

DAFTAR PUSTAKA

- A. Kadir, L. (2020). Struktur dan Vibrasi Carbamida: Eksperimen dan Kajian Teoritik Density functional theory (DFT). *Saintifik*, 6(2), 116–120. <https://doi.org/10.31605/saintifik.v6i2.266>
- Abdul Rahman, I., & Purqon, A. (2015). Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS 2. *Prosiding Skf 2015*, 497–503.
- Anderson, A. M. (2008). *Development of an Aquatic Pesticide Toxicity Index for Use in Alberta*. Alberta Environment.
- Alauhdin, M., Tirza Eden, W., & Alighiri, D. (2021). Aplikasi Spektroskopi Inframerah untuk Analisis Tanaman dan Obat Herbal. *Inovasi Sains Dan Kesehatan*, 84–118. <https://doi.org/10.15294/.v0i0.15>
- Alfianto, E. (2015). Implementasi Metode Teori Fungsional Kerapatan Pada Bahasa C Untuk Menghitung Energi Keadaan Dasar Berbagai Atom. *Elektronik Jurnal Arus Elektro Indonesia (EJAEI)*, 1(3), 1–6.
- Ananda Ismail, I., Riga, R., Suryani, O., Insani, M., Lian Pernadi, N., & Febriyanti, A. (2022). Analisis Spektrum 1 H-NMR: Penjelasan Sederhana. *International Journal of Academic Multidisciplinary Research*, 6(12), 336–342. www.ijeais.org/ijamr
- Ananto, A. D., Muliasari, H., & Saputra, A. (2024). Pelatihan Kimia Komputasi untuk Guru dan Mahasiswa di SMKN 3 Mataram. *WIDYABHAKTI Jurnal Ilmiah Populer*, 2(2), 112–116. <https://doi.org/10.30864/widyabhakti.v2i2.170>
- Asia, N., Junaidi, E., & Hadisaputra, S. (2019). *UJI INHIBISI KOROSI BESI OLEH TURUNAN SENYAWA AZA-18- MAHKOTA-6*.
- Bálint, D., & Jäntschi, L. (2021). Comparison of molecular geometry optimization methods based on molecular descriptors. *Mathematics*, 9(22), 1–12. <https://doi.org/10.3390/math9222855>
- Baughman, G. R. (1965). *The Crystal and Molecular Structure Of Orghanophosphorus Insecticides*. October 1977.
- Bose, S., Kumar, P. S., & Vo, D. V. N. (2021). A review on the microbial degradation of chlorpyrifos and its metabolite TCP. *Chemosphere*, 283(April), 131447. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.131447>
- Budiono, B., Sari, R. N., & Metasari, S. (2018). Optimum Form of Hydrogen Bond

- in Water-Alcohol Systems : A Study Through Molecular Dynamic Modelling. *Sainmatika: Jurnal Ilmiah Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam*, 15(1), 8. <https://doi.org/10.31851/sainmatika.v15i1.1738>
- Bursch, M., Mewes, J. M., Hansen, A., & Grimme, S. (2022). Best-Practice DFT Protocols for Basic Molecular Computational Chemistry**. *Angewandte Chemie - International Edition*, 61(42). <https://doi.org/10.1002/anie.202205735>
- Candra. (2008). *Desain Senyawa Obat Flu Burung Secara Komputasi Menggunakan Hyperchem*. Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Bengkulu.
- Chang, R. (2005). *Kimia Dasar Konsep-Konsep Inti*. Penerbit Erlangga.
- Chittratan, P., Phromyothin, D., & Monvisade, P. (2020). DFT-based computational investigation on functional monomer and solvent selection of molecularly imprinted polymers for recognition of chlorpyrifos organophosphate insecticide. *Suranaree Journal of Science and Technology*, 27(1), 1–6.
- Dachriyanus. (2004). *Analisis Struktur Senyawa Organik Secara Spektroskop*.
- Dayrit, F. M., & Dios, A. C. de. (2017). ¹H and ¹³C NMR for the Profiling of Natural Product Extracts: Theory and Applications. *Spectroscopic Analyses - Developments and Applications*. <https://doi.org/10.5772/intechopen.71040>
- De Biasi, F., Hope, M. A., Avalos, C. E., Karthikeyan, G., Casano, G., Mishra, A., Badoni, S., Stevanato, G., Kubicki, D. J., Milani, J., Ansermet, J. P., Rossini, A. J., Lelli, M., Ouari, O., & Emsley, L. (2023). Optically Enhanced Solid-State ¹H NMR Spectroscopy. *Journal of the American Chemical Society*, 145(27), 14874–14883. <https://doi.org/10.1021/jacs.3c03937>
- Delsy, E. V. Y., Iswanto, P., & Winaryo, S. (2017). Quantitative Analysis of Relationship Structure and Anionic Surfactant Micelle Concentration Critic With Semiempiris AM1. *Molekul*, 12(1), 53. <https://doi.org/10.20884/1.jm.2017.12.1.245>
- Dybdal, I. (2023). *Ingrid Dybdal Bachelor ' s thesis Hartree-Fock and Density Functional Theory methods for Molecular Geometry Optimization*. April.
- Fedasa Tegegn, D. (2022). Citation: Tegegn DF (2022) Application of Computational Chemistry in Drug Design and Organic Photovoltaics Material Design. *J Phys Chem Biophys*, 12(1), 330. <https://doi.org/10.35248/2161-0398.22.12.330>.Citation
- Gunawan, R., Allo, V. L., Fisik, L. K., Kimia, J., & Mulawarman, U. (2024). *A Mini Review : Studi Komputasi Terhadap Struktur Elektrolit Pada Silicene*,

Graphene , Dan Germanene A Mini Review : Computational Study Of Electrolyte Structures Of Silicene , Graphene , And Germanene. 73–77.

- Gunawan, R., & Nandiyanto, A. B. D. (2021). How to read and interpret 1h-nmr and 13c-nmr spectrums. *Indonesian Journal of Science and Technology*, 6(2), 267–298. <https://doi.org/10.17509/ijost.v6i2.34189>
- Hadisaputra, S., Savalas, L. R. T., & Hamdiani, S. (2017). *Praktikum Kimia Berbasis Komputasi Untuk Sekolah Menengah Atas Chemical Practicum-Based Computational Chemistry For High School*. 12(1), 11–14.
- Hites, R. A. (2021). The Rise and Fall of Chlorpyrifos in the United States. *Environmental Science and Technology*, 55(3), 1354–1358. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c06579>
- Hollad, J. P., & Green, J. C. (2010). Evaluation of Exchange-Correlation Functionals for Time-Dependent Density Functional Theory Calculations on Metal Complexes. *Journal of Computational Chemistry*, 31, 1008–1014. <https://doi.org/10.1002/jcc>
- Huck, S. W. (2014). *Reading Statistics and Research* (5th ed.). Pearson/Allyn dan Bacon.
- Ihsan, T., Edwin, T., Husni, N., & Rukmana, W. D. (2018). Uji Toksisitas Akut Dalam Penentuan LC50-96H Insektisida Klorpirifos Terhadap Dua Jenis Ikan Budidaya Danau Kembar, Sumatera Barat. *Jurnal Ilmu Lingkungan*, 16(1), 98. <https://doi.org/10.14710/jil.16.1.98-103>
- Imelda, I. (2020). Optimalisasi Struktur Π -Konjugasi Pada Zat Warna Organik Tipe D-II-a. *Journal of Research and Education Chemistry*, 2(2), 61. [https://doi.org/10.25299/jrec.2020.vol2\(2\).5724](https://doi.org/10.25299/jrec.2020.vol2(2).5724)
- Iswaradi, A. Z., Gunawan, R., & Hindryawati, N. (2021). Studi Komputasi Interaksi Zeolit Lta (Linde Type a) Dengan Kation Alkali (Li^+ , Na^+ , K^+) Menggunakan Metode Mekanika Molekuler. *Jurnal Kimia Mulawarman*, 19(1), 24. <https://doi.org/10.30872/jkm.v19i1.1012>
- Khattab, G. M., El-Sayed, W., Hala, & Megeed, M. I. A. (2013). *Determination Of Impurity Levels In Generic Chlorpyrifos Ethyl Technical*. 3(1), 37–48.
- Kiswandono, A. A. (2012). Polieugenol Dan Interaksi Keduanya. *Sains Natural Universitas Nusa Bangsa*, 2(1), 47–58.
- Kombongkila, O., Taunaumang, H., & Tumimomor, F. R. (2024). Analisis Struktur Film Tipis Disperse Orange-3 Hasil FTIR. *Jurnal FisTa : Fisika Dan Terapannya*, 5(1), 45–50. <https://doi.org/10.53682/fista.v5i1.305>
- Kurnia, A. (2018). Analisis Residu Klorpirifos pada Tanah dan Validasinya.

- Agrikultura*, 29(2), 61. <https://doi.org/10.24198/agrikultura.v29i2.19247>
- Kwon, H. Y., Curtin, G. M., Morrow, Z., Kelley, C. T., & Jakubikova, E. (2023). Adaptive basis sets for practical quantum computing. *International Journal of Quantum Chemistry*, 123(14), 1–14. <https://doi.org/10.1002/qua.27123>
- Male, Y. T., Sutapa, I. W., & Ranglalin, O. M. (2015). Computational Study Natural Color Essence (Dyes) As Active Material On Organic Solar Cell With Density Functional Theory (DFT). *Indonesian Journal of Chemical Research*, 2(2), 205–212. <https://doi.org/10.30598/ijcr.2015.2-yus>
- Muafianto, R., & Partana, F. C. (2018). Struktur dan dinamika hidrasi ion Zn^{2+} berdasarkan simulasi dinamika molekul klasik. *Jurnal Kimia Dasar*, 7(1), 23–28.
- Nauval, M., Wungu, T. D. K., & Widayani. (2021). Penggunaan Potensial Morse untuk Menjelaskan Interaksi Dua Atom untuk Membantu Proses Pembelajaran. *Jurnal Ilmu Fisika Dan Pembelajarannya (JIFP)*, 5(1), 8–13. <https://doi.org/10.19109/jifp.v5i1.8692>
- Nurhayati, Mukarrama, T. M. H., Defsuar, E., Handayani, L., & Muhazzir, S. (2022). Pemberian Pakan Bersuplemen Arang Aktif dari Tulang Ikan terhadap Reduksi Insektisida Diazinon dalam Tubuh Ikan Nila: Studi Kasus Histologi Insang Ikan Nila (*Oreochromis niloticus*). *Jurnal Tilapia*, 3(2), 29–34.
- Panggabean, A. S. (2016). Analisis Residu Klorpirifos Dalam Sayur-Sayuran Dengan Teknik High Performance Liquid Chromatography (Hplc) Analysis of Chlorpyrifos Residue in Vegetables By Using High Performance Liquid Chromatography (Hplc) Technique. *Jurnal Kimia Mulawarman*, 13(2), 57–63.
- Paramita, S., S, M. P., Y.D, E. V., Narsrokhah, & Iswanto, P. (2021). Pemilihan Metode Perhitungan Kimia Komputasi Semi-empiris untuk Pengembangan 1,3,4- Thiadiazole. *Indonesian Journal of Chemical Research*, 9(2), 129–136. <https://doi.org/10.30598/ijcr>
- Picone, G. (2024). The 1H HR-NMR Methods for the Evaluation of the Stability, Quality, Authenticity, and Shelf Life of Foods. *Encyclopedia*, 4(4), 1617–1628. <https://doi.org/10.3390/encyclopedia4040106>
- Pongajow, N. T., Juliandri, J., & Hastiawan, I. (2017). Penentuan Geometri Dan Karakteristik Ikatan Senyawa Kompleks Ni(II)-Dibutilditiokarbamat Dengan Metode Density Functional Theory. *Indonesian Journal of Applied Sciences*, 7(2), 33–36. <https://doi.org/10.24198/ijas.v7i2.2601>
- Prajawahyudo, T., K. P. Asiaka, F., & Ludang, E. (2022). Peranan Keamanan Pestisida Di Bidang Pertanian Bagi Petani Dan Lingkungan. *Journal Socio Economics Agricultural*, 17(1), 1–9. <https://doi.org/10.52850/jsea.v17i1.4227>

- Pranowo, H. dwi, & Hatadi, A. K. R. (2011). *Pengantar Kimia Komputasi*. CV. Lubuk Agung.
- Rachman, I. B., Rusdi, H. O., Ciptawati, E., Puteri, D. E. K., Retnosari, R., & Santoso, A. (2020). Thermodynamic and Infrared Spectroscopy Analysis of Tert-butyl Chloride and Hydroxide Nucleophilic Substitution Reaction Using Computational Method. *Jurnal Kartika Kimia*, 3(2), 81–88. <https://doi.org/10.26874/jkk.v3i2.60>
- Rahayu, D. P., Syailatussuraya, M. S., Sabrina, M. A., Taufik, R. S. R., Nurlatifah, R., Putri, A. E., Chairunisa, M. N., Nurpratiwi, M., Erdiana, M., & Amalia, P. (2023). Studi Komputasi Sifat Senyawa Flavonoid Naringenin 7-o- β -glucopyranoside dan Luteolin 8-c- β -glucopyranoside dari Tanaman Crataegi Folium Cum Flore dengan Metode Density Functional Theory (DFT). *Jurnal Crystal : Publikasi Penelitian Kimia Dan Terapannya*, 5(1), 1–13. <https://doi.org/10.36526/jc.v5i1.2438>
- Rahmatullah, I., Suherman, D., & Heri Dwiputranto, H. (2020). Kajian Penurunan Tingkat Residu Pestisida Pada Madu Lebah Hasil Budidaya Pada Kawasan Tanaman Hortikultura Di Desa Sumber Urip Kecamatan Selupu Rejang Kabupaten Rejang Lebong. *Naturalis: Jurnal Penelitian Pengelolaan Sumber Daya Alam Dan Lingkungan*, 9(2), 11–21. <https://doi.org/10.31186/naturalis.9.2.13501>
- Rahmawati, I., Suwarja, & Soenjono, S. J. (2014). Tingkat Keracunan Pestisida Organofosfat Pada Petani Penyemprot Sayur Di Desa Liberia Timur Kabupaten Bolaang Mongondow Timur Tahun 2013. *Jkl*, 3(2), 376–381.
- Salamat, F. (2023). Studi Komputasi Kompleks 1,10-Fenantrolin Dengan Logam Fe, Cu, Co, Ni Dan Zn Menggunakan Metode Density Functional Theory (Dft). *SAINTIFIK@: Jurnal Pendidikan MIPA*, 8(1), 9–12. <https://doi.org/10.33387/saintifik.v8i1.6217>
- Sanchez-Hernandez, J. C., & Sandoval, M. (2017). Effects of chlorpyrifos on soil carboxylesterase activity at an aggregate-size scale. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 142(April), 303–311. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2017.04.032>
- Santra, B. (2010). Density-Functional Theory Exchange-Correlation Functionals for Hydrogen Bonds in Water. *Http://Dx.Doi.Org/10.14279/Depositonce-2662, August 2010*. <https://doi.org/10.14279/depositonce-2662>
- Saputra, A. S., Gusti, D. I., Sanjaya, M., Kimia, J., Matematika, F., Ilmu, D., & Alam, P. (2014). a Theoretical Studi to Determine Band Gap of 8-Hydroxyquinoline Complexes With Iron Metal By Using Density Functional Theory. *UNESA Journal of Chemistry*, 3(2), 1–10.

- Seftiani, N., Purwoko, A., Junaidi, E., Arwinsyah, A., Hanfiah, Z., & Lamin, S. (2022). Toksisitas insektisida organofosfat terhadap mortalitas Ikan Mas (*Cyprinus carpio* L.). *Sriwijaya Bioscientia*, 3(1), 1–6. <https://doi.org/10.24233/sribios.3.1.2022.364>
- Soleman, P. (2011). Identifikasi Gugus Fungsi Dan Kandungan Mineral Lempung Pacitan Dengan Spektroskopi Infra Red (Ir) X-Ray Diffraction (Xrd). *Photon: Jurnal Sain Dan Kesehatan*, 2(1), 31–35. <https://doi.org/10.37859/jp.v2i1.124>
- Sud, D., Kumar, J., Kaur, P., & Bansal, P. (2020). *Toxicity, Natural and Induced Degradation of Chlorpyrifos*. 2.
- Susilawati, S. (2017). Pengaruh Radiasi Neutron Terhadap Waktu Relaksasi Spin-Kisi (T1) Pada Polimer Polivinil Klorida (Pvc) dengan Spektroskopi Nmr Pulsa. *Jurnal Pendidikan Fisika Dan Teknologi*, 1(1), 67–76. <https://doi.org/10.29303/jpft.v1i1.237>
- Tavita, G. E., Amir, A., Apindiati, R. K., Hartanti, L., & Kurniadi, B. (2022). Pelatihan pembuatan cairan Insektisida dari Ekoenzim berbahan Limbah Organik Buah-Buahan. *Journal of Community Engagement in Health*, 5(1), 87–91. <https://doi.org/10.30994/jceh.v5i1.344>
- Tembusai, T. H., Yusuf, M., Rafsanjani, M. B., Octaviani, P., Wulandari, I., & Reka, L. A. (2023). Studi Perhitungan Celah Energi Senyawa Kompleks Bis (Dibenzoilmetanato) Zirkonium Menggunakan Metode Semi-Empiris PM3. *Jurnal Kimia Saintek Dan Pendidikan*, 7(1), 72–78.
- Wanita, D., Gusti, I., & Sanjaya, M. (2020). Studi Komputatif Jalur Sintesis Asam Elagat Dari Asam Galat. *UNESA Journal of Chemistry*, 9(1), 83–90.
- Widiyanti, H., Banon, C., & Adfa, M. (2021). Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur terhadap Aktivitas Turunan Senyawa Cubebin sebagai Antikanker dengan Metode Recife Model 1 (RM1). *Bencoolen Journal of Pharmacy*, 1(1), 46–58. <https://doi.org/10.33369/bjp.v1i1.15594>
- Wulan Sari, N., Fajri, M. Y., & Anjas W. (2018). Analisis Fitokimia dan Gugus Fungsi dari Ekstrak Etanol Pisang Goroho Merah (*Musa Acuminata* (L.). *Ijobb*, 2(1), 30.
- Yopianto, D., Sipangkar, M. J., Budiyanto, R., & Siahaan, P. (2016). Studi Interaksi antara Segmen Dimer Kitosan dengan Peptida Ac-CA-NH₂ dan Ac-TP-NH₂ secara Komputasi Ab-Initio. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 19(3), 118–125. <https://doi.org/10.14710/jksa.19.3.118-125>
- Yusuf, M., Octaviani, P., Muhammad, D., & Rafsanjani, B. (2023). *Studi Perhitungan Celah Energi Senyawa Kompleks Bis(Benzoiltrifluoroaseton) Zirkonium Dengan Menggunakan Metode Semi-Empiris PM3*.

<http://jurnal.unimed.ac.id/2012/index.php/einstene-issn:2407-747x,p-issn2338-1981>

- Zhao, Y., & Truhlar, D. G. (2011). Applications and validations of the Minnesota density functionals. *Chemical Physics Letters*, 502(1–3), 1–13. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.11.060>
- Zia, K., Siddiqui, T., Ali, S., Farooq, I., Zafar, M. S., & Khurshid, Z. (2019). Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy for Medical and Dental Applications: A Comprehensive Review. *European Journal of Dentistry*, 13(1), 124–128. <https://doi.org/10.1055/s-0039-1688654>

