

Simulasi Dinamika Molekuler Ligan Disekunderbutil ditiofosfat (DSBDTP) Untuk Ekstraksi Logam Tanah Jarang

RATNA SARI DEWI ^(1*), ANNI ANGGRAENI ⁽²⁾, HUSEIN . H. BAHTI ⁽³⁾, M. YUSUF⁽⁴⁾,
A. HARDIANTO ⁽⁵⁾, DAN ABDUL MUTHOLIB ⁽⁶⁾

¹Departemen Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Medan, Jalan Willem Iskandar Pasar V Medan Estate, Indonesia

^{2,3,4,5,6}Departemen Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Padjadjaran, Jalan Raya Bandung-Sumedang, km. 19, Jatinangor, Sumedang, Indonesia

Abstract

Received:
Revised:
Accepted:

Rare earth elements (LTJ) are important materials in various high-tech applications, so they have strategic significance due to their high cost. Separation and purification of rare earth metals are very difficult to do because rare earth metals have similar properties to one another. Including the selection of the best extractant through computational chemistry, one of which is the solvent extraction method using complexing ligands. Disecunderbutyl dithiophosphate (DSBDTP) ligand has many advantages when used as an extractant in extraction. Disecunderbutyl dithiophosphate (DSBDTP) ligands form complexes with some elements from the lanthanide group so that DSBDTP ligands can be chosen as extractants. The purpose of this study was to determine the separation by extraction of LTJ (Eu dan Tb) using the DSBDTP ligand to obtain predicted KD values through molecular dynamics simulations. The ligand design was initiated by modeling the DTBDTP ligand with LTJ (Eu dan Tb) and three water, then simulated with an explicit solvent for 100 ns. The simulation results show the LTJ complex (Eu dan Tb) with DSBDTP ligand and three waters. The simulation results show that the LTJ complex (Eu dan Tb) with the DSBDTP ligand is still unstable, as seen from the high value of fluctuations in the bond length between the LTJ central atom (Eu dan Tb) and the DSTBDTP ligand so that its distribution in the aqueous phase and organic phase cannot be observed because it does not formation of a stable complex.

Keywords: Dinamika molekuler , Disekunderbutil ditiofosfat , Logam Tanah Jarang

(*) Corresponding Author: rsd_kimia@yahoo.co.id, HP (081370786382)

How to Cite: Ratna, Sari Dewi, Dkk. (2022). Simulasi Dinamika Molekuler Ligan Disekunderbutil ditiofosfat (DSBDTP) Untuk Ekstraksi Logam Tanah Jarang. *SainsMath: Jurnal MIPA Sains Terapan*, XX (x): x-xx.

PENDAHULUAN

Logam tanah jarang, sesuai namanya, merupakan logam yang sangat langka atau keterdapatannya sangat sedikit . Keberadaan logam tanah jarang di alam biasanya berupa senyawa kompleks, umumnya senyawa kompleks fosfat dan karbonat. Logam tanah jarang mempunyai sifat reaktif tinggi terhadap air dan oksigen, bentuk senyawa stabil dalam kondisi oksida, titik leleh relatif tinggi, serta sebagai bahan penghantar panas yang tinggi sehingga untuk pemanfaatannya, logam tanah jarang harus dipisahkan terlebih dahulu dari senyawa kompleks tersebut. Pemisahan logam tanah jarang dapat menggunakan berbagai metode pemisahan, salah satunya dengan menggunakan ligan pengompleks dengan teknik ekstraksi pelarut dan pertukar anion [1].

Logam tanah jarang ditemukan bersamaan di alam, dalam berbagai macam mineral, seperti bastnasit, monasit, senotim dan lain-lain. Logam tanah jarang ini merupakan logam transisi dari Grup IIIB pada tabel periodik. Kelompok lantanida terdiri atas 15 unsur, yaitu mulai dari lantanum (nomor atom 57) hingga lutetium (nomor atom 71), serta termasuk tiga unsur tambahannya yaitu yttrium, thorium dan scandium. Penambahan yttrium, torium dan scandium ke dalam golongan unsur tanah jarang dengan pertimbangan kesamaan sifat. [2].

DBDTP merupakan salah satu homolog dari dialkilditiofosfat yang digunakan untuk ekstraksi dan kromatografi unsur tanah jarang. Dibutilditiofosfat (DBDTP) merupakan ekstraktan organofosfor

hasil sintesis yang digunakan sebagai pengompleks dalam pemisahan dan pemurnian ion-ion logam dengan metode ekstraksi. Asam dialkilditiofosfat biasa digunakan untuk ekstraksi pelarut dan pemisahan kromatografi dari logam transisi. Salah satu derivatif dari asam dialkilditiofosfat, seperti asam di-n-butil ditiofosfat (DBDTP), sebagai ekstraktn memiliki sifat yang lebih baik daripada homolog yang lebih pendek [3]. Ligan dibutilditiosfat yaitu suatu ligan terbaru yang belum banyak digunakan secara luas dan belum tersedia banyak di pasaran. Publikasi penelitian tentang ligan ini masih terbatas dan jarang sekali. Ligan ini tidak tersedia di pasaran, sehingga untuk memperolehnya dilakukan sintesis. Oleh karena itu DBDTP atau turunannya dengan rantai alkil yang lebih panjang memiliki banyak keuntungan ketika digunakan sebagai ekstraktn pada ekstraksi pelarut [3].

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan sebelumnya oleh Bahti (1990) dan Mulyasih (2002) menunjukkan bahwa ligan ini berpotensi untuk digunakan sebagai reagen pengompleks LTJ. Karena merupakan suatu ligan baru dan masih belum banyak diteliti, maka dalam penelitian ini dikaji tentang sintesis ligan DBBDTP dan mereaksikannya dengan LTJ yang dipilih serta mengkarakterisasi hasil ligan yang terbentuk dan juga kompleksnya. Data hasil penelitian menunjukkan bahwa DBDTP dapat digunakan untuk ekstraksi LTJ dengan efisiensi antara 80-100% tergantung jenis ion logam. DBDTP sudah dibuktikan merupakan ekstraktn yang memiliki sifat yang lebih baik dibanding homolog dengan rantai lebih pendek [4].

Oleh karena itu perlu dilakukan secara kajian teori kimia komputasi dinamika molekular. Untuk meminimalkan biaya dan waktu digunakan kajian secara kimia komputasi. Kajian yang dilakukan yaitu menguji kompleks ligan DSBBDTP dengan LTJ (Eu dan Tb) dengan menggunakan simulasi air sebagai pelarut secara eksplisit. Sehingga diperoleh ligan yang sesuai untuk pengekstraksian Eu dan Tb. Penelitian ini diharapkan dapat menjelaskan mekanisme selektivitas ligan DSBBDTP dalam pemisahan pada logam tanah jarang (Eu dan Dy) sehingga hasil *recovery* yang lebih baik untuk meningkatkan hasil efisiensi ekstraksi di laboratorium.

Molecular Dynamic (MD) atau Dinamika Molekuler merupakan sebuah teknik komputasi dalam melakukan simulasi pada rentang waktu tertentu untuk mengamati fungsi biologis dari suatu protein atau asam nukleat yang tidak mampu diamati secara eksperimen. Dalam simulasi MD, karakteristik waktu serta panjangnya simulasi menjadi hal penting yang harus dipertimbangkan [5].

Penerapan dinamika molekuler pada sistem pelarut/zat terlarut memungkinkan dilakukannya perhitungan sifat sistem seperti koefisien difusi atau fungsi distribusi radial untuk digunakan dalam perhitungan mekanika statistik. Pada umumnya skema perhitungan pelarut/zat terlarut dimulai dengan sistem yang terdiri atas sejumlah molekul dengan posisi dan kecepatan awal. Energi dari posisi yang baru dihitung relatif terhadap posisi sebelumnya untuk perubahan waktu yang kecil dan proses ini berinteraksi selama ribuan langkah sedemikian hingga sistem mencapai keseimbangan [6].

Simulasi dinamika molekuler memberikan informasi statik dan dinamik pada skala atomik, seperti posisi dan kecepatan, Informasi ini lalu dapat di olah menjadi informasi pada skala mikroskopis seperti tekanan, suhu dan lain-lain. Dinamika molekuler mengandung pengujian kelakuan kebergantungan waktu pada molekul, seperti gerakan vibrasional atau gerakan brownian. Hal ini sering dikerjakan dengan penjelasan mekanika klasik yang hampir sama dengan perhitungan mekanika molekuler [7].

Adapun tahapan yang diperhatikan sebelum melakukan simulasi adalah persiapan sistem meliputi molekul, ion, pelarut dan ligan. Pada tahap persiapan, dilakukan penyesuaian sedekat mungkin dengan keadaan eksperimen yang akan dilakukan. Salah satu nya adalah sifat-sifat fisiko kimia dari molekul yang akan disimulasikan, pemilihan pelarut serta model air yang akan diperhitungkan. Selanjutnya dilakukan minimisasi energi agar molekul menjadi stabil. Sistem dipanaskan pada suhu tertentu, penyetimbangan densitas, tekanan, volume, dan energi dan dilakukan produksi selama waktu yang diinginkan [8].

METODE

Material

Bahan-bahan yang digunakan untuk penelitian ini adalah desain ligan ligan DSBBDTP.

Instrumentasi

Alat-alat yang digunakan dalam penelitian ini terbagi dalam dua kelompok, yaitu perangkat keras (*hardware*) dan perangkat lunak (*software*). Perangkat keras terdiri atas seperangkat PC (*Personal Computer*) dengan spesifikasi sebagai berikut: Prosesor core i7 CPU 980 @3,33 GHz 980, , Memori RAM 8GB, *Hardisk* 2 TB, GPU NVIDIA *Ge Force* GTX 980 4GB dan Perangkat lunak

yang digunakan adalah *Biovia Discovery Studio Visualizer 2016*, *AMBER16*, *Amber Tools 16*, Sistem operasi Linux, *Visual Molecular Dynamics (VMD)*

Prosedur .

Preparasi Ligan DSBFTP

Struktur ligan DSBFTP dibuat dengan menggunakan software *BIOVIA Discovery Studio 2016* dan dilakukan optimisasi energi. Struktur ligan yang dibuat kemudian disimpan dalam format file *pdb*.

Preparasi Struktur Kompleks Eu dan Tb dengan Ligan DSBFTP

Struktur Ligan DSBFTP yang telah dibuat kemudian dihubungkan dengan masing-masing atom pusat Eu dan Dy menggunakan software *BIOVIA Discovery Studio 2016* dan dilakukan optimisasi energi. Kemudian disimpan dalam format file *pdb*.

Perhitungan Muatan Ligan dan Penambahan Pelarut

Struktur kompleks antara Ligan DSBFTP dengan LTJ yang telah dibuat sebelumnya dibuka pada perangkat lunak *AMBER16*. Kemudian dihitung dengan menggunakan pendekatan metode kimia komputasi semi-empirik *am1-bcc* dengan modul *antechamber*. Kemudian dibuat kompleks LTJ-Ligan DSBFTP berada dalam *BOX* air sebesar 10Å menggunakan modul *Leap* dalam paket program *Amber Tools 16*.

Simulasi Dinamika Molekular Struktur Kompleks Eu dan Dy Ligan DSBFTP

Dilakukan simulasi dinamika molekuler pada kompleks Eu dan Dy dengan Ligan DSBFTP yang telah dibuat, meliputi minimisasi, pemanasan, ekulibrisasi, dan produksi selama 100 ns dengan *timestep* 1fs menggunakan modul *pmemd* dalam paket program *Amber16*.

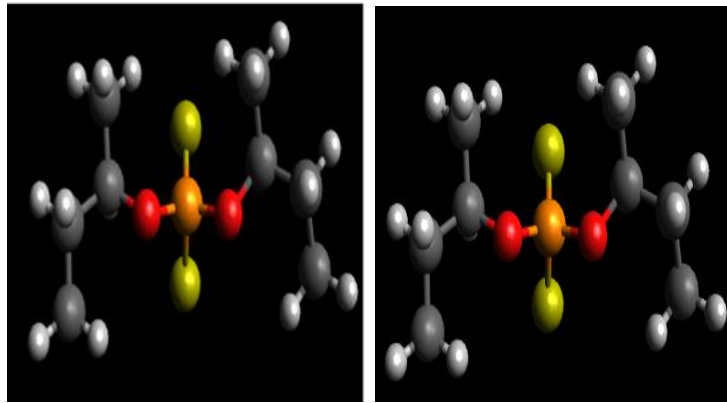
Visualisasi dan Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekuler

Ligan DSBFTP dengan kompleks Eu dan Tb kemudian dihitung kestabilannya dengan menggunakan metode *MM/GBSA* dalam program *AMBER16*. Kemudian dilakukan analisis hasil perhitungan kestabilan ligan DSBFTP dengan kompleks Gd, dan Sm meliputi analisis dinamika molekul dan visualisasi menggunakan software *VMD* dan *amber tools 16*. Hasil yang diperoleh kemudian dibandingkan bagaimana perilaku dinamika antar kompleks.

HASIL & PEMBAHASAN

Preparasi dan Optimasi Ligan DSBFTP

Struktur ligan DTBFTP dibuat dengan menggunakan software *BIOVIA Discovery Studio 2016* dan dilakukan optimisasi energi sampai didapatkan konformasi energi terendah. Struktur ligan yang dibuat kemudian disimpan dalam format file *pdb*. Hasilnya ditunjukkan pada Gambar 1. Warna kuning menunjukkan atom sulfur (S), warna oranye menunjukkan atom fosfor (P), warna merah menunjukkan atom oksigen (O), warna abu menunjukkan atom karbon (C), dan warna putih menunjukkan atom hidrogen (H).



(a)

(b)

Gambar 1 Gambar struktur tiga dimensi ligan DSBDTP (a) sebelum dioptimasi, (b) setelah dioptimasi

Pada Gambar 1 merupakan struktur ligan DSBDTP diharapkan dengan memodifikasi ligan DSBDTP terjadi perbedaan distribusi di fase air dan fase organik dengan nilai distribusi pada fase organik lebih tinggi dibandingkan fase air.

Preparasi Struktur Kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan Ligan DSBDTP dengan Tiga Air pada Sistem Pelarut Eksplisit

Dilakukan pemodelan struktur kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan sebelumnya telah dioptimasi dengan tiga air. Pemodelan kompleks dilakukan dengan menggunakan *software BIOVIA Discovery Studio 2016* yang kemudian disimpan dalam format *file* pdb.

Pada pemodelannya, digunakan tiga ligan DSBDTP dengan dua tangan atom O mengikat pada atom pusat sesuai dengan persamaan stoikiometri [8]:

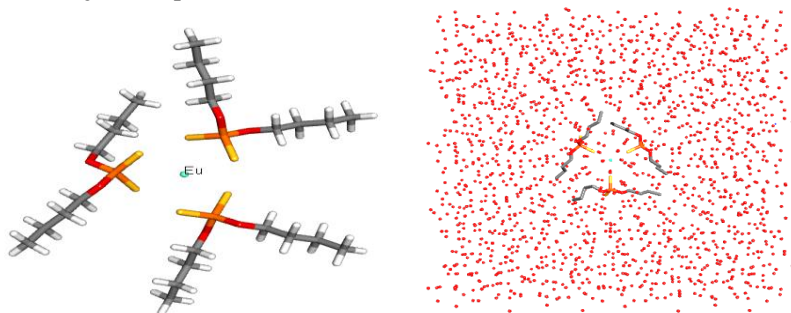


dimana, M = Sm dan Gd

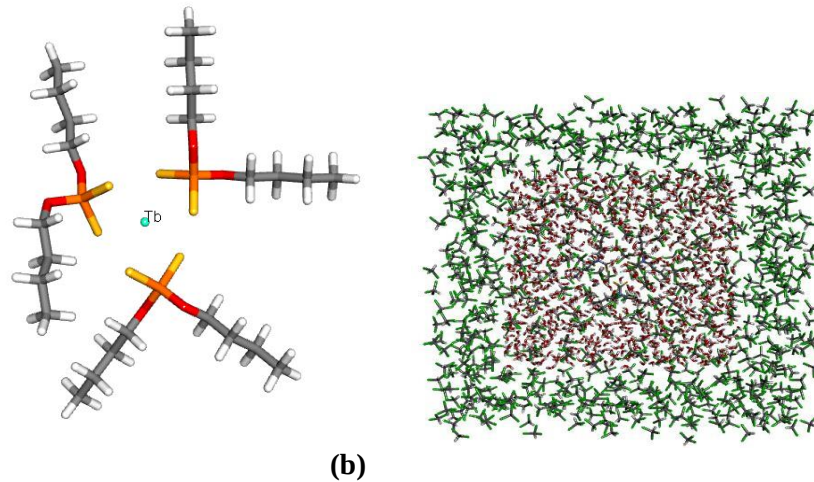
X = ligan DSBDTP

Namun pada tahun 2007 Ozge Ozbek, telah mengamati nomor variabel koordinasi dan geometri untuk ion lantanida dan aktinida tripasitif. Jumlah koordinasi yang diamati untuk ion lantanida(III) berkisar antara 6 hingga 12. Sembilan koordinasi umum untuk ion lantanida(III) termasuk LTJ (Eu dan Tb) sehingga diberikan penambahan tiga buah air pada struktur untuk melengkapi koordinasi umum tersebut, dan membuat jumlah koordinasinya sembilan [9].

Struktur logam-ligan dengan menggunakan tiga ligan ini digambarkan agar didapatkan suatu kompleks netral dimana kompleks ini diharapkan dapat tertarik ke dalam fase organik untuk keperluan ekstraksi logam. Pada penggambaran ini digunakan dua cara, karena ligan DSBDTP ini memiliki muatan -1 dan memiliki atom donor yang memungkinkan dapat berikatan satu ataupun dua sekaligus dengan sulfur.. Ini ditunjukkan pada Gambar 3.



(a)



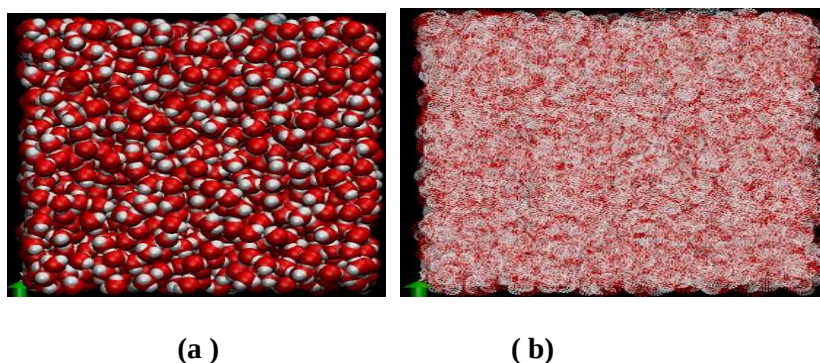
Gambar 3 Pemodelan struktur kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBFTP (a) dan Sistem pelarut eksplisit pada kompleks LTJ-DSBFTP (b)

Simulasi Dinamika Molekuler Kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan Ligan DSBFTP menggunakan Tiga Air pada Sistem Pelarut Eksplisit

Kelebihan simulasi dinamika molekuler adalah dapat ditambahkannya molekul pelarut air maupun pelarut organik secara eksplisit pada sistem. Simulasi dinamika molekuler pada sistem pelarut ini dikarenakan pada penelitian ini mungkin akan diaplikasikan pada ekstraksi di laboratorium, sehingga dengan dilakukannya simulasi ini, diharapkan kestabilan, pergerakan, dan distribusi kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBFTP.

Simulasi dinamika molekuler dilakukan pada kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBFTP yang telah dibuat. Tahap pertama adalah persiapan *input file* yang berupa model ligan dalam format pdb. Ligan ini kemudian diberi muatan-1 dengan metode semi-empirikAM1-BCC menggunakan modul *antechamber*. Tahap kedua adalah parameterisasi yang terdiri atas pembuatan koordinat dan topologi ligan. Tahapan ini dilakukan agar simulasi berlangsung pada posisi yang tetap. Seluruh sistem dilarutkan dalam model *box* air dengan ukuran sebesar 10 Å yang berfungsi sebagai pelarut eksplisit .Simulasi dinamika molekuler dilakukan dengan beberapa tahapan, yaitu persiapan *input file*, parameterisasi, minimisasi, pemanasan, ekuilibrisasi, produksi, dan analisis [10].

. Hasilnya ditunjukkan pada Gambar 4. Penggunaan sistem pelarut eksplisist ini digunakan karena pada kenyataannya suatu kompleks atau logam tanah jarang (Eu dan Tb) di alam pasti mengikat air sehingga keberadaan air pada sistem ini diperhitungkan.



Gambar 4. Simulasi dinamika molekuler pada sistem pelarut air (a) (kompleks Eu- DSBFTP dalam *BOX* air (b) kompleks Tb – DSBFTP dalam *BOX* air

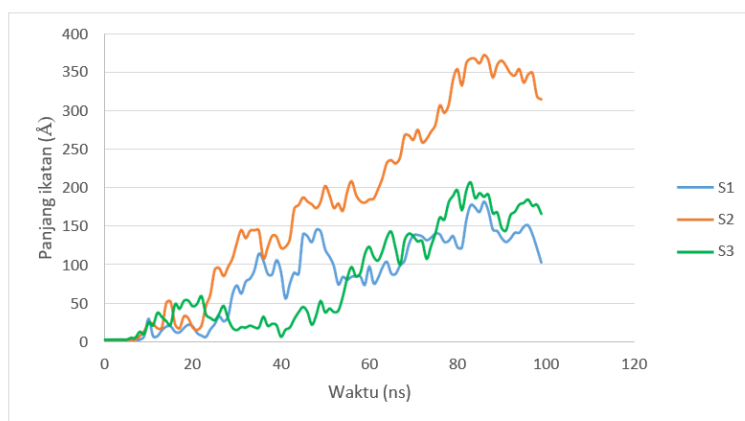
Selanjutnya kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBFTP disimulasikan dinamika molekuler yang meliputi minimisasi, pemansan, ekuilibrisasi, dan produksi menggunakan modul *pmemd* yang terdapat dalam paket program *AMBER16*.

Analisis dan Visualisasi Hasil Simulasi Dinamika Molekuler

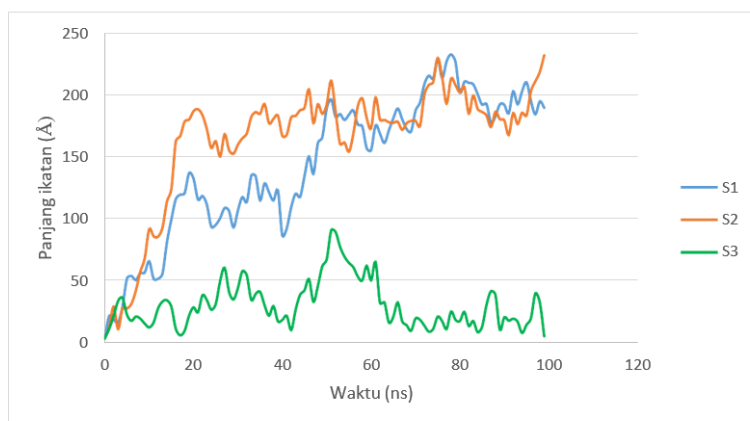
Dilakukan analisis hasil simulasi dinamika molekuler pada masing-masing struktur kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBDTP dengan tiga air pada sistem pelarut eksplisit dari trajektori dinamika molekuler dengan menggunakan *software* VMD. Hasil yang diperoleh kemudian dibandingkan dengan hasil analisis jarak atom pusat dengan atom donor P sudut atom pusat dengan atom O pada ligan DSBDTP, jarak antara atom pusat dengan tiga air dan energi kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBDTP menggunakan tiga air.

Analisis Jarak Atom S pada Ligan DSBDTP dengan Atom Pusat Eu dan Tb dengan tiga air

Dilakukan analisis jarak atom donor pada ligan DSBDTP dalam hal ini adalah S dengan atom pusat yaitu Eu dan Tb. Analisis ini dilakukan untuk mengetahui seberapa besar pergerakan ikatan kompleks antara atom pusat dengan ligan. Apabila pergerakan selama simulasi dinamika molekuler tidak menunjukkan fluktuasi yang signifikan, maka ikatan kompleks atau senyawa kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan DSBDTP ini merupakan kompleks yang stabil. Fluktuasi jarak atom pusat LTJ (Eu dan Tb) dengan tiga air yang mengikat pada atom pusat dirangkum dalam Gambar 5 sampai Gambar 6.



Gambar 5 Grafik jarak antara Eu dengan tiga air hasil simulasi selama 100 ns pada ligan DSBDTP



Gambar 6 Grafik jarak antara Tb dengan tiga air hasil simulasi selama 100 ns pada ligan DSBDTP

Gambar 4 sampai Gambar 5 menunjukkan perubahan jarak atom pusat LTJ (Eu dan Tb) dengan atom donor S pada ligan DSBDTP (Å) terhadap waktu (ns). S1 merujuk pada atom donor S ligan DSBDTP nomor 1. S2 merujuk pada atom donor S ligan DSBDTP nomor 2, dan S3 merujuk pada atom donor S ligan DSBDTP nomor 3. Berdasarkan grafik tersebut, maka seluruh kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBDTP tidak membentuk kompleks yang stabil. Hal itu dapat dilihat dari tingginya fluktuasi jarak atom pusat LTJ (Eu dan Tb) dengan atom donor S pada ligan DSBDTP. Jadi dapat disimpulkan bahwa pada waktu kurang dari 10 ns saja, semua ligan sudah lepas dari kompleks yang ditunjukkan dengan bertambahnya jarak atom pusat LTJ (Eu dan Tb) dengan atom donor S pada ligan DSBDTP secara signifikan. Sehingga dengan hasil tersebut,

kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBDTP tidak dapat membentuk suatu kompleks yang stabil dan telah mengalami dekomposisi terhadap lamanya waktu simulasi dinamika molekuler.

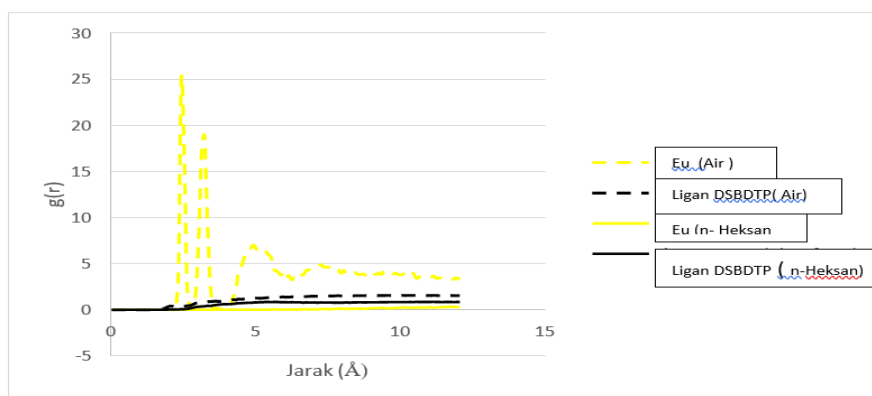
Analisis RDF Kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan Ligan DSBDTP pada Sistem Dua Pelarut

Analisis RDF digunakan untuk mengamati distribusi senyawa kompleks yaitu LTJ (Eu dan Tb) dengan DSBDTP. RDF atau distribusi radial adalah suatu fungsi yang dilambangkan dengan $g(r)$, didefinisikan sebagai:

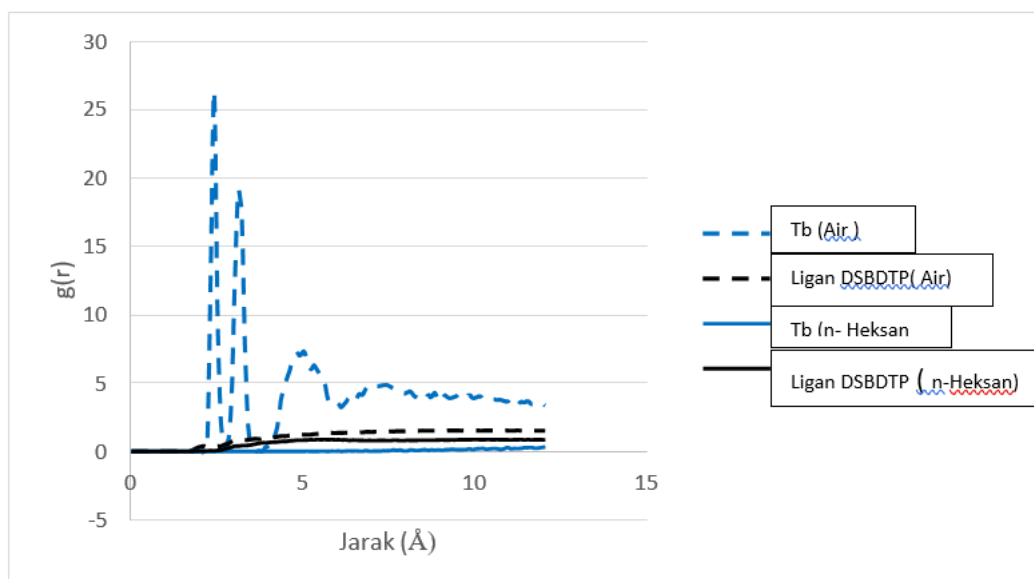
$$g(r) = \rho(r) / \rho$$

yang mana $\rho(r)$ merupakan suatu densitas molekul dan ρ merupakan densitas total. Fungsi $g(r)$ ini merupakan probabilitas untuk menemukan jarak kontak molekul (r) dengan suatu pelarut. Fungsi RDF ini akan sangat bergantung berdasarkan kerapatannya (ρ). Apabila kontak molekul memiliki kerapatan yang tinggi, maka nilai fungsi distribusi $g(r)$ akan tinggi. Analisis RDF ini dipilih karena lebih universal untuk mencari tahu bagaimana merepresentasikan suatu molekul dengan pelarut yang lebih dari satu sistem pelarut [11]

Karena pada kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBDT tidak membentuk kompleks yang stabil, maka pada analisis RDF ini yang dibandingkan hanya distribusi atom pusat LTJ (Eu dan Tb) dengan ligan DSBDTP pada pelarut air dan n-heksan. Hasilnya ditunjukkan pada gambar 7 dan gambar 8.



Gambar 7 Grafik perbandingan RDF pada Eu dengan ligan DSBDTP



Gambar 8 Grafik perbandingan RDF pada Tb dengan ligan DSBDTP

Dibuat grafik RDF untuk membandingkan distribusi kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan DSBDTP pada Gambar 7. Dan 8. Dari hasil analisis RDF ini menunjukkan bahwa kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan DSBDTP lebih banyak terdistribusi ke dalam air dibanding dengan pelarut organik. Ini menunjukkan bahwa pada simulasi dinamika molekuler ini tidak dapat digunakan untuk pemisahan kompleks logam secara eksplisit untuk kompleks LTJ (Eu dan Tb) dengan DBDTP. Perbedaan distribusi pada ligan DSBDTP tidak terlalu jauh, perbedaannya hanya sekitar 0,7. Hal ini dikarenakan ligan DSBDTP bersifat larut sempurna dalam air, tetapi sedikit larut dalam pelarut organik.

KESIMPULAN

Dari hasil simulasi dinamika molekuler, dapat disimpulkan bahwa:

1. Diprediksi kompleks LTJ (Eu dan Dy) dengan ligan DSBDTP merupakan kompleks yang tidak stabil pada simulasi dinamika molekuler selama 100 ns dengan adanya kompleks LTJ (Eu dan Dy) dengan ligan DSBDTP yang terdekomposisi.
2. Diprediksi kompleks LTJ (Eu dan Dy) dengan ligan DSBDTP tidak dapat diamati distribusinya pada fase air dan fase organik karena tidak terbentuknya kompleks yang stabil, sehingga nilai KD prediksi untuk kompleks (Eu dan Dy) dengan ligan DSBDTP tidak dapat ditentukan.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih pada Laboratorium Kimia Analitik dan Pemisahan Departemen Kimia Fakultas MIPA Universitas Padjadjaran, Laboratorium Sentral Universitas Padjadjaran khususnya kepada rekan-rekan di kelompok Logam tanah jarang Universitas Padjadjaran, Laboratorium Kimia Komputasi Universitas Padjadjaran atas bantuannya serta LPDP (Lembaga Pengelola Dana Pendidikan) atas beasiswa pendidikannya sehingga penelitian ini selesai.

REFERENSI

- [1] U. Pratomo, A. Anggraeni, A. Muthalib dan U. M. S. Soedjanaatmadja, "Synthesis, Characterization, and Molecular Modelling Bis (Aquo) Tris (Dibutyldithiophosphato) Gadolinium (III)," *Procedia Chemistry*, pp. 207-215, 2015.
- [2] H. H. Bahti, "Chromatography studies of metal dialkyldithiophosphate," University of New South Wales, Australia, 1990.
- [3] Suprpto, S. J. 2009. "Tinjauan Tentang Unsur Tanah Jarang". *Buletin Sumber Daya Geologi*. 4 (1).
- [4] M. L. Teodoro, G. N. Phillips Jr dan L. E. Kavraki, "Molecular Docking : A Problem With Thou," 1990.

- [5] C. Mura dan C. E. McAnany, "*An Introduction to Biomolecular Simulations and Docking*," 2014.
- [6] H. D. Pranowo, "*Metode Kimia Komputasi*," Kasmui, Malang, 2013.
- [7] Abreu, R. D. & C. A. Morais. 2010. "Purification of Rare Earth Elements from Monazite Sulphuric Acid Leach Liquor and The Production of High- Purity Ceric Oxide". *Minerals Engineering*. 23, 536-540.
- [8] O. Ozbek, "C3- Symmetric Nonadentate Ligand System Bearing Both Pyridine and Diamine Moieties for the Extraction of Lanthanides and Actinides and DFT Level Computational Studies for the Molecular Orbitals and Electronic Transitions of Expanded Porphyrin System Bearer," University of Florida, Amrica, 2007.
- [9] H. D. Holtje, S. W, R. D dan F. G, "Molecular Modelling," ISSN: 978-3-527-31568-0, *Federal Republic of Germany*, 2008.