggunakan potensial pasangan tanpa melibatkan adanya pengaruh suku badan banyak.

METODOLOGI

Penelitian ini merupakan penelitian bidang kimia komputasi yang keseluruhan pekerjaannya dilakukan dengan menggunakan perangkat keras dan perangkat lunak komputer. Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini adalah Gaussian98 [11], yaitu pada penentuan himpunan basis terbaik, perhitungan energi dan evaluasi struktur.

Penyusunan geometri awal

Geometri awal untuk sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ dengan $n=1-6$ disusun dalam bentuk koordinat kutub. Kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)]^{2+}$ dan $[\text{Co}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$ dalam bentuk linier, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_3]^{2+}$ dalam bentuk trigonal, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ dalam bentuk tetrahedral, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5]^{2+}$ dalam bentuk trigonal bipiramidal dan $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ dalam bentuk oktahedral. Molekul NH_3 mengarah pada ion Co^{2+} sesuai dengan arah momen dipolnya dengan jarak N-H dan sudut H-N-H adalah 1,0124 Å dan 106,67° [12]. Visualisasi geometri awal tersebut

diperoleh dengan menggunakan program perangkat lunak Rasmol 2.6.

Pemilihan himpunan basis telah dilakukan oleh peneliti terdahulu [13], dengan mendapatkan data bahwa kombinasi himpunan basis terbaik dalam perhitungan sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ adalah himpunan basis LANL2DZ ECP untuk Co^{2+} dan himpunan basis 6-31G* untuk molekul NH_3 . Kombinasi himpunan basis tersebut memiliki nilai kesalahan superposisi himpunan basis, *Basis Set Superposition Error (BSSE)* yang rendah.

Optimisasi geometri

Melalui prosedur ini, fungsi gelombang dan energi ditentukan atas dasar geometri awal yang akan terus-menerus dioptimasi sampai didapatkan geometri yang memberikan energi yang lebih rendah. Prosedur ini menghitung gaya antar atom dalam molekul dengan mengevaluasi gradien energi (*first derivative*) terhadap koordinat atom secara analitik. Hasil dari optimisasi geometri ini adalah struktur yang paling stabil dari kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$. Data yang diperoleh adalah energi kompleks, E_{MLn} , panjang ikatan dan sudut ikat.

Perhitungan energi molekul dengan inti maya (ghost atom)

Prosedur ini digunakan untuk menghitung energi ligan dalam molekul, E_{Ln} . Geometri ligan yang digunakan sesuai dengan geometri hasil optimisasi untuk kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ yang bersesuaian. Langkah yang lain adalah perhitungan energi dari Co^{2+} , E_M . Energi stabilisasi kompleks, ΔE_{stb} dihitung dari hasil perhitungan energi kompleks, E_{MLn} dikurangi dengan energi ion logam, E_M dan energi ligan, E_{Ln} .

Untuk mengevaluasi pengaruh badan banyak pada sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$, beberapa persamaan di bawah ini digunakan dalam perhitungan.

Energi stabilisasi kompleks, ΔE_{stb} , dihitung sebagai,

$$\Delta E_{stb} = E_{MLn} - E_M - E_{Ln} \quad (1)$$

E_{MLn} , E_M dan E_{Ln} masing-masing adalah energi total $\text{Co}(\text{NH}_3)_n^{2+}$ dengan n

= 1-6, energi atom pusat Co^{2+} dan energi n molekul NH_3 pada konfigurasi yang sama dengan $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$.

Energi ikatan rata-rata per molekul ligan, ΔE_{avbind} , dihitung sebagai

$$\Delta E_{\text{avbind}} = \Delta E_{\text{stb}} / n \quad (2)$$

Untuk mengevaluasi kemungkinan kesalahan oleh asumsi interaksi *pairwise additivity* karena pengaruh badan banyak, energi interaksi pasangan rata-rata antara M dan L pada kompleks ML_n , ΔE_{avpi} , dihitung dan didefinisikan sebagai

$$\Delta E_{\text{avpi}} = \sum_{i=1}^n [E_{\text{ML}_i} - E_M - nE_L] / n \quad (3)$$

ML_i adalah pasangan ML pada kompleks ML_n .

Persentase *non-additivity*, $\%E_{\text{avbin}}$ dan $\%E_{\text{avpi}}$, didefinisikan

$$\% \Delta E_{\text{avbind}} = 100(1 - \Delta E_{\text{avbin}}^{n=1} / \Delta E_{\text{avbin}}^{n \neq 1}) \quad (4)$$

dan

$$\% \Delta E_{\text{avpi}} = 100(1 - \Delta E_{\text{avbin}} / \Delta E_{\text{avpi}}) \quad (5)$$

Energi tolakan antar ligan didefinisikan sebagai

$$\Delta E_{\text{rpl}} = E_{L_n} - nE_L \quad (6)$$

HASIL DAN PEMBAHASAN

Semua analisis struktur dan perhitungan energi didasarkan pada struktur teroptimasi dari sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ yang diperoleh dari perhitungan.

Pergeseran muatan di dalam sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$

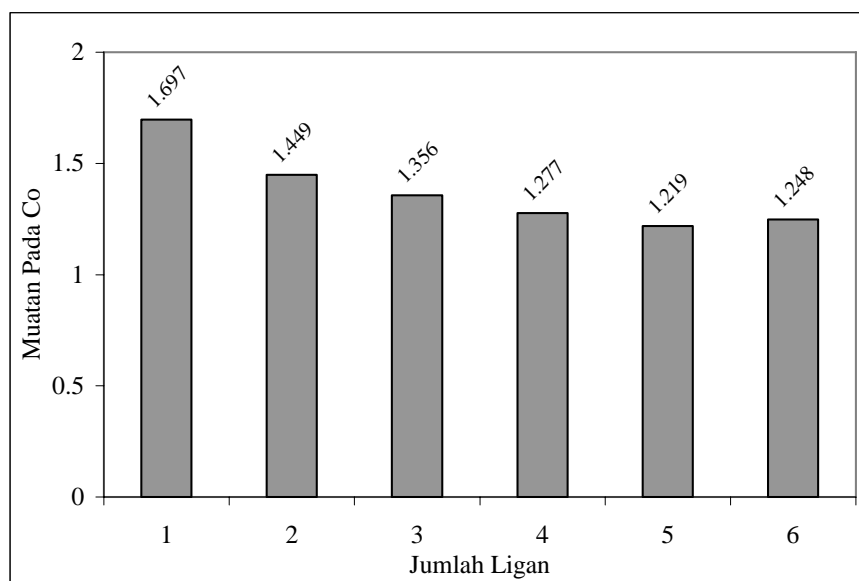
Interaksi antara suatu ion pusat dengan ligan akan dapat mempengaruhi muatan bersih (*netto*) dari masing-masing atom dalam molekul tersebut. Muatan positif (2+) pada Co^{2+} dapat tergeser ke atom N dalam NH_3 yang berada di dekatnya.

Semakin banyak jumlah ligan yang terdapat dalam kompleks, muatan atom Co^{2+} akan menurun dari 1,697 untuk ligan tunggal hingga muatan 1,248 untuk enam ligan (Gambar 1). Polarisasi amoniak oleh Co^{2+} dimungkinkan terjadi pada molekul dengan jumlah ligan besar. Keteraturan penurunan harga muatan bersih atom Co untuk jumlah ligan yang makin besar memiliki pengecualian pada spesies $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$, pada spesies ini muatan bersih atom Co memiliki harga yang lebih tinggi dibandingkan spesies $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5]^{2+}$. Hal ini dimungkinkan karena adanya stabilisasi yang lebih baik untuk struktur oktahedral pada $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ dibandingkan dengan struktur trigonal bipiramidal (TBP) pada $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5]^{2+}$ sehingga pada struktur TBP polarisasi ligan oleh logam menjadi lebih kecil.

Penurunan muatan Co diikuti oleh polarisasi N dan H di dalam NH_3 . N di dalam NH_3 menjadi lebih bermuatan negatif sedangkan H menjadi lebih bermuatan positif. Pergeseran muatan dari Co^{2+} tidak sampai mengubah konfigurasi elektron pada Co. Hal ini merupakan fenomena yang telah banyak dikaji dalam bidang eksperimental.

Kerapatan Spin

Parameter yang digunakan untuk menguji kualitas himpunan basis terpilih adalah kerapatan spin. Kerapatan spin menyatakan jumlah elektron yang tidak berpasangan. Pada ion Co^{2+} , harga kerapatan spinnya adalah 3. Jika harga kerapatan spin ion Co^{2+} relatif tidak berubah, maka kualitas himpunan basis yang digunakan dapat dikatakan baik. Untuk semua sistem yang dipelajari (gambar 2), kerapatan spin ion Co^{2+} berharga 2.998 untuk sistem dengan ligan tunggal. Nilai ini menurun sampai dengan 2.864 untuk jumlah ligan sebanyak enam buah. Penurunan nilai kerapatan spin ion Co^{2+} tersebut relatif tidak signifikan dengan kondisi ketika Co tidak berinteraksi, sehingga menurut parameter kerapatan spin, kualitas himpunan basis yang digunakan dapat dikatakan baik.



Gambar 1 Pergeseran muatan dari ion Co^{2+} dalam kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ dengan jumlah ligan sebagai parameter pengubah

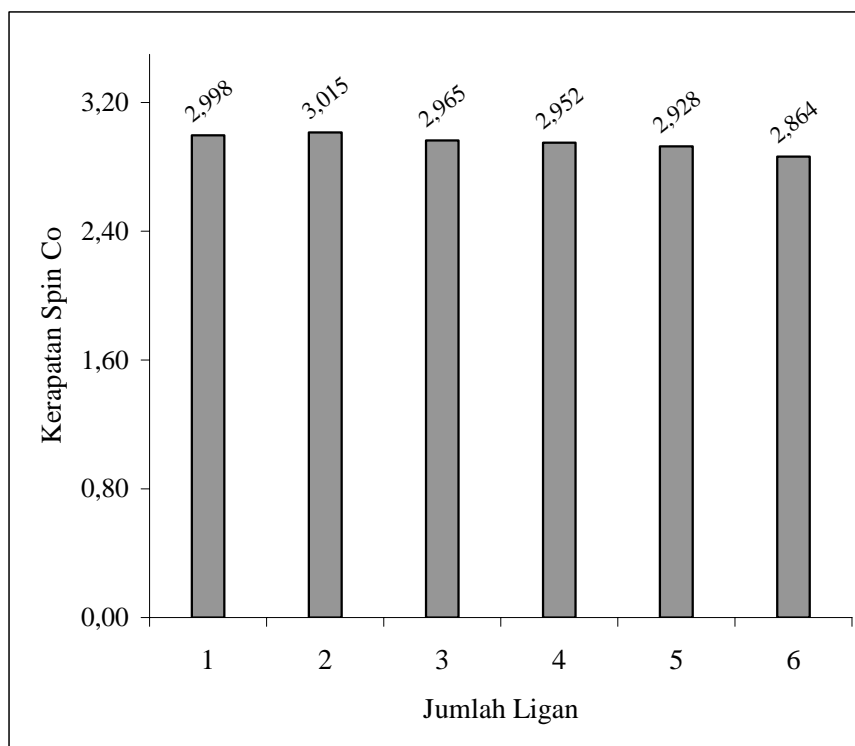
Tidak adanya perubahan konfigurasi elektron pada ion Co^{2+} tersebut memberikan indikasi bahwa perubahan muatan ion Co^{2+} menggambarkan fenomena yang selama ini dikenal sebagai pengaruh induksi dari suatu spesies bermuatan terhadap ligan.

Pengaruh badan banyak

Seperti terlihat pada tabel 1, jarak Co-N menjadi lebih besar sesuai dengan kenaikan jumlah ligan. Hal ini dimungkinkan karena adanya tolakan antar molekul ligan di sekitar ion Co^{2+} . Untuk memperkecil tolakan antar molekul amoniak, sistem berusaha mengatur konfigurasi dengan memperpanjang jarak antara ion Co^{2+} dengan molekul amoniak. Energi tolakan antar ligan, ΔE_{rpl} , dalam

kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ menunjukkan adanya kenaikan sesuai dengan bertambahnya molekul ligan dalam kompleks. Hal ini dapat memperjelas fenomena bertambah besarnya jarak Co-N sesuai dengan bertambahnya jumlah molekul amoniak. Beberapa penelitian tentang pengaruh badan banyak untuk beberapa ion transisi juga menghasilkan pengamatan yang sama tentang pengaruh tolakan antar ligan yang sangat berpengaruh terhadap energi kompleks [14].

Pengecualian terjadi pada spesies $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$, jarak Co-N sedikit lebih kecil dibandingkan spesies $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5]^{2+}$. Hal ini mungkin disebabkan oleh stabilisasi yang lebih baik dari struktur oktahedral dibandingkan dengan struktur trigonal bipiramidal.



Gambar 2 Kerapatan spin pada Co dalam kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ dengan jumlah ligan sebagai parameter pengubah

Sesuai dengan data pada tabel 1, terlihat bahwa energi interaksi per molekul ligan, ΔE_{avbind} , menurun sesuai dengan kenaikan jumlah ligan. Energi ikatan rata-rata antara ion Co^{2+} dengan molekul NH_3 menurun dari $-503,29$ kJ/mol (ligan tunggal) sampai dengan $-338,025$ kJ/mol (enam ligan). Fenomena ini dapat dijelaskan dari adanya tolakan antar ligan. Semakin banyak ligan yang berada di sekitar ion Co^{2+} , kekuatan ikatan Co^{2+} terhadap molekul NH_3 akan semakin rendah akibat peningkatan energi tolakan antar molekul amoniak.

Untuk mengetahui persentase kesalahan yang diakibatkan oleh pengabaian terhadap efek *non-additivity*, dilakukan perhitungan terhadap energi interaksi pasangan rata-rata antara logam (M) dengan ligan (L) dalam kompleks ML_n (ΔE_{avpi}). Hasil perhitungan disajikan pada tabel 1. Tabel 1 menunjukkan bahwa pengasumsian penggunaan *pairwise*

additivity yang berarti pengabaian terhadap efek *non-additivity*, pada kompleks Co^{2+} memberikan kesalahan maksimum ($\% \Delta E_{\text{avpi}}$) pada $17,64$ % untuk kompleks $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$.

Dari hasil tersebut, dapat dikatakan bahwa suku badan banyak memberikan pengaruh yang kuat pada sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$. Simulasi pada sistem tersebut tanpa melakukan koreksi atau melibatkan kontribusi badan banyak akan dapat memberikan prediksi yang berlebihan terhadap nilai energi stabilisasi minimum global dan struktur senyawa kompleks. Untuk menentukan pengaruh badan banyak pada simulasi Monte Carlo, perlu dilakukan penyusunan potensial koreksi badan tiga yang selanjutnya diimplementasikan pada simulasi.

Hasil tersebut dapat dibandingkan dengan penelitian sebelumnya (tabel 2). Secara umum dapat dikatakan bahwa keseluruhan simulasi terhadap sistem solvasi suatu ion dengan

menggunakan potensial pasangan saja sebagai model interaksi ion dengan pelarutnya akan memberikan kesalahan dalam memprediksi struktur dan energi sistem. Hal ini disebabkan oleh fakta bahwa potensial pasangan tersebut kurang mampu menggambarkan keseluruhan interaksi yang ada di dalam sistem $[M(NH_3)_n]^{n+}$ tersebut karena potensial pasangan disusun hanya atas dasar interaksi 1 ion dengan 1 ligan saja sehingga mengabaikan interaksi antara ion dengan ligan kedua dan juga tolakan antar ligan.

Dari hasil simulasi Monte Carlo yang menggunakan potensial pasangan pada sistem solvasi ion Co^{2+} dalam amoniak cair [10], diketahui bahwa terdapat 8 molekul amoniak di sekitar

ion Co^{2+} . Bila dibandingkan dengan perhitungan terhadap pengaruh badan banyak untuk penggunaan potensial pasangan sebagai model interaksi, maka diperoleh kesalahan maksimum sebesar 17,64 % untuk $[Co(NH_3)_6]^{2+}$. Hal ini mengindikasikan bahwa simulasi Monte Carlo yang telah dilakukan memprediksi secara berlebihan pada bilangan koordinasinya. Tetapi perbandingan hasil yang diperoleh dengan metode simulasi terhadap hasil yang diperoleh menggunakan metode eksperimen belum dapat dilakukan karena data penelitian tentang bilangan koordinasi untuk sistem solvasi ion Co^{2+} dalam amoniak cair sejauh ini belum tersedia.

Tabel 1 Parameter energi interaksi yang diperoleh dari perhitungan optimisasi kompleks $[Co(NH_3)_n]^{2+}$ dengan n=1-6.

n	ΔE_{int} (kJ/mol)	ΔE_{avbin} (kJ/mol)	% ΔE_{avpi}	ΔE_{rpi} (kJ/mol)
1	-503,289	-503,29	0	0
2	-915,112	-457,56	4,76	6,08
3	-1248,97	-416,31	9,31	62,12
4	-1557,36	-389,32	11,84	100,25
5	-1789,37	-357,86	15,77	223,58
6	-2028,06	-338,03	17,64	400,13

Tabel 2 Pengaruh badan banyak pada kompleks oktahedral, $[M(NH_3)_6]^{n+}$, disajikan dalam bentuk persentase terhadap potensial pasangan. Harga energi dan jarak masing masing dalam satuan kJ/mol dan Å.

M	r_{M-L}	ΔE_{avbin}	ΔE_{avpi}	% ΔE_{avpi}	Keterangan
Li^+	2,02	-85,772	-25,522	23	[15]
Na^+	2,65	-69,454	-14,644	17	[16]
K^+	2,94	-70,291	-14,644	13	[17]
Be^{2+}	2,05	-300,41	-228,03	43	[16]
Mg^{2+}	2,30	-231,38	-98,742	30	[16]
Cu^+	2,28	-113,39	-4,2677	27	[9]
Cu^{2+}	2,29	-266,52	-115,06	30	[8]
Zn^{2+}	2,28	-284,51	-64,015	18	[19]
Co^{2+}	2,21	-338,03	-410,41	18	Penelitian ini

KESIMPULAN

Berdasarkan perhitungan *ab initio* pada tingkat teori UHF untuk sistem $[\text{Co}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$ dengan $n=1-6$ menggunakan himpunan basis LANL2DZ untuk Co^{2+} dan 6-31G* untuk NH_3 diperoleh penjelasan bahwa energi ikatan rata-rata menurun sesuai dengan bertambahnya molekul ligan, yaitu -503,29 kJ/mol untuk $[\text{Co}(\text{NH}_3)]^{2+}$ sampai dengan -338,025 kJ/mol untuk $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$. Hal ini ditandai oleh kenaikan energi tolakan antar ligan yang menyebabkan perubahan struktur kompleks melalui pemanjangan jarak Co-N. Kesalahan maksimum yang timbul akibat pengabaian terhadap kontribusi *non-additivity* oleh suku badan banyak sebesar 17,64 % untuk kompleks oktahedral $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$.

UCAPAN TERIMA KASIH

Disampaikan terimakasih kepada Sub Proyek QUE jurusan Kimia FMIPA UGM yang telah memberikan dana dalam melaksanakan penelitian ini (Kontrak Kerja nomor 003/QUE-CSP/K.02/09/00-PG tanggal 20 September 2000)

DAFTAR PUSTAKA

- Silva, F.J.R., Williams, R.J.P., 1991, *The Biological Chemistry of the Elements*, Claredon Press, Oxford.
- Kräutler, B., Keller, W., Kratky, C., 1989, *J. Am. Chem. Soc.*, 111, 8939.
- Ohtaki, H., Radnai, T., 1993, *Chem. Rev.*, 93, 1157.
- Tanabe Y, Rode, B.M., *J. Chem. Soc. Faraday 2*, 1988, 1779.
- Kheawsrikul, S., Hannongbua, S.V., Kokpol, S.U., Rode, B.M., 1989, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2*, 85, 643.
- Kheawsrikul, S., Hannongbua, S.V., Rode, B.M., 1990, *Z. Naturforsch.*, 46a, 111.
- Texler, N.R., Rode, B.M., 1995, 99, 15714-15717.
- Pranowo, H.D., Rode, B.M., 1999, *J. Phys. Chem. A*, 103, 4298.
- Pranowo, H.D., Setiaji, A.H.B., Rode, B.M., 1999, *J. Phys. Chem. A*, 103, 11115.
- Pramono, K.D., 2002, Penentuan Struktur Solvasi Ion Co^{2+} dalam Amoniak Cair dengan Metoda Simulasi Monte Carlo, *Skripsi*, FMIPA Jurusan Kimia, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
- Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Gill, P.M.W., Johnson, B.G., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Keith, T.A., Petersson, G.A., Montgomery, J.A., Raghavachari, K., Al-Laham, M.A., Zakrzewski, V.G., Ortiz, J.V., Foresman, J.B., Cioslowski, J., Stefanov, B.B., Nanayakkara, A., Challacombe, M., Peng, C.Y., Ayala, P.Y., Chen, W., Wong, M.W., Andres, J.L., Replogle, E.S., Gomperts, R., Martin, R.L., Fox, D.J., Binkley, J.S., Defrees, D.J., Baker, J., Stewart, J.J.P., Head-Gordon, M., Gonzalez, C., Pople, J. A., 1998, *GAUSSIAN 98*, Rev. (A.6), Gaussian, Inc., Pittsburgh.
- Lide, D.R., 2000, *Handbook of Chemistry and Physics*, 1st edition, CRC Press, New York.
- Foliatini, 2000, Studi Perbandingan Antara Metoda Hartree-Fock dan Metoda Korelasi Elektron Pada Interaksi Co(II)-Amoniak, *Skripsi*, FMIPA Jurusan Kimia, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
- Marini, G.W., Texler, N. R., Rode, B. M., 1996, *J. Phys. Chem.* 100 6808.
- Hannongbua, S., 1998, *Chem. Phys. Lett.*, 188, 663.
- Kerdcharoen, T., 1998, Hot-Spot Molecular Dynamics, *Ph.D Thesis*, University of Innsbruck, Austria.
- Tongraar, A., Hannongbua, S., Rode, B.M., 1997, *Chem. Phys.*, 219, 279.
- Hannongbua, S., Kerdcharoen, T., Rode, B.M., 1992, *J. Chem. Phys.*, 96, 6945.