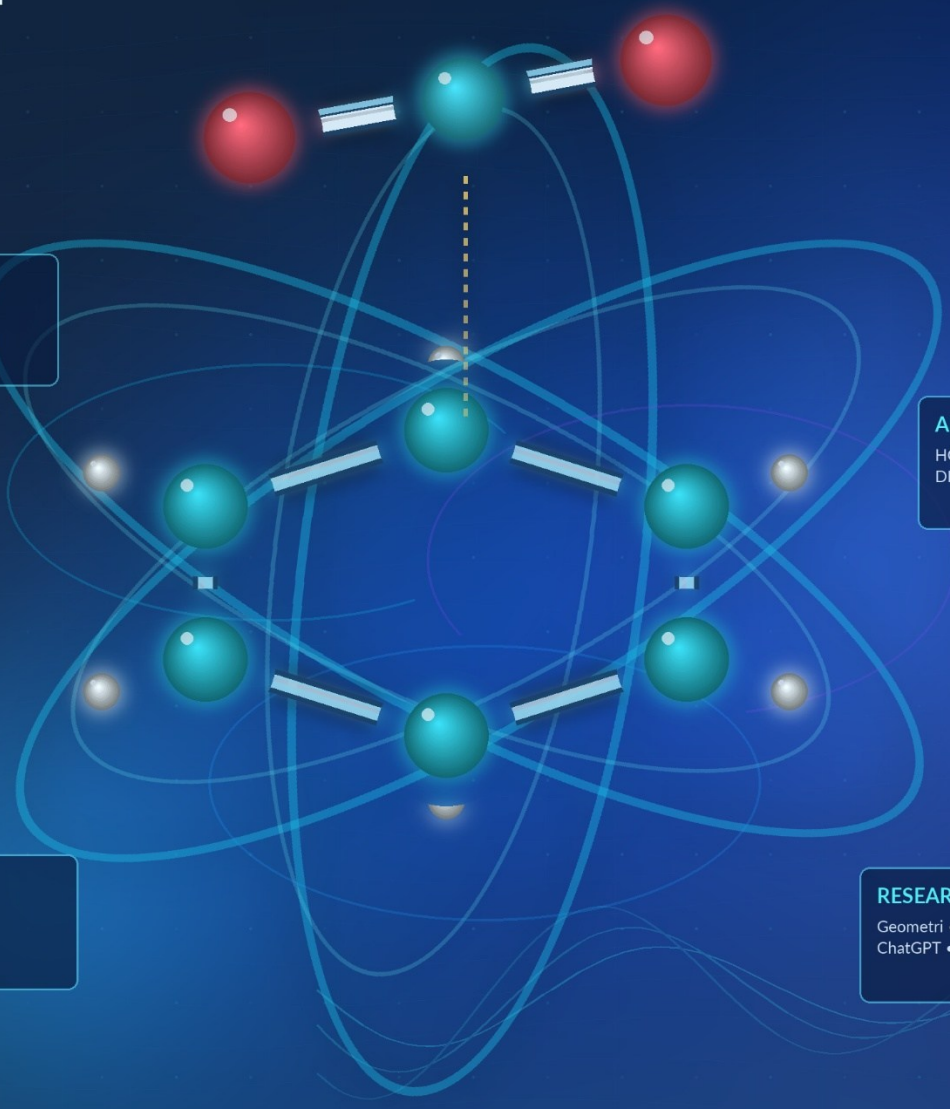
BUKU PANDUAN LENGKAP • EDISI 3.1.0

QM KOMPUTASI

VERSI 3.1.0

Kimia Kuantum, Pemodelan Molekul,
Energi Adsorpsi & Analisis Berbasis AI



ENERGI QM
HF / DFT / MP2
PySCF + xTB

ANALISIS
HOMO–LUMO
DIPOLE • MEP

ADSORPSI
E kompleks − fragmen
Koreksi BSSE

RESEARCH
Geometri • Frekuensi
ChatGPT • RAGMINI

INSTALASI • METODE QM • RESEARCH COMPLETE

PANDUAN PRAKTIS DAN ANALISIS HASIL RISET

KASMUI

QM KOMPUTASI 3.1.0 — Platform Kimia Kuantum Terintegrasi untuk Penelitian Molekuler, Adsorpsi, dan Analisis Berbasis AI

Panduan instalasi lengkap, penggunaan aplikasi, metode komputasi, dan pembahasan fitur penelitian

QM KOMPUTASI 3.1.0

Platform Terintegrasi untuk Perhitungan Kimia Kuantum, Pemodelan Molekul, Energi Adsorpsi, dan Analisis Ilmiah Berbasis AI

QM Komputasi 3.1.0 merupakan aplikasi berbasis Python dan Streamlit yang mengintegrasikan berbagai perangkat kimia komputasi dalam satu antarmuka grafis. Aplikasi ini dirancang untuk membantu mahasiswa, dosen, dan peneliti melakukan perhitungan struktur elektronik, optimasi geometri, spektroskopi molekuler, analisis reaktivitas, energi adsorpsi, hingga interpretasi hasil menggunakan kecerdasan buatan.

Pengembangannya menggabungkan perangkat lunak ilmiah seperti **PySCF, RDKit, xTB, MOPAC, ORCA, DFTB+, Psi4, OpenMM**, serta berbagai pustaka Python pendukung.

Selain komputasi utama, versi 3.1.0 menyediakan **50 molekul preset, 37 pilihan basis set, 32 metode PySCF, 20 contoh rancangan penelitian, 15 pilihan Add-On termasuk None**, dan fasilitas analisis hasil melalui ChatGPT maupun RAGMINI.

BAGIAN I — INSTALASI QM KOMPUTASI 3.1.0

1. Persyaratan sistem

QM Komputasi 3.1.0 dapat digunakan pada sistem Linux, terutama Ubuntu, Debian, dan Windows Subsystem for Linux (WSL).

Rekomendasi lingkungan penggunaan:

Komponen	Rekomendasi
Sistem operasi	Ubuntu / Debian / WSL2
Python	3.12 dalam Conda environment
RAM	Minimal praktis 8 GB; lebih besar untuk perhitungan kompleks
Prosesor	CPU multicore x86-64
Penyimpanan	SSD, dengan ruang kosong sesuai ukuran pekerjaan
Browser	Chrome, Edge, atau Firefox terbaru
Internet	Dibutuhkan untuk instalasi, PubChem, AI, dan Cloudflare
GPU	Opsional, terutama NVIDIA/CUDA
Port lokal	8501 sebagai bawaan

Python 3.12 merupakan pilihan lingkungan yang direkomendasikan untuk pemasangan baru, bukan persyaratan versi yang dikunci secara eksplisit di seluruh kode.

RAM dan kebutuhan penyimpanan bergantung pada jumlah atom, metode, ukuran basis set, jumlah orbital, grid cube, dan pekerjaan yang dijalankan.

2. Instalasi pustaka sistem Ubuntu/WSL

Buka terminal Ubuntu atau WSL.

Pertama, perbarui daftar paket:

```
sudo apt update
sudo apt upgrade -y
```

Kemudian pasang perlengkapan umum untuk menjalankan dan membangun pustaka ilmiah:

```
sudo apt install -y \
python3 python3-pip python3-venv \
build-essential gfortran git curl wget \
ca-certificates cmake pkg-config \
libopenblas-dev liblapack-dev libgomp1
```

Paket ini menyediakan Python, compiler, pustaka numerik BLAS/LAPACK, serta berbagai utilitas yang berguna saat pemasangan perangkat ilmiah.

Sebagian paket mungkin sudah tersedia dan tidak perlu dipasang ulang.

3. Membuat environment Python khusus

Penggunaan Conda atau Miniforge dianjurkan agar pustaka QM Komputasi tidak mengganggu aplikasi Python lain.

Bila Conda telah terpasang, buat environment baru:

```
conda create -n qm31 python=3.12 pip -y
conda activate qm31
```

Periksa interpreter:

```
python --version
which python
python -m pip --version
```

Bila sudah memiliki environment yang sesuai, environment tersebut dapat dipakai tanpa membuat yang baru. Namun, environment terpisah memudahkan pengelolaan kompatibilitas dependensi.

4. Instalasi semua pustaka Python inti

Aplikasi memerlukan sejumlah paket dasar untuk antarmuka, pengolahan molekul, serta komputasi kuantum.

Jalankan:

```
python -m pip install --upgrade pip setuptools wheel
```

Kemudian:

```
python -m pip install \
"streamlit>=1.63,<2" \
numpy pandas scipy requests \
rdkit pyscf \
geometric pyberny ase py3Dmol \
matplotlib pillow h5py
```

Keterangan:

Pustaka	Fungsi
Streamlit	Antarmuka aplikasi web
NumPy	Operasi matriks dan numerik
Pandas	Tabel hasil, CSV, dan data
SciPy	Optimasi dan perhitungan numerik
RDKit	Struktur, konformer, dan deskriptor molekul
PySCF	Mesin utama HF, DFT, dan MP2
Requests	Komunikasi HTTP dan PubChem
geomeTRIC	Optimasi geometri molekul
PyBerny	Optimizer alternatif
ASE	Optimasi BFGS opsional
py3Dmol	Visualisasi molekul dan orbital interaktif
Matplotlib	Grafik spektrum dan distribusi orbital
Pillow	Pemrosesan gambar molekul
h5py	Infrastruktur data numerik dan checkpoint

Penting: kode versi 3.1.0 menggunakan API `st.iframe`, sehingga pemasangan Streamlit harus memenuhi persyaratan antarmuka yang digunakan kode tersebut.

5. Instalasi ekstensi PySCF

PySCF standar belum tentu menyediakan semua modul tambahan yang dipakai aplikasi.

5.1 Metode semiempirik AM1 dan MINDO/3

```
python -m pip install "pyscf[semiempirical]"
```

Apabila ekstensi tidak berhasil dipasang melalui mekanisme tersebut, tersedia alternatif:

```
python -m pip install \
git+https://github.com/pyscf/semiempirical
```

Ekstensi ini digunakan untuk perhitungan semiempirik berbasis PySCF.

5.2 Koreksi dispersi D3 dan D4

```
python -m pip install pyscf-dispersion
```

Pustaka ini diperlukan ketika metode DFT dengan koreksi dispersi dipilih, antara lain B3LYP-D3BJ, PBE-D3BJ, serta metode berlabel D4.

Aplikasi dirancang untuk menolak perhitungan jika ekstensi dispersi yang diperlukan tidak tersedia, bukan diam-diam menggantinya dengan DFT tanpa dispersi.

5.3 Pustaka spektroskopi dan analisis tambahan

Pustaka tambahan yang perlu dipastikan tersedia meliputi:

```
python -m pip install \
matplotlib scipy \
geometric pyberny \
ase py3Dmol
```

Untuk analisis NMR, kode menggunakan modul `pyscf.prop.nmr`. Ketersediaannya harus diperiksa pada pemasangan PySCF aktif karena tidak semua properti tambahan tersedia pada semua konfigurasi.

6. Instalasi mesin komputasi eksternal

Tidak semua metode komputasi dijalankan oleh PySCF. Sejumlah metode memerlukan program tambahan dengan executable yang dapat ditemukan melalui `PATH`.

6.1 xTB

xTB digunakan untuk perhitungan *extended tight binding*, optimasi struktur, dan penyaringan konformer.

```
conda install -c conda-forge xtb -y
```

Pemeriksaan:

```
xtb --version
```

Metode yang disediakan dalam aplikasi ialah GFN2-xTB, GFN1-xTB, dan GFN0-xTB.

6.2 MOPAC

MOPAC menyediakan metode semiempirik yang lebih beragam.

```
conda install -c conda-forge mopac -y
```

Pemeriksaan:

```
which mopac
```

Metode yang terdaftar mencakup MNDO, AM1, PM3, RM1, MNDOD, PM6 beserta beberapa koreksinya, dan PM7.

6.3 Open Babel

Open Babel memungkinkan pembacaan dan konversi format struktur kimia tambahan.

```
conda install -c conda-forge openbabel -y
```

Pemeriksaan:

```
obabel -V
```

6.4 DFTB+

DFTB+ merupakan program komputasi kuantum semiempirik berbasis *density functional tight binding*.

```
conda install -c conda-forge dftbplus -y
```

Pemeriksaan:

```
which dftb+
```

Selain executable, DFTB+ membutuhkan **parameter Slater–Koster** yang kompatibel dengan unsur dan model kimia yang dihitung.

Pemasangan executable saja tidak menjamin perhitungan langsung dapat berjalan tanpa parameter tersebut.

6.5 Psi4

Psi4 menyediakan HF, DFT, MP2, perhitungan interaksi nonkovalen, dan beberapa workflow lanjutan.

```
conda install -c conda-forge psi4 -y
```

Pemeriksaan:

```
which psi4
```

Jika Conda mengalami konflik dependensi, Psi4 sebaiknya dipasang dan diuji pada environment khusus. Jangan memaksakan perubahan yang merusak lingkungan QM Komputasi utama.

6.6 ORCA

ORCA harus diunduh dan dipasang melalui distribusi resmi sesuai ketentuan lisensi dan penggunaannya.

Situs resmi:

https://www.faccts.de/orca/

Setelah instalasi, pastikan executable `orca` tersedia pada `PATH` Linux:

```
which orca
```

ORCA digunakan untuk berbagai metode elektronik dan Add-On yang memerlukan fasilitas ORCA.

6.7 Gaussian dan NBO

Gaussian dan NBO adalah program tambahan yang diperlakukan sebagai backend eksternal oleh kode.

Keduanya harus dipasang dan dikonfigurasi secara terpisah apabila pengguna memiliki akses atau lisensi yang sesuai.

Aplikasi tidak otomatis mengunduh Gaussian maupun NBO.

7. Instalasi molecular dynamics

Modul **Research Complete** menyediakan antarmuka untuk menjalankan simulasi dinamika molekuler menggunakan OpenMM.

Contoh instalasi:

```
conda install -c conda-forge openmm -y
```

Pustaka tambahan yang dapat digunakan:

```
conda install -c conda-forge \
openff-toolkit openmmforcefields -y
```

Pemasangan OpenFF dan OpenMMForceFields bersifat opsional dan bergantung pada kompatibilitas paket.

Perlu diperhatikan bahwa aplikasi mensyaratkan berkas **PDB dan OpenMM System XML yang telah diparameterisasi**. Program tidak otomatis menghasilkan semua parameter force field dari struktur molekul.

8. Instalasi pengenalan struktur dari gambar

Compound Converter menyediakan opsi mengenali gambar struktur molekul dan mengubahnya menjadi SMILES menggunakan DECIMER.

Untuk mengaktifkan fitur tersebut:

```
python -m pip install DECIMER
```

DECIMER merupakan fitur opsional yang mungkin memerlukan dependensi machine learning cukup besar.

Tanpa DECIMER, Compound Converter masih dapat menggunakan nama senyawa, SMILES, InChI, MOL, dan SDF.

9. Pemeriksaan seluruh library

Setelah instalasi, periksa pustaka dasar:

```
python -c "import
streamlit,numpy,pandas,scipy,rdkit,pyscf,requests,geometric,berny,ase,py3Dmol
; print('Library inti OK')"
```

Periksa konsistensi dependensi:

```
python -m pip check
```

Periksa mesin eksternal:

```
which xtb
which mopac
which obabel
which dftb+
which psi4
which orca
```

Perintah `which` tidak menghasilkan jalur apabila program belum ditemukan pada `PATH`.

Pemeriksaan ini tidak menjamin seluruh kombinasi metode berhasil. Sebaiknya setiap backend diuji dengan molekul sederhana sebelum menjalankan penelitian besar.

10. Cara menjalankan QM Komputasi 3.1.0

Simpan file berikut pada folder kerja:

```
qm-komputasi_3.1.0.py
```

Contoh folder:

```
~/qm-komputasi/
```

Masuk ke folder aplikasi:

```
cd ~/qm-komputasi
conda activate qm31
```

10.1 Menjalankan secara lokal

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --no-cloud
```

Buka browser:

http://localhost:8501

Pilihan ini dianjurkan untuk penggunaan pribadi melalui Ubuntu atau WSL.

10.2 Menggunakan port lain

Apabila port 8501 digunakan aplikasi lain:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --no-cloud --port 8502
```

Kemudian buka:

```
http://localhost:8502
```

10.3 Memasang dependensi melalui launcher

Kode menyediakan perintah:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --install-deps
```

Perintah tersebut menyiapkan dependensi inti serta optimizer dan viewer tertentu.

Perintah ini tidak memasang seluruh executable eksternal seperti ORCA, Psi4, DFTB+, Gaussian, maupun semua ekstensi yang mungkin dibutuhkan.

10.4 Diagnosis aplikasi

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --diagnose
```

Fungsinya untuk memeriksa interpreter, versi paket penting, health server lokal, supervisor, memori, dan lokasi log.

10.5 Menghentikan server

Dari terminal lain:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --stop
```

Perintah tersebut ditujukan kepada supervisor QM Komputasi pada port bersangkutan, bukan seluruh proses Python di komputer.

10.6 Menjalankan melalui paket DEB

Jika pengguna memiliki paket DEB yang benar-benar telah dibangun dan memasang launcher `/usr/bin/qm-komputasi`, aplikasi dapat dipanggil:

```
qm-komputasi
```

Atau:

```
qm-komputasi --no-cloud
```

Nama perintah resmi dalam kode adalah `qm-komputasi`, bukan `qm-komputasi-adsorpsi`.

File Python yang dianalisis bukan dengan sendirinya paket instalasi DEB.

11. Akses melalui Cloudflare

QM Komputasi menyediakan integrasi Cloudflare Quick Tunnel untuk membuka server lokal melalui alamat HTTPS.

Pemasangan:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --cloud-install
```

Persiapan token dan file PHP:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --cloud-setup
```

Proses setup menghasilkan token lokal dan berkas `upload.php`.

Berkas PHP hasil setup harus dipasang pada hosting yang digunakan aplikasi, sedangkan token lokal harus tetap dirahasiakan.

Pemeriksaan:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --cloud-check
```

Kemudian jalankan:

```
python qm-komputasi_3.1.0.py --cloud
```

Saat tunnel berhasil terbentuk, aplikasi mendeteksi alamat HTTPS sementara berekstensi `trycloudflare.com`.

Kode menyediakan endpoint:

- `https://kasmui.cloud/qmcloud/upload.php`
- `https://kasmui.cloud/qmcloud/cloud.txt`

Alamat tunnel baru disimpan secara lokal dan dapat dikirim ke endpoint tersebut apabila token serta PHP hosting telah dikonfigurasi dengan benar.

Catatan keamanan: Quick Tunnel membuat aplikasi dapat dijangkau dari internet. Jangan menganggapnya sebagai mekanisme autentikasi. Hindari membuka data penelitian rahasia tanpa kontrol akses tambahan.

BAGIAN II — ARSITEKTUR QM KOMPUTASI 3.1.0

12. Konsep dasar aplikasi

QM Komputasi merupakan antarmuka terpadu yang menghubungkan beberapa tahapan penelitian molekuler.

Alur utamanya meliputi:

1. Memasukkan identitas atau struktur molekul.
2. Memvalidasi konektivitas dan identitas kimia.
3. Membangun koordinat molekul tiga dimensi.
4. Menentukan muatan dan multiplicity.
5. Memilih metode, basis set, dan jenis pekerjaan.
6. Menjalankan backend komputasi.
7. Mengumpulkan energi dan properti molekuler.
8. Menampilkan hasil sebagai tabel, grafik, dan struktur 3D.
9. Menyimpan file untuk analisis dan reproduksibilitas.
10. Menggunakan AI untuk membantu interpretasi hasil.

RDKit berperan terutama dalam pemrosesan molekul dan geometri awal, sedangkan energi mekanika kuantum berasal dari backend komputasi yang dipilih.

13. Sembilan menu utama aplikasi

Antarmuka menyediakan sembilan menu navigasi utama.

Menu	**Fungsi**
Komputasi	Perhitungan QM molekul
Energi Adsorpsi	Interaksi adsorben–adsorbat
20 Contoh Riset	Referensi rancangan penelitian
Research Complete	Workflow penelitian lanjutan
Hasil Pekerjaan	Pusat hasil dan riwayat
Analisis ChatGPT	Interpretasi hasil melalui ChatGPT
Analisis RAGMINI	Analisis menggunakan Gemini
Tujuan	Penjelasan sasaran aplikasi
Penggunaan	Panduan operasional

Selain menu utama, terdapat utilitas Compound Converter, JSME 2D, dan DEB Package Viewer.

BAGIAN III — FITUR INPUT DAN PERSIAPAN MOLEKUL

14. Katalog 50 molekul bawaan

Aplikasi menyediakan 50 preset molekul untuk mempercepat penyiapan penelitian.

Katalog mencakup molekul sederhana seperti H2O, NH3, CH4, metanol, etanol, dan CO2 melalui input yang sesuai; senyawa aromatik seperti benzena, toluena, fenol, anilina, dan piridina; senyawa bioaktif seperti kafeina, glukosa, kurkumin, kuersetin, serta resveratrol; dan berbagai obat seperti aspirin, ibuprofen, parasetamol, tamoksifen, imatinib, erlotinib, gefitinib, dan beberapa obat antikanker lainnya.

Katalog dibangun agar pengguna dapat memilih molekul tanpa mengetik SMILES secara manual.

Secara bawaan, tidak ada molekul yang langsung dipilih. Pengguna menentukan sendiri molekul yang akan dihitung.

15. Input menggunakan SMILES dan InChI

SMILES merupakan representasi teks untuk konektivitas atom dalam suatu molekul.

Contohnya, benzena dapat dituliskan sebagai:

```
c1ccccc1
```

Air:

```
O
```

Etanol:

```
CCO
```

Aplikasi memproses representasi tersebut melalui RDKit.

Input InChI juga disediakan untuk mengidentifikasi struktur molekul secara lebih terstandar.

Pengguna dapat memasukkan beberapa molekul sekaligus. Kode juga mendukung format penamaan yang memisahkan nama molekul dan identifier kimianya.

16. Input menggunakan file struktur

Aplikasi mampu membaca format struktur kimia dan menyediakan jalur konversi untuk format tambahan melalui Open Babel.

Format utama mencakup XYZ, MOL, SDF, dan PDB. Format lain bergantung pada kemampuan Open Babel dan parser yang digunakan.

Input dapat berasal dari:

- File yang diunggah melalui browser.
- Jalur file lokal pada komputer server.
- Struktur yang dihasilkan editor molekul.
- Molekul yang sudah disimpan dalam katalog.

Perlu diperhatikan bahwa jalur lokal merujuk pada filesystem tempat Python berjalan. Pada WSL, jalur file Windows harus ditulis menggunakan mount Linux yang sesuai.

17. Input struktur RCSB PDB

Versi 3.1.0 menyediakan fasilitas untuk mengambil struktur dari **RCSB Protein Data Bank** berdasarkan identitas PDB.

Fitur ini memungkinkan pengguna memasukkan ID PDB, mengambil berkas struktur, kemudian memilih residu atau ligan yang relevan.

Salah satu penggunaannya ialah mempersiapkan molekul ligan dari struktur kristalografi.

Namun, struktur PDB tidak selalu memuat informasi bond order, protonasi, atau muatan formal yang lengkap.

Oleh karena itu, struktur yang diambil harus divalidasi sebelum dipakai untuk perhitungan kimia kuantum.

Fitur ini bukan pengganti perangkat persiapan protein lengkap.

18. Editor JSME 2D

Aplikasi memiliki editor struktur molekul dua dimensi berbasis JSME.

Melalui editor ini pengguna dapat:

1. Menggambar atom, ikatan, dan cincin.
2. Mengubah struktur yang sudah ada.
3. Menghasilkan SMILES.
4. Menentukan nama, charge, dan multiplicity.
5. Menyimpan struktur ke katalog molekul.

Struktur hasil editor divalidasi menggunakan RDKit dan selanjutnya dapat digunakan untuk membangun geometri tiga dimensi.

JSME tidak melakukan optimasi geometri QM di dalam kanvas 2D.

19. Pembuatan struktur tiga dimensi

RDKit menyediakan mekanisme embedding konformer 3D.

Aplikasi menggunakan pendekatan seperti ETKDG untuk menghasilkan koordinat awal, dengan opsi optimasi menggunakan MMFF94/MMFF94s atau UFF.

Geometri ini merupakan struktur awal untuk perhitungan QM.

Geometri dari force field tidak otomatis sama dengan geometri minimum hasil HF atau DFT.

Karena itu, optimasi QM tetap diperlukan jika tujuan penelitian mensyaratkan geometri kesetimbangan pada tingkat teori tertentu.

20. Katalog molekul persisten

Molekul yang ditambahkan tidak hanya berlaku selama aplikasi berjalan.

Aplikasi menyimpan data molekul dalam:

```
~/.local/share/qm-komputasi/upload_molekul.json
```

Data dari input manual, struktur lokal, dan upload dapat ditambahkan ke katalog secara permanen.

Molekul baru ditempatkan di bagian atas pilihan molekul untuk mempermudah penggunaan ulang.

21. Compound Converter

Compound Converter merupakan utilitas untuk mengubah berbagai bentuk identitas molekul menjadi representasi yang dapat dipakai dalam penelitian.

Input yang didukung meliputi nama trivial/IUPAC, SMILES, InChI, file MOL/SDF, dan gambar struktur menggunakan DECIMER opsional.

Output yang dapat dihasilkan meliputi:

- SMILES dan InChI.
- InChIKey.
- Rumus molekul.
- Massa molar.
- PubChem CID jika tersedia.
- Gambar struktur 2D.
- Koordinat XYZ 3D.

Fitur ini memanfaatkan PubChem PUG REST untuk penyelesaian identitas daring dan RDKit untuk pemrosesan struktur lokal.

BAGIAN IV — MESIN KOMPUTASI KIMIA KUANTUM

22. Metode Hartree–Fock

Hartree–Fock merupakan salah satu pendekatan dasar kimia kuantum untuk memperoleh orbital molekul melalui pendekatan medan rata-rata elektron.

Aplikasi menyediakan:

- HF otomatis.
- Restricted Hartree–Fock (RHF).
- Restricted Open-Shell Hartree–Fock (ROHF).
- Unrestricted Hartree–Fock (UHF).

Pemilihan referensi berkaitan dengan konfigurasi elektron dan keadaan spin molekul.

HF dapat digunakan untuk pembelajaran struktur elektronik, pembanding metode, dan referensi bagi perhitungan korelasi elektron.

23. Density Functional Theory

DFT merupakan metode utama QM Komputasi.

Aplikasi menyediakan berbagai keluarga fungsional, termasuk:

Keluarga	**Contoh metode**
LDA	SVWN
GGA	PBE, BP86, BLYP, PW91
GGA padatan	PBEsol
Meta-GGA	TPSS, SCAN, r2SCAN, M06-L
Hybrid	B3LYP, PBE0, TPSSh
Minnesota	M06, M06-2X
Range-separated	CAM-B3LYP, ωB97X-D3BJ
Dispersi D3	B3LYP-D3BJ, PBE-D3BJ
Dispersi D4	B3LYP-D4, PBE-D4, PBE0-D4

Total terdapat 32 pilihan metode PySCF dalam konfigurasi aplikasi, termasuk varian HF dan MP2.

Pilihan D3/D4 sangat relevan untuk penelitian interaksi antarmolekul yang memerlukan perlakuan dispersi.

Namun, hasil bergantung pada dukungan fungsional dan ekstensi pada versi PySCF yang terpasang.

24. Metode MP2

Møller–Plesset perturbation theory orde kedua (MP2) menambahkan koreksi korelasi elektron pada referensi HF.

Pada jalur PySCF aplikasi versi ini, **MP2 dibatasi untuk perhitungan single-point**.

Optimasi geometri dan Hessian/frekuensi MP2 tidak diaktifkan pada jalur tersebut.

Untuk kajian yang memerlukan geometri optimum, peneliti dapat melakukan optimasi menggunakan metode lain terlebih dahulu, kemudian menghitung energi single-point MP2 pada geometri hasil optimasi.

25. Basis set

Aplikasi menyediakan 37 pilihan basis set, yang dikelompokkan ke dalam empat tingkat ukuran.

Contohnya:

Kelompok	**Contoh**
Small	STO-3G, 3-21G, 6-31G, def2-SVP
Medium	def2-TZVP, 6-311+G(d,p), aug-cc-pVDZ
Large	def2-QZVP, cc-pVQZ, aug-cc-pVTZ
Very large	def2-QZVPP, aug-cc-pVQZ, pcseg-3

Basis set kecil umumnya lebih ringan, sedangkan basis besar berpotensi memberikan representasi fungsi gelombang lebih fleksibel dengan biaya komputasi lebih tinggi.

Basis set tidak boleh dipilih hanya berdasarkan ukurannya. Kesesuaian dengan unsur, sifat yang dihitung, dan metode tetap harus diperiksa.

26. Metode semiempirik PySCF

Aplikasi mempertahankan metode:

- MINDO/3.
- AM1.

Keduanya menggunakan pendekatan semiempirik untuk menyederhanakan beberapa perhitungan dibandingkan metode *ab initio*.

Kode juga menyediakan strategi pemulihan SCF semiempirik serta pendekatan optimasi numerik apabila diperlukan.

27. MOPAC

Integrasi MOPAC menyediakan 13 pilihan metode semiempirik, termasuk beberapa varian PM6 dengan koreksi interaksi.

MOPAC berguna untuk penelitian dengan kebutuhan penyaringan banyak struktur atau eksplorasi molekul yang relatif besar.

Salah satu perbedaan penting ialah keluaran **heat of formation**, yang harus dibedakan dari energi elektronik total.

Nilai entalpi pembentukan tidak boleh langsung diperlakukan sebagai energi elektronik PySCF.

28. xTB

Aplikasi menyediakan GFN2-xTB, GFN1-xTB, dan GFN0-xTB.

Penggunaan xTB meliputi optimasi struktur, perhitungan energi molekuler, penyaringan konformer, dan studi adsorpsi tahap awal.

xTB dapat berperan sebagai metode penyaringan sebelum kandidat yang dianggap penting dihitung ulang pada tingkat DFT lebih tinggi.

29. ORCA

ORCA dapat digunakan sebagai backend eksternal untuk sejumlah metode HF dan DFT.

Integrasi ORCA juga dimanfaatkan oleh Add-On tertentu, termasuk Raman dan perhitungan tambahan yang bergantung pada program eksternal.

Keberhasilan perhitungan bergantung pada pemasangan ORCA serta kemampuan versi program tersebut menjalankan input yang dibuat aplikasi.

30. DFTB+ dan Psi4

DFTB+ digunakan untuk perhitungan DFTB2/SCC dan DFTB3 dengan parameter Slater–Koster.

Psi4 menyediakan jalur perhitungan HF, DFT, MP2, serta workflow terkait interaksi molekuler.

Pilihan workflow Psi4 dalam antarmuka meliputi Standard, Transition State, IRC, Counterpoise BSSE, dan SAPT0.

Tidak semua kombinasi workflow, metode, dan jenis pekerjaan pasti valid. Setiap kombinasi tetap memerlukan pemeriksaan output dan validasi ilmiah.

BAGIAN V — JENIS PERHITUNGAN UTAMA

31. Single Point Energy

Single Point merupakan perhitungan energi pada geometri atom yang diberikan tanpa mengubah posisi atom tersebut.

Fitur ini bermanfaat untuk membandingkan energi relatif struktur yang relevan, menjalankan perhitungan pada geometri eksperimen, dan mengevaluasi hasil optimasi dengan metode atau basis set berbeda.

32. Single Point + Gradient

Selain energi, aplikasi dapat menghitung gradien energi terhadap koordinat atom.

Gradien membantu menunjukkan seberapa besar kecenderungan gaya yang masih bekerja pada struktur.

Nilai RMS gradient dan maksimum gradient dapat digunakan dalam pemeriksaan kualitas geometri.

33. Geometry Optimization

Optimasi geometri bertujuan mencari struktur dengan energi lebih rendah menurut model dan kondisi perhitungan yang digunakan.

Aplikasi menyediakan geomeTRIC, PyBerny, dan ASE-BFGS sebagai pilihan optimizer PySCF.

Parameter yang dapat diatur mencakup jumlah langkah optimasi maksimum, toleransi SCF, jumlah siklus SCF, dan memori.

Riwayat optimasi disimpan agar pengguna dapat menelaah perkembangan energi dan geometri.

34. Geometry Optimization + Final Gradient

Pekerjaan ini menggabungkan optimasi struktur dengan pemeriksaan gradien pada geometri akhir.

Gradien kecil merupakan salah satu indikator bahwa optimasi mendekati kondisi stasioner, tetapi belum membuktikan bahwa struktur merupakan minimum lokal.

35. Frequency Analysis

Analisis frekuensi dilakukan menggunakan Hessian untuk memperoleh mode vibrasi harmonik molekul.

Frekuensi positif dapat berhubungan dengan vibrasi stabil dalam pendekatan harmonik.

Frekuensi imajiner bermakna memerlukan penelaahan karena dapat menunjukkan struktur bukan minimum lokal.

36. Geometry Optimization + Frequency

Fitur ini menggabungkan optimasi geometri dan analisis frekuensi.

Workflow tersebut penting ketika peneliti ingin memastikan bahwa struktur teroptimasi merupakan kandidat minimum lokal.

Kriteria umum minimum lokal nonlinier adalah tidak adanya frekuensi imajiner yang bermakna, setelah mempertimbangkan artefak numerik serta kualitas komputasi.

37. TD-DFT Excited States

TD-DFT digunakan untuk menghitung keadaan tereksitasi berdasarkan referensi DFT.

Hasil dapat digunakan untuk mengkaji energi transisi, panjang gelombang, dan oscillator strength jika tersedia.

Pilihan TD-DFT tidak dapat dijalankan melalui semua keluarga metode pada jalur PySCF yang digunakan aplikasi.

BAGIAN VI — ANALISIS PROPERTI MOLEKUL

38. Energi dalam berbagai satuan

Aplikasi menyediakan konversi energi dari Hartree menjadi eV, kJ/mol, kcal/mol, dan cm^{-1}.

Konstanta yang digunakan antara lain:

- 1 Hartree ≈ 27,211386 eV.
- 1 Hartree ≈ 2625,499639 kJ/mol.
- 1 Hartree ≈ 627,509474 kcal/mol.

Konversi satuan memudahkan pelaporan hasil sesuai bidang penelitian.

Namun, mengubah satuan tidak mengubah definisi fisik energi tersebut.

39. HOMO–LUMO

Aplikasi menghitung energi orbital frontier dan selisih energinya.

Gap HOMO–LUMO = E(LUMO) − E(HOMO)

Analisis ini membantu mendeskripsikan karakter orbital molekul.

Gap orbital dapat menjadi indikator kualitatif tertentu dalam studi reaktivitas, tetapi tidak boleh langsung disamakan dengan celah optik eksperimen atau aktivitas biologis.

40. Visualisasi orbital dan cube

Aplikasi menghasilkan file cube dan menyediakan visualisasi tiga dimensi untuk orbital seperti HOMO dan LUMO.

Pengguna dapat memilih orbital untuk ditampilkan dan memeriksa bentuk spasial serta isosurface.

Visualisasi juga mencakup properti terkait electron density dan molecular electrostatic potential apabila hasil cube tersedia.

Warna lobus orbital yang berbeda menunjukkan fase fungsi orbital, bukan otomatis jenis muatan elektrostatik.

41. Momen dipol

Aplikasi menghitung komponen momen dipol pada sumbu X, Y, dan Z serta magnitudo totalnya.

Momen dipol dapat digunakan untuk mengkaji polaritas molekul dan distribusi muatan secara kualitatif.

Interpretasi harus mempertimbangkan geometri serta definisi sistem koordinat.

42. Muatan Mulliken

Analisis populasi Mulliken menghasilkan estimasi distribusi elektron atau muatan atom.

Hasil ini dapat membantu mendeskripsikan perubahan distribusi elektronik antaratom.

Namun, nilai Mulliken sensitif terhadap basis set dan tidak merupakan besaran observasi langsung.

43. Analisis geometri lengkap

Aplikasi menyediakan tabel panjang ikatan, sudut ikatan, serta dihedral molekul.

Informasi ini bermanfaat untuk mempelajari perubahan struktur setelah optimasi, geometri gugus fungsi, efek substituen, dan karakter konformasi.

Tersedia pula tabel energi serta riwayat geometri hasil optimasi.

44. QSAR dan QSPR

Aplikasi menggabungkan descriptor molekul RDKit dengan properti QM.

Deskriptor yang dapat diperoleh meliputi berat molekul, logP, TPSA, deskriptor topologi, sifat bentuk molekul 3D, dan distribusi muatan Gasteiger.

Kode menghitung deskriptor yang tersedia dari daftar RDKit, sehingga jumlah aktual bergantung pada versi RDKit dan validitas molekul.

Deskriptor elektronik seperti HOMO, LUMO, gap, dan momen dipol juga ditambahkan bila tersedia.

Data ini dapat digunakan sebagai variabel dalam pemodelan QSAR/QSPR, tetapi aplikasi tidak otomatis membangun atau memvalidasi model prediksi aktivitas biologis.

BAGIAN VII — FITUR ADD-ON SPEKTROSKOPI DAN ELEKTRONIK

45. Lima belas pilihan Add-On

QM Komputasi 3.1.0 menyediakan 15 pilihan Add-On, termasuk pilihan tanpa Add-On.

Add-On	Kegunaan
None	Tanpa analisis tambahan
IR	Frekuensi vibrasi harmonik
Thermodynamics	Properti termokimia
UV-Vis	Keadaan tereksitasi
NMR	Shielding magnetik inti
Raman	Perhitungan Raman melalui ORCA
ΔH f (g3mp2)	Perhitungan tambahan G3MP2
NBO (def2-tzpp)	Analisis orbital ikatan natural eksternal
Löwdin + Mayer	Populasi dan indeks ikatan
Vibrasi terskala	Koreksi skala frekuensi
Molden	Ekspor fungsi gelombang
DOS / PDOS	Distribusi keadaan orbital
Reaktivitas Global	Deskriptor konseptual DFT
FTIR	Intensitas dan spektrum simulasi
TD-DFT	Analisis keadaan elektronik tereksitasi

45.1 Infrared dan FTIR

Add-On IR menghitung mode vibrasi harmonik.

FTIR mengembangkan analisis dengan estimasi intensitas menggunakan turunan numerik momen dipol terhadap perubahan koordinat.

Spektrum dibentuk menggunakan pelebaran garis Lorentz.

Output dapat mencakup daftar puncak, data spektrum CSV, dan gambar spektrum.

Perlu diingat bahwa spektrum ini merupakan spektrum simulasi, bukan hasil pengukuran alat FTIR.

45.2 Thermodynamics

Perhitungan termokimia menggunakan hasil Hessian dan pendekatan harmonik.

Parameter temperatur dan tekanan dapat diatur.

Properti termokimia yang didukung bergantung pada hasil dan backend, termasuk kontribusi energi vibrasi serta besaran termodinamika yang dihasilkan modul PySCF.

45.3 UV-Vis dan TD-DFT

Modul ini dapat digunakan untuk mempelajari transisi elektronik.

Jumlah keadaan tereksitasi atau roots dapat dikonfigurasi.

Hasil dapat diinterpretasikan bersama struktur orbital dan energi transisi.

45.4 NMR

Modul NMR menggunakan implementasi shielding PySCF apabila tersedia.

Nilai shielding tidak otomatis identik dengan chemical shift NMR eksperimen. Untuk menghitung chemical shift, dibutuhkan referensi serta prosedur konversi yang sesuai.

45.5 Raman

Analisis Raman memanfaatkan ORCA sebagai program eksternal.

Fitur ini bergantung pada ketersediaan executable dan dukungan perhitungan Raman pada instalasi ORCA yang aktif.

45.6 Löwdin dan Mayer

Analisis Löwdin menghasilkan alternatif informasi populasi elektronik, sedangkan indeks Mayer berkaitan dengan karakter ikatan menurut pendekatan populasi tertentu.

Hasil ini bermanfaat untuk pembahasan redistribusi elektron dan karakter ikatan.

45.7 Vibrasi terskala

Frekuensi harmonik dapat dikalikan dengan faktor skala yang diberikan pengguna.

Jika data referensi tersedia, aplikasi dapat menghitung indikator kesalahan seperti MAE dan RMSE.

Perbandingan memerlukan pasangan mode komputasi dan eksperimen yang sesuai.

45.8 DOS dan PDOS

DOS memperlihatkan distribusi tingkat energi orbital yang mengalami pelebaran numerik.

PDOS menggunakan proyeksi orbital berbasis Löwdin.

Fitur tersebut merupakan analisis orbital molekuler, bukan perhitungan DOS periodik untuk kristal.

45.9 Reaktivitas global

Kode menyediakan pendekatan konseptual DFT berbasis energi HOMO dan LUMO.

Besaran yang dihitung meliputi ionization potential, electron affinity, electronegativity, chemical hardness, softness, chemical potential, dan electrophilicity index.

Dalam pendekatan orbital Koopmans:

$$\mathbf{IP \approx -E(HOMO)}$$

$$\mathbf{EA \approx -E(LUMO)}$$

$$\mathbf{\chi \approx (IP + EA)/2}$$

$$\mathbf{\eta \approx (IP - EA)/2}$$

Besaran tersebut adalah estimasi orbital, bukan nilai eksperimental atau hasil perhitungan ΔSCF secara otomatis.

45.10 Ekspor Molden

File Molden dapat digunakan untuk analisis lanjutan dengan perangkat seperti Multiwfn.

Aplikasi mengekspor data orbital untuk kebutuhan tersebut.

Analisis QTAIM dan NCI-RDG secara penuh **belum dilakukan langsung** oleh fitur ekspor Molden.

BAGIAN VIII — STUDI ENERGI ADSORPSI

46. Konsep energi adsorpsi

Menu Energi Adsorpsi dirancang untuk mempelajari interaksi antara adsorben dan adsorbat berbasis model molekul atau klaster hingga.

Energi adsorpsi didefinisikan:

Eads = E(kompleks) − E(adsorben) − E(adsorbat)

Tiga energi tersebut harus dihitung dengan definisi metode dan kondisi yang konsisten.

Nilai negatif biasanya menunjukkan kompleks mempunyai energi elektronik lebih rendah dibandingkan fragmen yang dipisahkan menurut definisi energi yang digunakan.

47. Menyiapkan adsorben dan adsorbat

Aplikasi memungkinkan pemilihan dua komponen.

Contohnya:

- Benzena dengan CO2.
- Molekul H2O dengan atom atau klaster logam.
- Model klaster adsorben dengan molekul gas.

Setiap komponen memiliki struktur, charge, dan multiplicity.

48. Pengaturan situs adsorpsi

Pengguna dapat menentukan situs berdasarkan pusat atom berat atau atom tertentu.

Arah normal permukaan lokal dapat ditentukan menggunakan tiga atom atau vektor manual.

Fitur ini berguna untuk membuat konfigurasi awal interaksi dengan orientasi tertentu.

49. Pengaturan orientasi adsorbat

Tersedia pengaturan jarak vertikal, anchor adsorbat, arah sumbu molekul, azimut, offset lateral, serta orientasi sejajar, tegak, atau sudut bebas.

Pengaturan ini memungkinkan pembuatan beberapa geometri kompleks untuk dibandingkan.

Sebagai contoh, benzena–CO2 dapat diuji pada konfigurasi sejajar dan tegak bidang dengan jarak awal berbeda.

50. Perhitungan tiga komponen

Aplikasi secara otomatis menyiapkan tiga struktur:

1. Adsorben.
2. Adsorbat.
3. Kompleks adsorben–adsorbat.

Pengguna dapat menjalankan perhitungan Single Point atau Geometry Optimization.

Backend yang tersedia khusus menu ini adalah PySCF dan xTB.

Optimasi ketiga komponen dilakukan secara terpisah apabila jenis pekerjaan optimasi dipilih.

51. Counterpoise Correction

Aplikasi menyediakan koreksi Boys–Bernardi Counterpoise untuk memperkirakan *basis set superposition error* (BSSE) pada backend PySCF.

Koreksi menggunakan perhitungan fragmen dalam basis masing-masing dan basis kompleks dengan ghost functions.

Fitur ini relevan ketika energi interaksi relatif kecil dan kesalahan basis dapat memengaruhi hasil secara signifikan.

52. Batasan interpretasi adsorpsi

Energi yang dihitung pada workflow ini terutama merupakan energi elektronik.

Nilainya tidak otomatis sama dengan energi bebas adsorpsi pada temperatur tertentu.

Selain itu, model klaster molekuler tidak otomatis merepresentasikan permukaan kristal periodik.

Untuk publikasi, perlu diperhatikan konvergensi struktur, ukuran model, BSSE, efek dispersi, keadaan spin, serta kemungkinan kontribusi termodinamika.

BAGIAN IX — RESEARCH COMPLETE

53. Modul penelitian lanjutan

Research Complete merupakan kumpulan workflow yang membantu peneliti melakukan persiapan, penyaringan, analisis interaksi, dan validasi ilmiah.

Terdapat delapan tab utama.

53.1 Doctor

Doctor memeriksa ketersediaan berbagai backend.

Hasil pemeriksaan dapat diekspor sebagai laporan JSON dan memuat status komponen yang tersedia atau belum ditemukan.

Fitur ini memudahkan diagnosis instalasi tanpa menjalankan komputasi besar.

53.2 Conformer Ensemble

Modul ini menghasilkan kumpulan konformer dari SMILES atau InChI.

Pengguna dapat mengatur jumlah konformer, ambang RMSD, dan jumlah kandidat teratas.

RDKit digunakan untuk menghasilkan serta mengevaluasi konformer awal.

Modul ini dapat menjadi dasar pencarian struktur energi rendah sebelum optimasi QM.

53.3 xTB Research

Tab xTB menerima koordinat XYZ dan menyediakan konfigurasi pelarut melalui parameter ALPB.

Pengguna dapat menjalankan optimasi berbasis GFN2-xTB.

Output dan log disimpan pada folder pekerjaan penelitian.

53.4 DFTB+ Research

Fitur ini membangun input DFTB+ berdasarkan struktur XYZ serta direktori parameter Slater–Koster.

Pilihan ini bermanfaat untuk penelitian sistem yang sesuai dengan model DFTB yang tersedia.

53.5 Psi4, Transition State, dan IRC

Modul Psi4 menyediakan pengaturan metode, basis set, jenis tugas, dan pelarut.

Jenis tugas mencakup energy, optimize, ts, dan irc.

Penelitian transisi reaksi memerlukan pemeriksaan frekuensi imajiner dan jalur reaksi agar hasil dapat diinterpretasikan secara benar.

53.6 BSSE dan SAPT

Tab interaksi menerima dua fragmen molekul dalam format XYZ.

Pengguna dapat memilih perhitungan Counterpoise atau SAPT0 melalui Psi4.

Fitur ini berguna dalam kajian interaksi nonkovalen, seperti ikatan hidrogen dan interaksi antarmolekul lemah.

53.7 OpenMM Molecular Dynamics

Tab ini memeriksa ketersediaan OpenMM dan pustaka force field terkait.

Jika PDB dan System XML valid tersedia, aplikasi dapat menjalankan simulasi MD.

Pengguna dapat mengatur jumlah langkah, temperatur, timestep, dan platform komputasi seperti CPU atau CUDA.

53.8 Scientific Gate

Scientific Gate membantu mengevaluasi daftar frekuensi vibrasi.

Pengguna memberikan nilai frekuensi serta ambang frekuensi imajiner yang dianggap bermakna.

Hasil membantu mengidentifikasi apakah struktur memerlukan pemeriksaan lebih lanjut sebagai minimum atau kandidat transition state.

Fitur ini merupakan alat pemeriksaan, bukan bukti otomatis bahwa suatu mekanisme reaksi telah tervalidasi.

BAGIAN X — DUA PULUH CONTOH PENELITIAN

54. Kumpulan rancangan riset siap-adaptasi

Aplikasi menyediakan 20 contoh riset yang menampilkan tujuan, molekul, input SMILES, geometri XYZ awal, metode, basis set, pengaturan, dan teknik analisis.

No.	Topik penelitian
1	Optimasi geometri dan ikatan O–H pada air
2	Struktur elektronik amonia dan momen dipol
3	Energi dan simetri metana
4	Vibrasi CO2 dan karakter molekul linear
5	Formaldehida: MEP dan HOMO–LUMO
6	Ikatan hidrogen dan polaritas metanol
7	Konformer etanol anti dan gauche
8	Spektrum IR aseton
9	Konformasi dan muatan asam asetat
10	Delokalisasi elektron π benzena
11	Pengaruh gugus –OH pada fenol
12	Konjugasi elektron anilina
13	Karakter basa aromatik piridina
14	Pencarian konformer glisina
15	Konformasi dan stereokimia alanina
16	Reaktivitas elektronik aspirin
17	QSAR/QSPR kafeina
18	Ensemble konformer ibuprofen
19	Donor–akseptor ikatan hidrogen parasetamol
20	Resonansi, planaritas, dan ikatan C–N urea

Setiap contoh dapat dikonversi menjadi file input TXT.

Pengguna dapat memilih profil pengaturan sesuai tujuan contoh atau menggunakan pengaturan dasar aplikasi.

Perlu dibedakan antara **rancangan penelitian dan hasil penelitian**. Struktur XYZ contoh merupakan geometri awal, bukan geometri optimum yang sudah divalidasi.

BAGIAN XI — PENGELOLAAN HASIL DAN DATA

55. Pusat Hasil Pekerjaan

Aplikasi menyediakan pusat hasil yang membaca folder pekerjaan terdahulu secara otomatis.

Sebelas tampilan tersedia:

Tampilan	**Informasi**
Ringkasan	Daftar pekerjaan yang telah dilakukan
Hasil per molekul	Output masing-masing molekul
Energi dan metode	Nilai energi serta konfigurasi
Elektronik	HOMO, LUMO, dipol, Mulliken
Geometri	Panjang, sudut, dihedral, optimasi
Frekuensi	Vibrasi dan termokimia
Add-On	Hasil analisis tambahan
QSAR/QSPR	Deskriptor molekul
File hasil	Inventaris berkas output
Status dan log	Kemajuan serta error
Provenance	Konfigurasi dan jejak perhitungan

56. Penyimpanan hasil

Secara bawaan, direktori data aplikasi adalah:

```
~/.local/share/qm-komputasi/
```

Folder pekerjaan utama:

```
~/.local/share/qm-komputasi/qm_runs/
```

Setiap proyek dapat mempunyai folder tersendiri yang menyimpan konfigurasi, status, log, data molekul, dan hasil perhitungan.

Lokasi data dapat diganti melalui variabel lingkungan `QM_KOMPUTASI_DATA_DIR`.

57. Format output penelitian

Aplikasi menghasilkan berbagai file, antara lain:

Format	Kegunaan
XYZ	Koordinat final
MOL	Struktur dan ikatan
SDF	Data molekul
PDB	Struktur molekul
CSV	Tabel numerik
JSON	Metadata dan hasil terstruktur
LOG	Status serta proses perhitungan
CUBE	Orbital dan properti volumetrik
Molden	Data orbital untuk analisis lanjutan
PNG	Grafik atau gambar bila tersedia

Nama file output dapat memuat nama proyek dan molekul untuk mengurangi risiko tercampurnya hasil.

58. Input TXT yang dapat dipakai ulang

Aplikasi menyediakan parser file TXT dengan pendekatan Gaussian-like.

Contoh sintaks:

```
# B3LYP/def2-SVP Opt Freq
```

File dapat menyimpan pengaturan metode, basis, jumlah thread, memori, optimizer, dan struktur molekul.

Format multi-molekul menggunakan blok `[MOLECULE]` juga disediakan.

Dengan demikian, pengguna dapat menyimpan konfigurasi lengkap dan membukanya kembali tanpa memasukkan semua parameter secara manual.

59. Worker dan pemantauan pekerjaan

Perhitungan berjalan melalui worker terpisah.

Aplikasi menyediakan pemantauan status, jumlah molekul yang selesai, log kemajuan, error, dan tombol Stop.

Pemrosesan terpisah dimaksudkan agar interaksi halaman Streamlit tidak secara langsung menghentikan komputasi yang sedang berlangsung.

Kode juga memuat supervisor server, health check, dan mekanisme pemulihan server dengan batas percobaan.

Walaupun demikian, pengguna tetap perlu memantau kapasitas memori serta proses komputasi yang berjalan.

BAGIAN XII — INTEGRASI CHATGPT DAN RAGMINI

60. Analisis hasil melalui ChatGPT

Menu Analisis ChatGPT memungkinkan pengguna memilih satu folder pekerjaan yang sudah tersimpan.

Aplikasi memindai file hasil yang relevan secara otomatis, kemudian membentuk digest data dan master prompt ilmiah.

Data yang dikumpulkan dapat mencakup energi, metode, konfigurasi, orbital, momen dipol, gradien, geometri, frekuensi, descriptor, serta log dan status.

Tombol analisis membuka ChatGPT dengan prompt yang telah disiapkan.

Selain itu, tersedia unduhan bundle lengkap dan master prompt untuk audit atau penggunaan manual.

Penting: tombol ini menyiapkan serta membuka permintaan analisis; hasil interpretasi ChatGPT bukan hasil komputasi QM baru.

61. Struktur analisis ilmiah

Master prompt aplikasi mengarahkan AI untuk membahas:

1. Ringkasan eksekutif.
2. Identitas dan konfigurasi.
3. Audit keberhasilan dan konvergensi.
4. Hasil numerik utama.
5. Pembahasan ilmiah mendalam.
6. Analisis gambar jika tersedia.
7. Anomali dan konsistensi data.
8. Keterbatasan interpretasi.
9. Rekomendasi tahap riset berikutnya.
10. Kesimpulan komprehensif.
11. Paragraf siap masuk hasil dan pembahasan.

Tersedia pula arahan untuk menyebutkan data yang masih diperlukan.

Prompt secara eksplisit melarang AI mengarang nilai yang tidak tersedia atau menyimpulkan keberhasilan komputasi hanya dari adanya angka energi.

62. Analisis RAGMINI

Menu RAGMINI menggunakan mekanisme analisis Gemini melalui Google Generative Language API.

Kode mencantumkan pilihan model `gemini-3.8-flash` dan `gemini-3.6-flash`.

Model tersebut merupakan identifier yang dikonfigurasi dalam kode; keberhasilan pemanggilan tetap bergantung pada keberadaan model dalam layanan API serta akses akun pengguna.

RAGMINI menggunakan digest dan master prompt yang sejalan dengan Analisis ChatGPT.

Fitur yang disediakan meliputi input API key, pemilihan model, tampilan prompt, hasil analisis, serta ekspor laporan Markdown.

Data gambar lokal tidak dikirim sebagai piksel pada jalur analisis ini; yang dikirim adalah prompt beserta data teks/numerik yang diekstraksi.

63. Kedudukan AI dalam penelitian ilmiah

Integrasi AI bermanfaat untuk mempercepat pembacaan output komputasi, penyusunan pembahasan, identifikasi kemungkinan masalah konvergensi, dan perumusan langkah lanjutan.

Namun, interpretasi AI harus diverifikasi menggunakan hasil numerik, dokumentasi metode, serta literatur ilmiah.

AI tidak menggantikan validasi geometri, perhitungan frekuensi, pengujian sensitivitas metode, atau pembuktian eksperimen.

BAGIAN XIII — UTILITAS, PENGATURAN, DAN OPTIMASI KINERJA

64. DEB Package Viewer

Aplikasi menyediakan fasilitas untuk memeriksa paket Debian yang terpasang pada sistem.

Fitur ini membaca database `dpkg`, menampilkan nama dan versi paket, arsitektur, deskripsi, serta daftar file paket.

Pengguna dapat melakukan pencarian, penyaringan, pemeriksaan informasi, dan ekspor hasil.

DEB Viewer bersifat **read-only** dan tidak melakukan penghapusan atau instalasi paket sistem.

65. Pengaturan CPU dan GPU

Pengguna dapat mengatur jumlah thread CPU, memori maksimum, serta beberapa parameter performa.

Deteksi GPU dilakukan melalui utilitas seperti `nvidia-smi`.

Kode juga memeriksa keberadaan GPU4PySCF.

Namun, terdeteksinya GPU tidak berarti semua jenis perhitungan otomatis dijalankan pada GPU. Akselerasi bergantung pada metode, backend, dan konfigurasi perangkat.

66. Parameter konvergensi

Pengaturan utama mencakup toleransi SCF, jumlah siklus maksimum, grid DFT, density fitting, jumlah langkah optimasi, dan resolusi grid cube.

Parameter yang lebih ketat dapat meningkatkan reliabilitas numerik dalam kondisi tertentu, tetapi juga menambah biaya komputasi.

Nilai parameter harus disesuaikan dengan ukuran molekul serta tujuan penelitian.

67. Reproduksibilitas

QM Komputasi menyediakan berbagai fasilitas untuk merekam input, pengaturan, status, dan hasil.

Nama proyek, random seed, metode, basis set, charge, multiplicity, dan konfigurasi sumber daya dapat disimpan.

Hal ini merupakan fondasi yang penting untuk penelitian yang dapat diperiksa atau diulang.

Untuk pelaporan publikasi, peneliti tetap perlu mendokumentasikan versi backend, kriteria konvergensi, serta setiap tahapan pemrosesan yang memengaruhi hasil.

BAGIAN XIV — CONTOH PENGGUNAAN PRAKTIS

68. Contoh pertama: optimasi molekul air

Molekul air merupakan pilihan awal yang baik untuk menguji kesiapan komputasi.

Gunakan pengaturan berikut.

Parameter	Pengaturan
Molekul	Water
SMILES	O
Charge	0
Multiplicity	1
Backend	PySCF
Method	B3LYP
Basis	def2-SVP
Job	Geometry Optimization + Frequency
Optimizer	geomeTRIC
CPU threads	2
Memori	4000 MB

Langkah pelaksanaan:

1. Pilih menu Komputasi.
2. Pilih preset Water.
3. Tentukan metode dan basis.
4. Pilih jenis pekerjaan optimasi dan frekuensi.
5. Jalankan komputasi.
6. Periksa status serta konvergensi.
7. Buka hasil geometri, energi, dipol, dan vibrasi.
8. Simpan data hasil untuk analisis.

Untuk evaluasi, periksa dua panjang ikatan O–H, sudut H–O–H, dan ada atau tidaknya frekuensi imajiner bermakna.

69. Contoh kedua: struktur elektronik benzena

Gunakan benzena untuk meneliti karakter orbital π dan simetri molekul.

Rancangan yang dapat digunakan ialah optimasi B3LYP/def2-SVP, kemudian analisis orbital frontier dan visualisasi cube.

Hasil yang perlu diperiksa meliputi kesetaraan panjang ikatan C–C, energi orbital, gap, momen dipol, dan bentuk spasial HOMO–LUMO.

70. Contoh ketiga: adsorpsi CO2 pada benzena

Menu Energi Adsorpsi dapat digunakan untuk membuat model benzena–CO2.

Tentukan adsorben benzena, adsorbat CO2, situs pada pusat atom berat, dan jarak awal misalnya 3,4 Å sebagaimana contoh kode.

Kemudian pilih orientasi adsorbat serta metode yang sesuai.

Jalankan tiga perhitungan untuk benzena, CO2, dan kompleksnya.

Energi adsorpsi yang diperoleh perlu dievaluasi terhadap efek dispersi, BSSE, perubahan geometri, serta pilihan keadaan elektronik.

71. Contoh keempat: penelitian konformer etanol

Research Complete dapat digunakan untuk menghasilkan sejumlah konformer etanol.

Konformer diperingkat menggunakan energi model awal, kemudian kandidat terpilih dapat digunakan pada perhitungan QM.

Pendekatan ini penting karena penggunaan satu konformer acak tidak menjamin ditemukannya struktur berenergi terendah.

BAGIAN XV — KEUNGGULAN DAN BATASAN ILMIAH

72. Keunggulan aplikasi

QM Komputasi 3.1.0 memiliki sejumlah keunggulan utama.

Pertama, integrasi banyak backend. Pengguna dapat mengakses berbagai metode komputasi melalui antarmuka yang relatif seragam.

Kedua, persiapan molekul yang fleksibel. Tersedia input SMILES, InChI, file struktur, PDB, dan editor 2D.

Ketiga, keluaran yang beragam. Hasil tidak terbatas pada energi, tetapi juga dapat mencakup orbital, geometri, vibrasi, descriptor, serta data visualisasi.

Keempat, dukungan penelitian bertahap. Aplikasi menyediakan jalur dari konformer awal dan metode semiempirik menuju perhitungan QM yang lebih teliti.

Kelima, pengelolaan hasil. Data pekerjaan dapat diperiksa kembali melalui pusat hasil dan file terstruktur.

Keenam, integrasi AI. Analisis ChatGPT dan RAGMINI membantu peneliti menyusun interpretasi awal berdasarkan output komputasi.

73. Batasan yang perlu dipahami

Walaupun fiturnya luas, aplikasi tetap mempunyai batasan.

Perhitungan MP2 pada jalur PySCF dibatasi untuk single-point. Perhitungan NBO dan Raman memerlukan program eksternal yang sesuai. Ekspor Molden belum berarti analisis QTAIM/NCI selesai. Model adsorpsi berbasis klaster tidak otomatis setara dengan simulasi permukaan periodik.

Selain itu, sebagian properti hanya tersedia untuk metode tertentu, sedangkan keberhasilan workflow bergantung pada kompatibilitas backend dan instalasi pustaka.

Peneliti harus membedakan hasil yang benar-benar dihitung, hasil turunan matematis, model perkiraan, dan interpretasi ilmiah.

Prinsip penting: keluasan fitur perangkat lunak bukan pengganti validasi metodologi. Setiap hasil komputasi harus dinilai berdasarkan metode, struktur, konvergensi, parameter, dan relevansinya dengan pertanyaan penelitian.

KESIMPULAN

QM Komputasi 3.1.0 merupakan platform kimia kuantum terintegrasi yang berupaya menyederhanakan penggunaan berbagai perangkat komputasi molekuler melalui satu antarmuka Streamlit.

Dengan dukungan PySCF, RDKit, xTB, MOPAC, ORCA, DFTB+, Psi4, dan OpenMM, aplikasi mencakup spektrum kegiatan dari penyiapan struktur, optimasi geometri, perhitungan energi, analisis orbital, spektroskopi, studi adsorpsi, hingga simulasi penelitian lanjutan.

Kehadiran 50 preset molekul, 37 basis set, 20 contoh rancangan riset, fasilitas penyimpanan hasil, dan integrasi ChatGPT serta RAGMINI memperluas kegunaannya sebagai sarana pembelajaran sekaligus pendukung penelitian.

Aplikasi ini dapat dimanfaatkan untuk pengajaran kimia kuantum, pelatihan kimia komputasi, penelitian tingkat sarjana dan pascasarjana, serta eksplorasi awal sistem molekuler.

Untuk penggunaan riset yang menuntut akurasi tinggi, setiap backend, metode, dan workflow tetap harus diuji dan divalidasi secara independen.

Dengan pendekatan demikian, QM Komputasi dapat menjadi lingkungan kerja yang membantu menghubungkan teori kimia kuantum, eksperimen numerik, visualisasi molekuler, dan penyusunan pembahasan ilmiah berbasis data.

Literatur dan dokumentasi

1. **PySCF** — Dokumentasi resmi instalasi dan metode kimia kuantum: https://pyscf.org/
2. **RDKit** — Cheminformatics dan pengolahan struktur molekul: https://www.rdkit.org/
3. **xTB** — Dokumentasi metode extended tight binding: https://xtb-docs.readthedocs.io/
4. **MOPAC** — Dokumentasi semiempirik: https://openmopac.net/
5. **ORCA** — Dokumentasi dan distribusi resmi: https://www.faccts.de/orca/
6. **Psi4** — Dokumentasi paket kimia kuantum: https://psicode.org/
7. **DFTB+** — Dokumentasi komputasi tight binding: https://dftbplus.org/
8. **OpenMM** — Dokumentasi simulasi dinamika molekuler: https://openmm.org/
9. **RDKit Python API** — https://www.rdkit.org/docs/
10. **Streamlit** — Dokumentasi antarmuka aplikasi: https://docs.streamlit.io/


+ HCl
computation
computing
- KASMUI -
Dosen Kimia, Komputasi, IT, AI UNNES
https://hisabmu.com/
https://kasmui.cloud/
Ketua PCM Gunungpati 2
Anggota Majelis Tabligh PDM Kota Semarang & PWM Jawa Tengah
Tim Pengembang Software KHGT MTT PP Muhammadiyah
Praktisi Ilmu Falak