

DAFTAR PUSTAKA

- Ananto, A. D., Muliastari, H., & Handisaputra, S. (2020). Desain Senyawa Turunan Meisoindigo Baru Sebagai Anti Kanker Payudara. *Jurnal UGM : Majalah Farmaseutik*, 16(1), 9-15.
- Apriyani, N. (2017). Penurunan Kadar Surfaktan dan Sulfat dalam Limbah Laundry. *Media Ilmiah Teknik Lingkungan*, 2(1), 37-44.
- Armunanto, R., & Sudiono, S. (2004). Relation Of Electronic Structures With Their Antimalaria Activities On Artemisinin Derivatives. *Indonesian Journal of Chemistry*, 4(3), 212-217.
- Asmara, A. P., Mudasir, & Siswanta Dwi. (2015). Penentuan Metode Komputasi untuk Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Senyawa Turunan Triazolopiperazin Amida. *Journal of Islamic Science and Technology*, 1(1), 19-30.
- Baczko, K., Larpent, C., & Lesot, P. (2004). New Amino Acid-based Anionic Surfactants and Their Use as Enantiodiscriminating Lyotropic Liquid Crystalline NMR Solvents. *Tetrahedron: Asymmetry*, 15(6), 971-982.
- Bagotzky, V. S., Vassiliev, Y. B., & Khazova, O. (1977). Generalized Scheme of Chemisorption, electrooxidation and electroreduction of simple organic compounds on platinum group metals. *Journal of Electroanalytical Chemistry* 81(2), 229-238.
- Blöchl, P. (1994). Projector Augmented-wave Method. *American Physical Society Phys Rev B* 50, 17953.
- Cahyanto, W. T. (2014). Adsorption Mechanism of Carbon Monoxide on PtRu and PtRuMo Surfaces in the Density Functional Theory Perspective . *Advanced Materials Research Vol. 896* , 537-540.
- Cahyanto, W. T., Escano, M. C., Kasai, H., & Arevalo, R. L. (2011). Pt(111)-Alloy Surfaces for Non-Activated OOH Dissociation. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology Vol.9*, 352-356.
- Chitra, R., Das, A., Choudhury, R. R., Ramanadham, M., & Chidambaram, R. (2004). Hydrogen bonding in oxalic acid and its complexes: A database study of neutron structures. *Journal of Physics*, 263–269.
- Chivian, D., Robertson, T., Bonneau, R., & Baker, D. (2003). *Ab initio Methods*. Semantic Scholar.
- Chtita, S., Bouachrine, M., & Lakhlifi, T. (2016). Basic Approaches And Applications Of QSAR/QSPR Methods. *University Maoulay Ismail*, 1(1).
- Danishuddin, & Khan, A. U. (2016). Descriptors and Their Selection Methods In QSAR Analysis: Paradigm For Drug Design. *Drug Discovery Today*, 21(8), 1291-1302.

- Delsy, E. Y., Iswanto, P., & Winaryo, S. (2017). Delsy, E.V.Y., Iswanto, P. da Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Nilai Konsentrasi Misel Kritik Surfaktan Anionik dengan Metode Semiempiris AM1. *Jurnal Molekul*, 12(1), 53-60.
- Dwiyati, G. (2014). *Konsep Dasar Sifat Molekul* (1 ed.). Modul.
- Firdaus. (2012). *Kimia Organik Sintesis I*. Makassar : Universitas Hasannudin.
- Hamdi, M. R. (2018). *Simulasi Kuantum Untuk Sistem Koadsorpasi H dan OH Pada Permukaan Pt(111) Dengan Metode Density Functional Theory*. Purwokerto: Universitas Jenderal Soedirman.
- Harjono. (2006). *Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antikanker Senyawa Turunan Kalanon dengan Pendekatan PCR (Principal Component Regression)*. Skripsi, Universitas Jenderal Soedirman, FMIPA, Purwokerto.
- Hendra, Barlian, E., Razak, A., & Sanjaya, H. (2015). Foto-Degradasi Senyawa Surfaktan Menggunakan Sinar UV Dengan Penambahan Katalis TiO₂ pada Sampah Laundry. *Saintek : Jurnal Sains dan Teknologi*, 7(1), 66.
- Henkelman, G., & Jonsson, H. (2000). Improved Tangent Estimated in The Nudged Elastic Band Method for Finding Minimum Energy Paths and Saddle Points. *Journal of Chemical Physic Vol.113 No. 22*, 9978.
- Hibbs, J. (2006). *Anionic Surfactants?*, in Farn, R.J., *Chemistry and Technology of Surfactants*. UK: Blacwell Publishing : Oxford.
- Hidayati, A. (2018). *Simulasi Reaksi Pembentukan COOH pada Permukaan PtRu(111) menggunakan Density Functional Theory*. Purwokerto: Universitas Jenderal Soedirman.
- Hinchliffe, A. (2008). *Molecular Modeling for Beginners* (2nd ed.). Chichester: John Wiley and Sons Ltd.
- Hogarth, M. F., & Hards, G. A. (1996). Direct Methanol Fuel Cells, Technological Advances and Further Requirements. *Platinum Metals Rev.*(40)4, 150-159.
- Hou, Z., Yi, B., Yu, H., Lin, Z., & Zhang, H. (2003). CO tolerance electrocatalyst of PtRu-HxMeO₃/C (Me= W, Mo) made by composite support method . *Journal of Power Sources* 123, 116–125.
- Huibers, P. (1999). *Quantum-Chemical Calculation of the Charge Distribution in Ionic Surfactants*. Langmuir.
- Ibach, H. (2006). *Physics of Surfaces and Interfaces*. Germany: Springer.
- Indonesia, K. P. (2017). Sinar Mas Gandeng CEPSA Resmikan Pabrik Oleo Pertama di Indonesia. pp. <http://agro.kemenerin.go.id/4939-Sinar-Mas-Gandeng-CEPSA-Resmikan-Pabrik-Oleo-Pertama-di-Indonesia>. Retrieved Agustus 25, 2020
- Ismi, E. (2019). *Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Sifat Surfaktan Anionik Golongan Sulfat Berdasarkan Data Konsentrasi Misel Kritik dengan Metode Ab Initio*. Skripsi.

- Jensen, F. (1999). *Introduction to Computational Chemistry*. England: Wiley Chichester.
- Karelson, M., Lebanov, V. S., & Katritzky, A. R. (1996, Mei 9). Quantum-Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies. *National Library of Medicine*, 96(3), 1027-1044.
- Kesuma, D., Siswandono, Purwanto, B. T., & Hardjono, S. (2018). Uji In Silico Aktivitas Sitotoksik dan Toksisitas Senyawa Turunan N-(Benzoil)-N'-feniltiourea Sebagai Calon Obat Antikanker. *Journal of Pharmaceutical Science and Clinical Research*, 3(1), 1-11.
- Kilo, J. L., & Kilo, A. L. (2019). Kajian HKSA Antimalaria Senyawa Turunan Quinolon-4 (1H)-imines Menggunakan Metode MLR-ANN. *Jambura Journal of Chemistry*, 01(1), 21-26.
- Koistinen, O.-P., Dagbjartsdottir, F. B., Asgeirsson, V. I., Vehtari, A., & Jonsson, H. (2017). Nudged elastic band calculations accelerated with Gaussian process regression. *Physics Chem*.
- Kudryavstev, A. V., Perminova, I. V., & Petrosyan, V. S. (2000). Size-Exclusion Chromatographic Descriptors of Humic Substances. *Analytica Chimica Acta*, 407(1-2), 193-202.
- Kumar, A., Gupta, M. K., & Kumar, M. (2011). An Efficient Non-Ionic Surfactant Catalyzed Multicomponent Synthesis of Novel Benzylamino Coumarin Derivative Via Mannich Type Reaction in Aqueous Media. *Elsevier*, 42(50), 4521-4525.
- Leach, A. L. (1996). *Molecular Modeling : Principles and Applications*. London: Addison Longman.
- Lee, J. G. (2012). *Computational Materials Science An Introduction Second Edition*. New York: CRC Press.
- Lew, W., Crowe, M. C., Kar, E., Lytken, O., Farmer, J. A., Arnadottir, L., . . . Campbell, C. T. (2011). The Energy of Adsorbed Hydroxyl on Pt(111) by Microcalorimetry. *Journal of Physical Chemistry*, 11586-11594.
- Lindman, B., & Stilbs, P. (1984). *Surfactants in Solution*. 3. New York: Plenum Press.
- Listiowati, E. T. (2018). Simulasi Kuantum untuk Sistem Koadsorpasi H dan OH pada Permukaan PtRuMo(111) dengan Metode Density Functional Theory. In *Skripsi*. Purwokerto: Universitas Jenderal Soedirman.
- Long, N. V., Thi, C., Nogami, M., & M.Ohtaki. (2012). Pt and Pd based Catalyst with Novel Alloy and Core-Shell Nanostructure for Practical Applications in Next Fuel Cells: Patents and Highlights. *Recent Patents on Materials Science* 5, 175.
- Luan, F., Xu, X., Liu, H., & Cordeiro, M. D. (2013). Prediction of the Baseline Toxicity of Nonpolar Narcotic Chemical Mixtures by QSAR Approach. *Chemosphere*, 90(6), 1980-1986.

- Mahvi, A. H. (2004). Removal of Anionic Surfactants in Detergent Wastewater by Chemical Coagulation. *Pakistan Journal Biological Science*, 7(12), 2222-2226.
- Male, Y. T., Sutapa, W., & Pusung, Y. A. (2018). Prediksi Potensi Antikanker Senyawa Turunan Xanthon Menggunakan Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA). *Chemistry Progress*, 11(1), 1-6.
- Male, Y. T., Sutapa, W., & Ranglalin, O. M. (2015). Studi Komputasi Zat Warna (Dyes) Alami sebagai Material Aktif pada Sel Surya Organik Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (Density Functional Theory, DFT). *Ind. J. Chem*, 2, 205-212.
- McCash, E. M. (2001). *Surface Chemistry*. Oxford: Oxford Univeristy Press.
- Michaelides, A., & Hu, P. (2001). A density functional theory study of hydroxyl and the intermediate in the water formation reaction on Pt . *J. Chem. Phys*, 513.
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). On Special Points For Brillouin Zone Integrations. *Physical Rev B*, 5188.
- Motoc, I., & Marshall, G. R. (1985). Konstanta Fragmental Volume Van der Waals. *Chemical Physics Letters*, 116(5), 415-419.
- Mustikasari, K., Santoso, U. T., Ariyani, D., & Melissa. (2019). Peningkatan Akurasi Model Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Antibakteri Senyawa Turunan Asam Monokloroasetat Menggunakan Metode Semiempirik RM1 dan Pemilihan Deskriptor. *Sains dan Terapan Kimia*, 13(1), 1-8.
- Myers, D. (1987). *Surfactant Science and Technology* (3 ed.). United States: Wiley Interscience A John Wiley & Sons Inc.
- Nisa, F. K. (2013). *Uji Aktivitas Senyawa Khrisin Sebagai Antioksidan dengan Modifikasi Gugus Pada Cincin Aktifnya Menggunakan Metode RM1 dan Ab initio*. Semarang: Skripsi.
- Nuriana, Y., Susanti, D., Purwaningsih, H., & Atmono, T. M. (2017). Analisis Pengaruh Waktu Sputtering Pd dan Ni pada Sintesis Material Elektrokatalis Berbahan Pd-Ni/Graphene terhadap Unjuk Kerja Direct Methanol Fuel Cell (DMFC). *Jurnal Teknik ITS Vol.6 No.1*, 1.
- Nurwidayanti, S. (2012). *Studi Interaksi Tetrahidrofuran pada Permukaan Katalis Co/Zeorlit dengan Metode Ab initio*. Skripsi, Universitas Sebelas Maret, FMIPA, Surakarta.
- Othman, M. H., Ismail, A. F., & Mustafa, A. (2010). Recent Development of Polymer Electrolyte Membranes for Direct Methanol Fuel Cell Application – A Review . *Malaysian Polymer Journal Vol.5 No.2*, 1-36.
- Panji, T. (2014, November 23). Mengapa Sabun dapat Membersihkan Minyak. <https://www.edubio.info/2014/04/mengapa-sabun-dapat-membersihkan-minyak.html?m=0>. Retrieved Agustus 30, 2020, from <http://www.edubio.info/2014/04/mengapa-sabun-dapat-membersihkan-minyak.html>

- Pedersen, H. A., & S, H. J. (2011). Efficient Sampling of Saddle Points With the Minimum-Mode Following Method. *Society for Industrial and Applied Mathematics Journal Science Vol. 33 No.2*, 633-652.
- Pranowo, H. D. (2011). *Kimia Komputasi : Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria*. Jurusan FMIPA UGM.
- Prianto, B. (2010). Pemodelan Kimia Komputasi. p. Jurnal LAPAN. Retrieved Agustus 26, 2020
- PubChem. (2020). Sodium Hexadecyl Sulfate. Perpustakaan Kedokteran Nasional : Pusat Nasional untuk Informasi Bioteknologi.
- Purwanto, W. W., & Budiman, B. (2005). Uji Kinerja Elektrokatalis-Anoda (PtRuMo/C) Untuk Direct Methanol Fuel Cell (DMFC) . *Simposium & Kongres Teknologi Katalis Indonesia*. Serpong.
- Putra, B. S. (2010). *Telaah Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Senyawa Turunan 1,10-Fenantrolin sebagai Antimalaria Menggunakan Parameter Molekular Berdasarkan Perhitungan Kimia Komputasi*. Skripsi, UIN Alauddin Makassar, Fakultas Ilmu Kesehatan, Makassar.
- Rakhman, K. A., Limatahu, N. A., & Karim, H. B. (2019). Kajian Senyawa Turunan Benzopirazin sebagai Antimalaria Menggunakan Metode HKSA dan MLR. *Jurnal Kimia dan Pendidikan*, 4(2), 112-126.
- Rapp, B. E. (2017). Surface Tension. In *Microfluids: Modelling, Mechannics and Mathematics* (pp. 421-444). Elsevier.
- Research, C. (2015). Market Study Of Surfactants (2nd Edition). *Wayback Machine*.
- Rifai, A. A., Kasmui, K., & Hadisaputro, S. (2014). Kajian HKSA Senyawa Turunan Deoksibenzoin terhadap Aktivitas Antioksidan menggunakan Analisis Regresi Multilinear. *Journal of Chemical Science*, 3(3), 212-216.
- Robinson, V. C., Bergfeld, W. F., & Belsito, D. V. (2019). Final Report of the Amended Safety Assessment of Sodium Laureth Sulfate and Related Salts of Sulfated Ethoxylated Alcohols. *SAGE Journals*, 29(3), 151-161.
- Rollando, S. (2017). *Pengantar Kimia Medisinal*. Malang.: CV Seribu Bintang.
- Roy, K., Kar, S., & Das, R. N. (2015). *A Primer on QSAR/QSPR Modeling: Fundamental Concepts*. India: Springer International Publishing.
- Saepulloh, A. (2018). *Simulasi Komputasi Kodsorpsi H dan OH pada Permukaan PtMo (111) dengan Metode Density Functional Theory*. Purwokerto: Universitas Jenderal Soedirman.
- Samardzic, M., Galovic, O., Petrusic, S., & Sak-Bosnar, M. (2014). The Analysis of Anionic Surfactants in Effluents Using a DDATPB Potentiometric Sensor. *International Journal Electrochem*, 9(11), 6166-6181.

- Schegel, B. H. (2011). Modern Electronic Structure Theory. In *Physical Chemistry* (pp. 459-500). Michigan: Wayne State University.
- Serway, R. A., Moses, C. J., & Moyer, C. A. (2005). *Modern Physics Third Edition*. Belmont: Thomson Brooks/Cole.
- Shah, S. K., Bhattarai, A., & Chatterjee, S. (2011). Surfactants: Its applications and effects on environment. *Bibechana*, 7, 61-64.
- Sipl, W., & Robaa, D. (2018). *QSAR/QSPR : Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities* (First ed.). Institute of Pharmacy : Departement of Pharmaceutical Chemistry.
- Siswandono, & Soekardjo, B. (2000). *Kimia Medisinal* (2 ed.). Surabaya: Airlangga University Press.
- Siswodihardjo, S., Hardjono, S., Pramono, P., & Darmanto, W. (2016). Siswandono, Hardjono, S., PuQuantitative Structure-Cytotoxic Activity Relationship 1-(Benzoyloxy)urea And Its Derivative. *Current Drug Discovery Technollogy*, 13(2), 101-108.
- Somorjai, G. A. (1994). *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis*. New York: John Wiley & Sons.
- Sudarlin. (2016). *Eksplorasi Energi*. Yogyakarta: Omah Ilmu.
- Sulistiyani, E. T. (2012). Teori Fungsional Densitas dan Penerapannya pada Struktur Atom . *Prosiding Pertemuan Ilmiah XXVI HFI Jateng dan DIY*. Purworejo.
- Sun, J., Du, K., Fu, L., Gao, J., Zhang, H., Feng, W., & Ji, P. (2014). Sodium Hexadecyl Sulfate sebagai Zat Antarmuka yang Mengatur Adsorpsi Protein pada Karbon Nanotube. *Perpustakaan Kedokteran Nasional*, 6(17).
- Supriningsih, D. (2010). *Pembuatan Metil Ester Sulfonat (MES) sebagai Surfaktan untuk EOR*. Jakarta : Universitas Indonesia: Tesis.
- Supriningsih, D. (2010). *Pembuatan Metil Ester Sulfonat (MES) sebagai Surfaktan untuk EOR*. Jakarta : Universitas Indonesia: Tesis.
- Wikipedia. (2018). *Saddle Point*. Retrieved from https://en.wikipedia.org/wiki/Saddle_point
- William D. Callister, J. (2007). *Materials Science and Engineering An Introduction Seventh Edition*. New York: John Wiley & Sons.
- Yeh, K.-y. (2012). Atomistic Modeling of The Cathode/Electrolyte Interface in Proton Exchange Membrane Fuel Cells. In *Disertasi*. USA: The Pennsylvania State University.
- Yu, L., Zheng, L., Zheng, S., Wu, J., Li, X., & Li, N. (2008). Aggregation Behavior of a Fluorinated Surfactant in 1-Butyl-3-Methylimidazolium Ionic Liquids. *ACS Publications*, 112, 39.

- Yuan, C. L., Xu, Z. Z., Fan, M., Liu, H., Xie, Y., & Zhu, T. (2014). Study on Characteristics and Harm of Surfactants. *Yuan. C. L., Xu Z. Z., Fan. M. X., Liu. H. Y., Xie. Y. H dan Zhu. T., Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, 6(7), 2233-2237.
- Zhang, J., Kleinoder, T., & Gasteiger, J. (2006). Prediction of pKa Values for Aliphatic Carboxylic Acids and Alcohols with Empirical Atomic Charge Descriptors. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 46(6), 2256-2266.

