

TUTORIAL PENGUNAAN QM KOMPUTASI V2.3.4

Panduan Operasional Setelah Instalasi

Intensitas

200 300 400 500 600 700
Panjang Gelombang (nm)

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

KASMUI

TUTORIAL PENGGUNAAN QM KOMPUTASI V2.3.4

Komputasi Jisamsu — PySCF, RDKit, MOPAC, xTB, dan ORCA
Panduan Operasioanal Setelah Instalasi

Programer
KASMUI

Agustus 2026

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, booklet **TUTORIAL PENGGUNAAN QM KOMPUTASI V2.3.4: Panduan Operasional Setelah Instalasi** ini dapat disusun sebagai panduan praktis bagi pengguna yang telah menyelesaikan proses instalasi dan ingin mulai menggunakan aplikasi **QM Komputasi V2.3.4 (Komputasi Jisamsu)** secara terarah, sistematis, dan bertanggung jawab secara ilmiah.

QM Komputasi V2.3.4 dikembangkan untuk membantu menjembatani konsep kimia komputasi dengan pelaksanaan perhitungan secara praktis melalui antarmuka berbasis Streamlit. Aplikasi ini mengintegrasikan pengelolaan struktur molekul, visualisasi dua dan tiga dimensi, pembangunan geometri awal, pemilihan metode dan basis set, pelaksanaan perhitungan mekanika kuantum, pemantauan proses komputasi, hingga penyajian serta penyimpanan hasil. Berbagai backend dan perangkat pendukung seperti **RDKit**, **PySCF**, **MOPAC**, **xTB**, dan **ORCA** ditempatkan dalam satu alur kerja agar pengguna dapat menjalankan komputasi molekul dengan lebih terstruktur.

Booklet ini sengaja tidak berfokus pada proses instalasi. Pembahasan dimulai ketika perangkat lunak telah terpasang dan siap dijalankan. Oleh karena itu, bagian utama tutorial diarahkan pada cara membuka aplikasi, memahami tampilan antarmuka, serta melakukan kustomisasi parameter pada **sidebar kiri**. Pengguna diperkenalkan secara bertahap pada pemilihan molekul, nama proyek, program QM, jenis job, **charge**, **multiplicity**, metode komputasi, basis set, optimizer, Add-On, toleransi konvergensi SCF, grid DFT, jumlah langkah optimasi, jumlah siklus SCF, penggunaan CPU dan GPU, memori, density fitting, seed geometri awal, serta pre-optimasi MMFF94/UFF.

Salah satu tujuan utama booklet ini adalah agar pengguna tidak memperlakukan aplikasi komputasi kimia hanya sebagai perangkat untuk menekan tombol dan memperoleh angka. Dalam perhitungan mekanika kuantum, setiap pilihan mempunyai konsekuensi ilmiah. Struktur awal, keadaan muatan, multiplicity, metode elektronik, basis set, kriteria konvergensi, dan jenis perhitungan harus dipilih sesuai dengan tujuan penelitian. Status **Completed** pada suatu job menunjukkan bahwa proses komputasi telah selesai, tetapi belum dengan sendirinya membuktikan bahwa hasil tersebut telah benar dan layak digunakan sebagai dasar kesimpulan ilmiah.

Untuk mempermudah pembelajaran, tutorial menggunakan molekul sederhana sebagai contoh. Molekul seperti **air (H₂O)** dapat digunakan untuk mempelajari seluruh alur kerja dasar mulai dari pemilihan struktur, penetapan **charge = 0** dan **multiplicity = 1**, penggunaan **PySCF**, metode **B3LYP**, basis set **def2-SVP**, optimasi geometri menggunakan **geomeTRIC**, hingga pembacaan hasil komputasi. Melalui contoh yang sederhana tersebut, pengguna diharapkan memahami hubungan antara input struktur, konfigurasi metode, proses SCF, optimasi geometri, serta keluaran berupa energi, orbital, HOMO-LUMO, momen dipol, koordinat, geometri molekul, muatan atom, dan berbagai descriptor lainnya.

Booklet ini juga memberikan perhatian khusus pada tahapan setelah perhitungan selesai. Hasil komputasi tidak hanya ditampilkan sebagai angka energi, tetapi perlu diperiksa melalui struktur

akhir, parameter geometri, orbital molekul, distribusi muatan, frekuensi vibrasi apabila dihitung, serta file-file keluaran yang dihasilkan. Fasilitas penyimpanan dalam bentuk CSV, ZIP, XYZ, MOL, SDF, PDB, Gaussian cube, log progres, dan konfigurasi job sangat penting untuk mendukung dokumentasi serta reproduksibilitas penelitian.

Kehadiran berbagai **Add-On**, seperti **IR, Thermodynamics, UV-Vis, NMR, Raman, G3MP2, dan NBO**, diharapkan memperluas fungsi aplikasi dari sekadar optimasi struktur menuju analisis sifat molekul yang lebih komprehensif. Namun demikian, tidak semua metode maupun Add-On sesuai untuk setiap sistem molekul atau setiap backend. Karena itu, pengguna tetap dituntut memahami dasar teori dan keterbatasan metode sebelum menginterpretasikan hasil.

Booklet ini ditujukan terutama bagi mahasiswa, dosen, peneliti, praktisi kimia komputasi, serta pengguna yang sedang mempelajari penerapan metode komputasi molekul. Bagi pengguna pemula, disarankan untuk memulai dengan molekul kecil dan konfigurasi standar terlebih dahulu. Setelah alur perhitungan dapat dipahami dengan baik, pengguna dapat secara bertahap meningkatkan kompleksitas molekul, metode, basis set, maupun jenis analisis sesuai kebutuhan penelitian.

Penyusun menyadari bahwa perangkat lunak komputasi kimia akan terus berkembang, demikian pula library dan backend yang menjadi pendukungnya. Oleh karena itu, booklet ini hendaknya dipahami sebagai panduan operasional untuk **QM Komputasi V2.3.4**, sekaligus sebagai pintu masuk untuk mempelajari workflow kimia komputasi yang lebih luas. Validasi terhadap literatur, data eksperimen, metode alternatif, dan tingkat teori yang lebih tinggi tetap diperlukan apabila hasil komputasi akan digunakan untuk kepentingan ilmiah yang lebih mendalam.

Akhirnya, semoga **TUTORIAL PENGGUNAAN QM KOMPUTASI V2.3.4** ini dapat membantu pengguna memahami aplikasi secara lebih cepat, mengurangi kesalahan dalam pengaturan parameter, serta mendorong penggunaan komputasi kimia yang lebih sistematis, kritis, terukur, dan dapat direproduksi. Harapannya, aplikasi ini tidak hanya mempermudah pekerjaan komputasi, tetapi juga dapat menjadi sarana pembelajaran dan penelitian dalam memahami hubungan antara **struktur molekul, energi, distribusi elektron, dan sifat kimia** melalui pendekatan komputasi modern.

Semoga booklet ini memberikan manfaat bagi pengembangan pembelajaran, penelitian, dan penerapan kimia komputasi.

Semarang, Agustus 2026

Penyusun,

KASMUI

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	3
DAFTAR ISI.....	5
TUTORIAL PENGGUNAAN QM KOMPUTASI V2.3.4	8
Komputasi Jisamsu — PySCF, RDKit, MOPAC, xTB, dan ORCA	8
1. Konsep Singkat yang Mendasari QM Komputasi.....	8
2. Menjalankan QM Komputasi V2.3.4	9
3. Memahami Sidebar Kiri.....	9
A. Input Molekul	9
1. Molekul bawaan.....	9
2. Tambah SMILES.....	10
3. Tambah InChI	10
4. Nama/path file struktur lokal	11
5. Upload struktur molekul	11
4. Nama Proyek.....	11
5. Memilih Program QM	12
6. Memilih Jenis Job	12
Single Point	13
Single Point + Gradient	13
Geometry Optimization	13
Geometry Optimization + Final Gradient.....	13
Frequency Analysis.....	13
Geometry Optimization + Frequency	13
7. Mengatur Charge dan Multiplicity.....	13
Charge	13
Multiplicity	14
8. Memilih Metode Komputasi	14
9. Memilih Basis Set	15
10. Optimizer	16
11. Add-Ons.....	16
IR	17

Thermodynamics	17
UV-Vis.....	17
Raman	17
ΔH_f (g3mp2)	17
NBO	17
12. Cube Grid MEP/HOMO/LUMO	17
13. Toleransi Konvergensi SCF	18
14. DFT Grid Level	18
15. Maksimum Langkah Optimasi.....	19
16. Maksimum Siklus SCF.....	19
17. CPU Threads.....	20
18. GPU	20
19. Memori Maksimum.....	20
20. Density Fitting / RI.....	20
21. Seed Geometri Awal	21
22. Pre-optimasi MMFF94/UFF.....	21
23. Status Backend.....	21
24. Memeriksa Molekul Sebelum Running.....	22
Daftar molekul dan identitas kimia.....	22
25. Visualisasi Struktur 2D dan 3D	23
26. CONTOH PRAKTIK: OPTIMASI MOLEKUL AIR	23
Langkah 1 — Pilih Molekul.....	23
Langkah 2 — Nama Project.....	24
Langkah 3 — Program QM.....	24
Langkah 4 — Job	24
Langkah 5 — Charge dan Multiplicity	24
Langkah 6 — Metode.....	24
Langkah 7 — Basis Set.....	24
Langkah 8 — Optimizer.....	25
Langkah 9 — Add-On	25
Langkah 10 — Parameter Lain	25
27. Menjalankan Perhitungan.....	25

28. Monitor Running	26
Status job	26
29. Menghentikan Job	26
30. Ketika Running Selesai	27
Ringkasan Hasil	27
31. Energi Total	28
32. HOMO dan LUMO	28
33. Momen Dipol	29
34. Struktur Final 3D	29
35. Koordinat	29
36. Geometri Lengkap	30
37. Orbital	30
38. Muatan Mulliken	30
39. Frekuensi	31
40. Add-On	31
41. QSAR/QSPR	32
42. File Struktur dan Gaussian Cube	32
43. Download Hasil	33
44. Folder Job	33
45. Contoh Tahap Lanjutan untuk Water	33
46. Workflow yang Direkomendasikan	34
47. Parameter Minimum yang Harus Dicatat dalam Penelitian	35
48. Ringkasan Penggunaan Cepat	35
PENUTUP	37

TUTORIAL PENGGUNAAN QM KOMPUTASI V2.3.4

Komputasi Jisamsu — PySCF, RDKit, MOPAC, xTB, dan ORCA

([DOWNLOAD QM KOMPUTASI V2.3.4](#))

QM Komputasi V2.3.4 adalah aplikasi komputasi kimia berbasis antarmuka web lokal yang dirancang untuk membantu pengguna melakukan persiapan struktur molekul, perhitungan mekanika kuantum, optimasi geometri, analisis orbital, frekuensi vibrasi, serta berbagai analisis sifat molekul melalui satu antarmuka terpadu.

Tutorial ini **tidak membahas instalasi**. Diasumsikan QM Komputasi V2.3.4 beserta dependensinya telah terpasang dengan benar.

1. Konsep Singkat yang Mendasari QM Komputasi

Kimia kuantum mempelajari struktur dan sifat molekul berdasarkan perilaku elektron dan inti atom. Secara komputasional, struktur molekul yang terdiri atas **jenis atom, koordinat, muatan, dan keadaan spin** diterjemahkan menjadi model mekanika kuantum yang kemudian diselesaikan menggunakan pendekatan numerik.

Secara sederhana, alur perhitungannya dapat digambarkan sebagai:

Struktur molekul → Geometri 3D → Muatan dan spin → Metode QM → Basis set → SCF → Optimasi/Properti → Analisis hasil

Hasil komputasi sangat bergantung pada kombinasi:

- struktur awal;
- charge atau muatan total;
- multiplicity atau keadaan spin;
- metode komputasi;
- basis set;
- kriteria konvergensi;
- jenis job;
- serta backend komputasi yang digunakan.

Karena itu, keberhasilan sebuah job hingga berstatus **Completed** belum otomatis berarti hasilnya benar secara kimia. Struktur, muatan, multiplicity, metode, basis, dan keluaran tetap harus diperiksa secara ilmiah.

QM Komputasi V2.3.4 mempermudah proses tersebut melalui antarmuka Streamlit. **RDKit** digunakan terutama untuk membaca struktur, identitas kimia, konektivitas, visualisasi, pembangunan geometri awal, dan pre-optimalisasi, sedangkan energi serta sifat elektron dihitung menggunakan backend QM yang dipilih.

2. Menjalankan QM Komputasi V2.3.4

Setelah instalasi selesai, buka terminal **WSL/Ubuntu**, kemudian jalankan:

```
app-qm-streamlit-v2.3.4
```

Tunggu hingga terminal menampilkan informasi Streamlit, antara lain:

You can now view your Streamlit app in your browser.

Local URL: `http://localhost:8501`

Network URL: ...

Jangan menutup terminal tersebut selama QM Komputasi masih digunakan.

Selanjutnya buka browser, misalnya Google Chrome, Microsoft Edge, atau Firefox, kemudian masukkan:

`http://localhost:8501`

Halaman utama akan menampilkan judul:



Komputasi Molekul QM: PySCF / Semiempirik / MOPAC / xTB / ORCA

Di sebelah kiri terdapat **sidebar QM KOMPUTASI V2.3.4** yang menjadi pusat konfigurasi seluruh perhitungan.

3. Memahami Sidebar Kiri

Sidebar kiri harus diperiksa dari atas ke bawah sebelum sebuah job dijalankan.

A. Input Molekul

1. Molekul bawaan

Pada bagian:

Molekul bawaan (50 preset + molekul tersimpan)

pengguna dapat memilih satu atau beberapa molekul.

Contoh molekul sederhana yang tersedia antara lain:

Water, Methane, Ethane, Ammonia, Methanol, Ethanol, Acetone, Benzene, Toluene, Phenol, dan berbagai molekul lainnya.

Aplikasi juga menyediakan molekul yang lebih kompleks seperti obat, biomolekul, senyawa alam, dan beberapa kandidat antikanker.

Lebih dari satu molekul dapat dipilih sekaligus sehingga aplikasi dapat menjalankan serangkaian komputasi dalam satu project.

2. Tambah SMILES

Molekul dapat dimasukkan menggunakan SMILES pada bagian:

Tambah SMILES

Gunakan format:

Nama=SMILES

Contoh:

Ethanol=CCO

Acetone=CC(=O)C

Water=O

Satu baris digunakan untuk satu molekul.

Molekul yang ditambahkan melalui fasilitas ini disimpan dalam katalog aplikasi sehingga dapat digunakan kembali pada sesi berikutnya.

3. Tambah InChI

Struktur juga dapat dimasukkan melalui:

Tambah InChI

Format:

Nama=InChI

Contoh:

Water=InChI=1S/H2O/h1H2

Gunakan salah satu metode input untuk molekul yang sama agar struktur tidak dimasukkan berulang.

4. Nama/path file struktur lokal

Jika struktur sudah tersedia sebagai file di komputer, tuliskan alamat file pada:

Nama/path file struktur lokal

Contoh:

```
/home/kasmui/molekul/ethanol.sdf
```

Satu path ditulis pada satu baris.

5. Upload struktur molekul

Struktur juga dapat langsung diunggah melalui:

Upload struktur molekul

Aplikasi dapat membaca format kimia umum seperti:

SDF
MOL
MOL2
PDB
XYZ
SMI/SMILES
InChI/TXT

Format lain dapat dicoba melalui **Open Babel** apabila Open Babel tersedia.

4. Nama Proyek

Pada bagian:

Nama proyek

default aplikasi adalah:

QM_Project

Sebaiknya nama ini diganti dengan nama eksperimen yang mudah dikenali.

Contoh:

WATER_B3LYP_TEST

atau:

ETHANOL_OPTIMIZATION

atau untuk riset:

TAMOXIFEN_DFT_B3LYP

Nama proyek digunakan dalam penamaan folder dan file output sehingga hasil dari eksperimen yang berbeda tidak bercampur.

5. Memilih Program QM

Menu:

Program QM

menentukan mesin komputasi yang akan digunakan.

Tersedia:

Program	Kegunaan utama
PySCF	HF, DFT, MP2 dan berbagai properti elektronik
PySCF Semiempirical	MINDO/3 dan AM1
MOPAC CLI	Metode semiempirik seperti PM3, RM1, PM6, PM7
xTB CLI	GFN0-xTB, GFN1-xTB, GFN2-xTB
ORCA CLI	Backend eksternal HF/DFT dan analisis tertentu

Untuk latihan pertama direkomendasikan:

Program QM = PySCF

6. Memilih Jenis Job

Menu **Job** menentukan pekerjaan yang dilakukan.

Tersedia:

Single Point

Menghitung energi dan properti elektronik pada geometri yang tersedia tanpa mengubah struktur.

Single Point + Gradient

Selain energi, menghitung gradien energi terhadap koordinat atom.

Geometry Optimization

Mencari struktur yang mempunyai energi lebih rendah dengan mengoptimalkan koordinat atom.

Geometry Optimization + Final Gradient

Melakukan optimasi kemudian menghitung gradien pada struktur akhirnya.

Frequency Analysis

Menghitung frekuensi vibrasi pada struktur yang tersedia.

Geometry Optimization + Frequency

Melakukan optimasi geometri terlebih dahulu kemudian menghitung frekuensi vibrasi struktur akhir.

Untuk pengguna baru, pilihan yang sangat baik adalah:

Geometry Optimization

Setelah optimasi berhasil, perhitungan dapat dilanjutkan dengan:

Geometry Optimization + Frequency

untuk mengevaluasi sifat vibrasinya.

7. Mengatur Charge dan Multiplicity

QM Komputasi V2.3.4 menyediakan dua parameter penting:

Charge

Merupakan muatan total molekul.

Contoh:

Netral = 0
Kation = +1
Anion = -1

Multiplicity

Multiplicity ditentukan oleh:

$$2S + 1$$

Secara praktis:

Singlet = 1
Doublet = 2
Triplet = 3

Molekul organik netral closed-shell pada umumnya menggunakan:

Charge = 0
Multiplicity = 1

Di bawahnya terdapat pilihan:

Gunakan Charge & Multiplicity sidebar

Jika dicentang, nilai Charge dan Multiplicity sidebar akan diterapkan sebagai nilai awal pada molekul yang akan dihitung.

Nilai tersebut masih dapat diperbaiki lagi untuk masing-masing molekul pada tabel **Daftar molekul dan identitas kimia**.

Jangan memilih multiplicity hanya berdasarkan nilai default. Keadaan elektronik molekul harus tetap dipertimbangkan.

8. Memilih Metode Komputasi

Jika **Program QM = PySCF**, tersedia berbagai metode.

Untuk penggunaan awal, tiga kelompok penting adalah:

HF

Pendekatan Hartree-Fock tanpa korelasi elektron eksplisit.

DFT

Termasuk antara lain:

PBE
BP86
BLYP
B3LYP
B3LYP-D3BJ
PBE0
PBE0-D3BJ
TPSS
TPSSH
M06-L
M06-2X
CAM-B3LYP
 ω B97X-D3BJ
SCAN

MP2

Metode post-Hartree-Fock untuk memasukkan korelasi elektron pada tingkat perturbasi orde kedua.

Untuk latihan pertama gunakan:

B3LYP

9. Memilih Basis Set

Basis set menentukan fungsi matematis yang digunakan untuk merepresentasikan orbital atom dan molekul.

QM Komputasi V2.3.4 menyediakan lebih dari 20 basis set, mulai dari kecil sampai sangat besar.

Contohnya:

STO-3G
3-21G
6-31G
6-31G*
6-31G**
def2-SV(P)
def2-SVP
def2-SVPD
def2-TZVP
def2-TZVPP
def2-QZVP
cc-pVDZ
cc-pVTZ
cc-pVQZ

aug-cc-pVDZ
aug-cc-pVTZ
...

Default aplikasi adalah:

def2-SVP

Untuk tutorial awal:

B3LYP / def2-SVP

merupakan pilihan yang cukup representatif.

10. Optimizer

Jika memilih Geometry Optimization dengan PySCF, pengguna dapat memilih:

geomeTRIC melalui PySCF
PyBerny melalui PySCF
ASE-BFGS melalui PySCF

Default:

geomeTRIC melalui PySCF

Untuk MOPAC, xTB dan ORCA, aplikasi menggunakan optimizer dari backend tersebut.

Untuk latihan pertama biarkan:

Optimizer = geomeTRIC melalui PySCF

11. Add-Ons

Menu **Add-Ons** digunakan untuk analisis tambahan.

Pilihan yang tersedia meliputi:

None
IR
Thermodynamics
UV-Vis
NMR
Raman
 ΔH_f (g3mp2)
NBO (def2-tzpp)

Perlu diperhatikan bahwa **IR dan Thermodynamics** adalah dua **Add-On** yang berbeda.

IR

Digunakan untuk analisis vibrasi dan spektrum IR.

Thermodynamics

Digunakan untuk memperoleh besaran termokimia.

Jika dipilih, akan muncul pengaturan:

Temperature = 298.15 K
Pressure = 101325 Pa

UV-Vis

Menjalankan analisis keadaan elektronik tereksitasi. Pengguna dapat menentukan:

Jumlah excited states UV-Vis

Default:

20

Raman

Menggunakan jalur ORCA apabila tersedia.

ΔH_f (g3mp2)

Menggunakan adapter Gaussian apabila program terkait tersedia.

NBO

Menggunakan ORCA dan NBO dengan basis **def2-TZPP**.

Untuk latihan pertama gunakan:

Add-Ons = None

12. Cube Grid MEP/HOMO/LUMO

Parameter:

Cube grid MEP/HOMO/LUMO

mengatur resolusi Gaussian cube untuk analisis volumetrik PySCF.

Default:

60

Artinya kurang lebih:

$60 \times 60 \times 60 = 216.000$ titik

Grid yang lebih besar menghasilkan representasi lebih rapat tetapi membutuhkan waktu, memori, dan ruang penyimpanan yang lebih besar.

Untuk penggunaan awal pertahankan:

60

13. Toleransi Konvergensi SCF

Menu:

Toleransi konvergensi SCF

tersedia dari:

1e-3
sampai
1e-10

Default aplikasi:

1e-9

Semakin kecil nilainya, semakin ketat kriteria konvergensinya.

Untuk latihan pertama:

1e-9

dapat dipertahankan.

14. DFT Grid Level

Untuk perhitungan DFT dengan PySCF tersedia:

DFT grid level

dengan rentang:

1 sampai 9

Default:

3

Grid lebih tinggi biasanya meningkatkan ketelitian integrasi numerik tetapi juga meningkatkan biaya komputasi.

Untuk latihan:

Grid level = 3

15. Maksimum Langkah Optimasi

Parameter:

Maksimum langkah optimasi

Default:

100

Jika struktur belum konvergen setelah jumlah langkah tersebut, perlu diperiksa apakah:

- struktur awal kurang baik;
 - sistem terlalu fleksibel;
 - metode tidak cocok;
 - atau kriteria konvergensinya terlalu sulit dicapai.
-

16. Maksimum Siklus SCF

Parameter:

Maksimum siklus SCF

Default:

120

Jika SCF tidak konvergen, jangan langsung menaikkan jumlah siklus secara ekstrem. Periksa pula struktur, charge, multiplicity, metode, dan keadaan elektronik molekul.

17. CPU Threads

Default:

CPU threads = 2

Jumlah ini dapat disesuaikan dengan kemampuan komputer.

Untuk latihan dengan molekul kecil, 2–4 thread umumnya sudah memadai.

Jangan menggunakan seluruh core komputer tanpa mempertimbangkan kebutuhan sistem operasi dan aplikasi lain.

18. GPU

Jika NVIDIA CUDA terdeteksi, sidebar akan menampilkan informasi GPU.

Jika **GPU4PySCF** tersedia, pengguna dapat memilih:

Gunakan GPU4PySCF bila tersedia

Jika GPU atau GPU4PySCF tidak tersedia, PySCF tetap dapat bekerja menggunakan CPU.

19. Memori Maksimum

Default:

4000 MB

Besarnya dapat disesuaikan dengan RAM komputer.

Pastikan tidak menetapkan memori lebih besar daripada kapasitas RAM yang benar-benar tersedia.

20. Density Fitting / RI

Pilihan:

Density fitting / RI (PySCF)

default:

OFF

Fasilitas ini dapat mempercepat beberapa jenis perhitungan.

Untuk tutorial pertama biarkan:

OFF

agar alur komputasi tetap sederhana.

21. Seed Geometri Awal

Default:

20260820

Seed membantu reproduksibilitas pembangunan geometri awal.

Jika eksperimen harus direproduksi dengan prosedur yang sama, sebaiknya nilai seed dicatat dan dipertahankan.

22. Pre-optimasi MMFF94/UFF

Pilihan:

Pre-optimasi MMFF94/UFF untuk input tanpa geometri baik

default:

ON

Fasilitas ini membantu memperbaiki geometri awal sebelum memasuki komputasi QM.

Untuk input dari SMILES atau struktur yang belum memiliki geometri 3D berkualitas baik, fasilitas ini sangat berguna.

23. Status Backend

Di bagian bawah sidebar terdapat:

Status backend pada komputer ini

Contohnya:

- ☒ PySCF
- ☒ PySCF Semiempirical
- ☒ MOPAC CLI
- ☒ xTB CLI
- ☒ ORCA CLI
- ☒ Open Babel
- ☒ GPU/CUDA
- ☒ GPU4PySCF

atau simbol peringatan apabila backend tertentu belum tersedia.

Tidak semua backend harus tersedia untuk menggunakan aplikasi. Jika hanya ingin menjalankan PySCF, yang terpenting adalah backend PySCF tersedia.

24. Memeriksa Molekul Sebelum Running

Setelah molekul dipilih, bagian utama halaman menampilkan:

Daftar molekul dan identitas kimia

Tabel ini berisi:

Pakai
 Nama
 Formula
 SMILES
 InChIKey
 Muatan
 Multiplicitas
 Sumber

Kolom:

Pakai

menentukan apakah molekul ikut dihitung.

Kolom:

Muatan

dan:

Multiplicitas

dapat diedit sebelum job dimulai.

Pastikan informasi tersebut benar.

25. Visualisasi Struktur 2D dan 3D

Sebelum melakukan komputasi, aplikasi menampilkan:

Struktur molekul 2D / 3D

Periksa bentuk molekul.

Pastikan tidak terjadi:

- atom yang salah;
- struktur terfragmentasi tanpa sengaja;
- hidrogen yang tidak sesuai;
- charge salah;
- atau geometri awal yang sangat tidak wajar.

Visualisasi 3D interaktif menggunakan py3Dmol jika paket tersebut tersedia.

26. CONTOH PRAKTIK: OPTIMASI MOLEKUL AIR

Untuk latihan pertama gunakan molekul yang sangat kecil agar proses cepat dan mudah dievaluasi.

Langkah 1 — Pilih Molekul

Pada:

Molekul bawaan

pilih:

Water

Air mempunyai:

Formula	: H ₂ O
Charge	: 0
Multiplicity	: 1
Jumlah atom	: 3

Langkah 2 — Nama Project

Isi:

WATER_B3LYP_TEST

Langkah 3 — Program QM

Pilih:

PySCF

Langkah 4 — Job

Pilih:

Geometry Optimization

Langkah 5 — Charge dan Multiplicity

Masukkan:

Charge = 0

Multiplicity = 1

Untuk memperagakan fasilitas override sidebar, centang:

Gunakan Charge & Multiplicity sidebar

Kemudian periksa kembali nilai tersebut pada tabel molekul.

Langkah 6 — Metode

Pilih:

B3LYP

Langkah 7 — Basis Set

Pilih:

def2-SVP

Langkah 8 — Optimizer

Pilih:

geomeTRIC melalui PySCF

Langkah 9 — Add-On

Gunakan:

None

Langkah 10 — Parameter Lain

Untuk latihan pertama gunakan:

Cube grid	= 60
Toleransi SCF	= 1e-9
DFT grid level	= 3
Maksimum langkah optimasi	= 100
Maksimum siklus SCF	= 120
CPU threads	= 2
Memori maksimum	= 4000 MB
Density fitting	= OFF
Seed geometri awal	= 20260820
Pre-optimasi MMFF94/UFF	= ON

CPU threads dan memori dapat disesuaikan dengan komputer masing-masing.

27. Menjalankan Perhitungan

Setelah seluruh parameter diperiksa, klik:

 **Jalankan Geometry Optimization**

Begitu tombol ditekan, aplikasi membuat snapshot konfigurasi.

Artinya konfigurasi project, metode, basis, job, optimizer, SCF, dan parameter lainnya untuk job tersebut dibekukan.

Perubahan antarmuka setelah proses dimulai tidak digunakan untuk mengubah job yang sudah berjalan.

28. Monitor Running

Saat perhitungan berjalan akan muncul:

Status job

Contohnya:

RUNNING – ...

Di bawahnya terdapat progress bar:

xx.x% – jumlah molekul selesai

Aplikasi juga menunjukkan lokasi folder job.

Selanjutnya tersedia:

Progress log

yang menampilkan baris terakhir dari proses komputasi.

Log ini sangat penting untuk melihat:

- proses pembangunan struktur;
- proses SCF;
- iterasi optimasi;
- backend yang digunakan;
- warning;
- maupun pesan error.

Tersedia pula tombol:

Salin log

untuk menyalin log.

29. Menghentikan Job

Jika diperlukan, tekan:

■ Stop

Stop dirancang agar job dihentikan pada checkpoint yang aman.

Pada PySCF, pemeriksaan penghentian dilakukan selama siklus SCF dan langkah optimasi.

Untuk backend eksternal seperti MOPAC, xTB, dan ORCA, proses eksternal dapat dihentikan melalui mekanisme aplikasi.

Hasil molekul yang sudah selesai sebelum Stop tetap disimpan.

30. Ketika Running Selesai

Jika proses berhasil, akan muncul:

Perhitungan selesai.

Kemudian ditampilkan:

Ringkasan Hasil

Tabel ringkasan dapat berisi:

Proyek
Molekul
Formula
Program
Metode
Basis
Energi (Eh/a.u.)
Energi (eV)
Energi (kJ/mol)
Gap HOMO-LUMO
Dipole vector
Dipole magnitude
Add-On
RMS gradien
Jumlah mode frekuensi
Jumlah frekuensi imajiner

Untuk contoh Water, baris identitasnya akan menunjukkan kurang lebih:

Proyek : WATER_B3LYP_TEST
Molekul : Water
Formula : H2O
Program : PySCF
Metode : B3LYP

Basis : def2-SVP
Charge : 0
Multiplicity: 1

Nilai numerik energi, HOMO, LUMO, gap, dan momen dipol harus dibaca dari hasil running aktual. Jangan mengganti hasil aktual dengan angka contoh dari tutorial.

Perbedaan versi library, geometri awal, parameter numerik, dan prosedur optimasi dapat menghasilkan perbedaan kecil pada nilai komputasi.

31. Energi Total

Aplikasi menampilkan energi dalam beberapa satuan sekaligus:

Hartree / Eh
a.u.
eV
kJ/mol
kcal/mol
cm⁻¹

Energi total terutama digunakan secara ilmiah melalui **perbandingan yang konsisten**.

Jangan membandingkan energi dua molekul yang dihitung menggunakan metode, basis, charge, keadaan spin, atau protokol yang berbeda tanpa alasan metodologis yang jelas.

32. HOMO dan LUMO

Aplikasi menampilkan:

HOMO
LUMO
Gap HOMO-LUMO

HOMO adalah orbital molekul terisi tertinggi.

LUMO adalah orbital molekul kosong terendah.

Gap dihitung dari perbedaan energi LUMO dan HOMO.

Besaran ini sering digunakan sebagai salah satu descriptor untuk membahas sifat elektronik dan reaktivitas, tetapi interpretasinya tetap harus mempertimbangkan metode komputasi yang digunakan.

33. Momen Dipol

Hasil menampilkan:

Dipole X
Dipole Y
Dipole Z
Dipole magnitude

Momen dipol menggambarkan distribusi muatan dalam molekul.

Untuk molekul simetris tertentu nilainya dapat sangat kecil, sedangkan molekul polar akan menunjukkan nilai yang lebih besar.

34. Struktur Final 3D

Tab:

Struktur final 3D

menampilkan struktur hasil akhir setelah optimasi.

Inilah struktur yang harus diperiksa sebelum melakukan analisis lanjutan.

Jangan hanya melihat angka energi.

Periksa apakah:

- bentuk molekul masuk akal;
 - tidak terjadi fragmentasi;
 - tidak terdapat ikatan abnormal;
 - tidak ada distorsi ekstrem;
 - dan konformasi akhir sesuai dengan sistem yang hendak diteliti.
-

35. Koordinat

Tab:

Koordinat

menampilkan koordinat atom struktur akhir.

Data ini dapat digunakan untuk:

- dokumentasi;
 - komputasi berikutnya;
 - pemindahan struktur ke program lain;
 - maupun reproduksi perhitungan.
-

36. Geometri Lengkap

Tab:

Geometri lengkap

menyediakan:

Semua panjang ikatan

Semua sudut ikatan

Semua sudut dihedral

Untuk job optimasi tersedia pula tabel energi dan geometri selama proses optimasi.

Data tersebut dapat diunduh sebagai CSV.

37. Orbital

Tab:

Orbital

menampilkan tabel orbital jika backend menyediakan informasi tersebut.

Di sinilah pengguna dapat memeriksa posisi HOMO, LUMO, energi orbital, dan data terkait lainnya.

38. Muatan Mulliken

Tab:

Muatan Mulliken

menampilkan distribusi muatan atom berdasarkan analisis Mulliken jika tersedia.

Analisis ini dapat membantu mempelajari kecenderungan distribusi elektron, tetapi jangan diperlakukan sebagai satu-satunya definisi muatan atom karena nilai muatan populasi bersifat bergantung pada metode dan basis.

39. Frekuensi

Untuk job yang menyertakan analisis frekuensi, tab:

Frekuensi

akan menampilkan mode vibrasi dalam:

cm^{-1}

Nilai negatif ditandai sebagai:

frekuensi imajiner.

Untuk suatu struktur yang diharapkan merupakan minimum energi, secara umum tidak diharapkan terdapat frekuensi imajiner yang bermakna.

Karena itu optimasi yang akan digunakan untuk analisis termokimia atau spektrum sebaiknya diverifikasi menggunakan analisis frekuensi.

40. Add-On

Tab:

Add-On

menampilkan output tambahan sesuai fitur yang dipilih, misalnya:

- IR;
- Thermodynamics;
- UV-Vis;
- NMR;
- Raman;
- G3MP2;
- NBO.

Jika:

Add-On = None

maka tidak terdapat perhitungan tambahan.

41. QSAR/QSPR

Tab:

QSAR/QSPR

menampilkan descriptor yang dihasilkan dari kombinasi informasi RDKit dan, jika tersedia, descriptor berbasis QM.

Descriptor tersebut dapat digunakan sebagai kandidat variabel untuk:

- QSAR;
- QSPR;
- machine learning;
- analisis kemometrik;
- pengelompokan molekul;
- maupun analisis hubungan struktur–sifat.

Perhitungan descriptor saja belum merupakan model QSAR yang tervalidasi. Dataset, pembagian data, multikolinearitas, domain applicability, dan validasi eksternal tetap harus ditangani secara terpisah.

42. File Struktur dan Gaussian Cube

Tab:

File struktur & cube

menyediakan file:

XYZ
MOL
SDF
PDB

Untuk PySCF aplikasi juga dapat menghasilkan Gaussian cube seperti:

Density
MEP
HOMO
LUMO

Cube dapat digunakan pada program visualisasi yang mendukung Gaussian cube untuk menghasilkan isosurface orbital dan peta potensial elektrostatik.

43. Download Hasil

Setelah job selesai tersedia:

 **Unduh ringkasan CSV**

untuk tabel ringkas seluruh molekul.

Juga tersedia:

 **Unduh seluruh input/output/log (ZIP)**

Fitur ZIP sangat penting karena menyimpan satu paket eksperimen yang dapat berisi konfigurasi, input, output, log, struktur, dan berbagai data hasil.

Untuk keperluan penelitian, simpan ZIP tersebut bersama catatan metode penelitian.

44. Folder Job

Setelah job dibuat, tersedia tombol:

 **Folder job**

dan:

 **Buka folder**

Gunakan fasilitas ini untuk melihat output secara langsung pada sistem file.

Aplikasi membuat folder unik untuk setiap job sehingga hasil suatu eksperimen tidak menimpa job lain.

45. Contoh Tahap Lanjutan untuk Water

Setelah:

```
WATER_B3LYP_TEST
Geometry Optimization
B3LYP/def2-SVP
```

berhasil, lakukan job kedua.

Gunakan project:

WATER_B3LYP_FREQ

kemudian pilih:

```
Program      = PySCF
Job           = Geometry Optimization + Frequency
Charge       = 0
Multiplicity  = 1
Metode       = B3LYP
Basis        = def2-SVP
Optimizer    = geomeTRIC
```

Setelah selesai:

1. periksa apakah optimasi konvergen;
2. buka tab **Frekuensi**;
3. periksa apakah terdapat frekuensi imajiner;
4. periksa struktur final;
5. catat energi akhir;
6. simpan output CSV dan ZIP.

Dengan demikian pengguna tidak hanya memperoleh struktur berenergi rendah, tetapi juga mempunyai pemeriksaan tambahan bahwa struktur tersebut layak diperlakukan sebagai minimum pada level teori yang digunakan.

46. Workflow yang Direkomendasikan

Untuk penggunaan penelitian, gunakan pola:

1. Tentukan pertanyaan penelitian

Misalnya ingin mengetahui geometri, energi relatif, orbital, spektrum, atau descriptor.

2. Pastikan identitas molekul

Periksa formula, SMILES, InChI, protonasi, charge, dan multiplicity.

3. Bangun geometri awal

Gunakan struktur berkualitas baik dan pre-optimasi bila diperlukan.

4. Pilih metode dan basis

Sesuaikan dengan ukuran sistem dan properti yang akan dianalisis.

5. Jalankan uji kecil

Gunakan satu molekul representatif sebelum menghitung seluruh dataset.

6. Periksa konvergensi

Jangan hanya melihat status Completed.

7. Periksa struktur akhir

Pastikan secara kimia masuk akal.

8. Jalankan Frequency bila diperlukan

Terutama untuk verifikasi minimum, IR, dan termokimia.

9. Analisis properti

Energi, HOMO-LUMO, dipol, muatan, MEP, spektrum, dan descriptor lainnya.

10. Arsipkan seluruh hasil

Simpan konfigurasi, log, struktur final, CSV, dan ZIP.

47. Parameter Minimum yang Harus Dicatat dalam Penelitian

Setiap hasil yang akan dimasukkan ke laporan, skripsi, tesis, disertasi, atau artikel sebaiknya mencantumkan sekurang-kurangnya:

nama dan versi software — QM Komputasi V2.3.4; backend komputasi; struktur awal; charge; multiplicity; metode/fungsional; basis set; jenis job; optimizer; toleransi SCF; grid DFT jika digunakan; jumlah langkah optimasi maksimum; model pelarut jika digunakan; Add-On; temperatur dan tekanan untuk termokimia; serta prosedur validasi.

Tanpa metadata tersebut, angka energi atau properti QM sulit direproduksi secara ilmiah.

48. Ringkasan Penggunaan Cepat

Untuk pengguna yang baru pertama kali menjalankan aplikasi:

1. Jalankan:
`app-qm-streamlit-v2.3.4`

2. Buka:
http://localhost:8501
3. Pilih:
Water
4. Nama proyek:
WATER_B3LYP_TEST
5. Program:
PySCF
6. Job:
Geometry Optimization
7. Charge:
0
8. Multiplicity:
1
9. Metode:
B3LYP
10. Basis:
def2-SVP
11. Optimizer:
geomeTRIC melalui PySCF
12. Add-On:
None
13. SCF:
1e-9
14. DFT Grid:
3
15. Klik:
☐ Jalankan Geometry Optimization
16. Pantau:
Status job dan Progress log
17. Setelah selesai periksa:

Energi
HOMO-LUMO
Dipole
Struktur final
Koordinat
Geometri
Orbital
Mulliken
QSAR/QSPR
File output

18. Download:
CSV dan ZIP seluruh job
-

PENUTUP

QM Komputasi V2.3.4 dirancang bukan sekadar untuk membuat komputasi kuantum menjadi lebih mudah ditekan melalui tombol, melainkan untuk menyatukan **struktur kimia, konfigurasi metode, eksekusi komputasi, monitoring, analisis hasil, dan dokumentasi** dalam satu workflow.

Mulailah dari molekul kecil seperti **Water, Methane, Ammonia, Methanol, Ethanol, atau Benzene**. Setelah memahami hubungan antara **struktur → charge/multiplicity → metode → basis → job → hasil**, barulah workflow yang sama diterapkan secara bertahap pada molekul yang lebih besar dan sistem penelitian yang sesungguhnya.

Prinsip terpentingnya adalah:

Job selesai bukan akhir analisis. Hasil komputasi harus diperiksa, divalidasi, dibandingkan secara konsisten, dan disimpan bersama seluruh konfigurasi yang menghasilkan data tersebut.

QM KOMPUTASI V2.3.4 — Komputasi Jisamsu

PySCF • RDKit • MOPAC • xTB • ORCA

- 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

Copyright © Kasmui, 2026. All Rights Reserved.