


SOFTWARE KIMIA KOMPUTASI UNTUK PEMBELAJARAN KIMIA



KASMI

SOFTWARE KIMIA KOMPUTASI UNTUK PEMBELAJARAN KIMIA





Buku ini bebas
didownload untuk dibaca
tetapi **haram hukumnya**
untuk diperjualbelikan
oleh orang bukan penyusun
buku ini.



SOFTWARE KIMIA KOMPUTASI UNTUK PEMBELAJARAN KIMIA

Penulis: KASMUI

Desain Sampul & Penata Letak: KASMUI / Tim Artistik Penerbit

Penerbit: Jaten & Siblings Gang Jaten, Patemon, Gunungpati, Kota Semarang

Informasi Penerbitan: Cetakan I, Edisi Tahun 2026

Pernyataan Hak Cipta & Undang-Undang: Hak Cipta 2026 pada Penulis. Hak Cipta Dilindungi Undang-Undang. Dilarang mengutip, memperbanyak, atau menerjemahkan sebagian atau seluruh isi buku ini tanpa izin tertulis dari Penerbit, kecuali untuk kepentingan tinjauan pustaka atau resensi.

Perpustakaan Nasional RI: Katalog Dalam Terbitan (KDT)

Kasmui Software Kimia Komputasi untuk Pembelajaran Kimia (Edisi I) — Semarang: Jaten & Siblings, 2026. ...; 21 x 29,7 cm

ISBN: 978-623-XXXX-XX-X

1. **Kimia Komputasi**
2. **Kimia — Pembelajaran**
3. **Perangkat Lunak Pendidikan Kimia**

Nomor Klasifikasi DDC: **540.7**

Dicetak oleh Jaten Press

KATA PENGANTAR

Bismillaahirrahmaanirrahiim.

Segala puji bagi Allah SWT, Sang Maha Alim yang telah membentangkan hamparan semesta sebagai laboratorium agung bagi hamba-Nya untuk berpikir, meneliti, dan merenung. Shalat serta salam semoga senantiasa tercurah kepada uswah hasanah kita, Nabi Muhammad SAW, pembawa risalah cahaya yang memotivasi umatnya untuk menuntut ilmu dari ayunan hingga liang lahad.

Buku berjudul "**Software Kimia Komputasi untuk Pembelajaran Kimia**" ini lahir dari sebuah kesadaran mendalam akan pergeseran paradigma sains global. Kita saat ini tidak lagi sekadar berada di ambang, melainkan telah masuk sepenuhnya ke dalam "Paradigma Keempat Sains"—sebuah era di mana penemuan ilmiah digerakkan oleh intensitas data dan kekuatan komputasi. Dalam disiplin kimia, laboratorium basah (*wet lab*) kini telah memiliki mitra strategis yang tak terpisahkan, yaitu laboratorium silikon (*silicon lab*).

Urgensi dan Gap Riset Sejauh ini, literatur mengenai kimia komputasi sering kali terjebak dalam dua kutub ekstrem: terlalu teknis-matematis sehingga sulit dijangkau oleh pembelajar pemula, atau terlalu praktis tanpa memberikan kedalaman filosofis mengenai mekanisme yang terjadi di balik baris-baris kode. Terdapat gap yang nyata dalam penyediaan referensi yang mampu menjembatani metodologi komputasi mutakhir—seperti simulasi dinamika molekuler, metodologi hibrida QM/MM, hingga pemodelan material energi terbarukan—dengan konteks pembelajaran kimia yang bermakna.

Buku ini hadir untuk mengisi ruang kosong tersebut. Penulis berusaha menyajikan materi tidak hanya sebagai panduan teknis operasional perangkat lunak, tetapi sebagai sebuah perjalanan intelektual untuk memahami perilaku materi pada skala atomik.

Kebaruan Ide: Integrasi Sains, Etika, dan Iman Kebaruan utama yang ditawarkan dalam buku ini adalah keberanian untuk mengintegrasikan tiga pilar yang jarang disandingkan dalam satu narasi: kemajuan algoritma komputasi, etika Kecerdasan Buatan (AI), dan refleksi teologis. Di tengah gegap gempita revolusi AI dan ambisi transhumanisme, buku ini mengajak pembaca untuk kembali pada *fitrah* kemanusiaan. Setiap pembahasan teknis mengenai kestabilan molekul atau efisiensi fotokatalis disisipkan dengan narasi *tadabbur* sebagai upaya untuk melihat "tangan" Sang Pencipta di balik keteraturan hukum-hukum mekanika kuantum.

Buku ini disusun sedemikian rupa untuk melayani mahasiswa, peneliti muda, maupun pendidik agar tidak hanya menjadi operator perangkat lunak yang mahir, tetapi juga menjadi ilmuwan yang memiliki kedalaman hati, integritas etis terhadap data, dan kesadaran akan tanggung jawab sebagai *khalifah* di muka bumi.

Ucapan Terima Kasih Penyusunan karya ini tentu tidak lepas dari dukungan berbagai pihak. Penulis menyampaikan apresiasi setinggi-tingginya kepada rekan sejawat, para mahasiswa intelektual yang menjadi inspirasi diskusi, serta tim artistik dari **Penerbit Jaten & Siblings** yang telah membantu mewujudkan naskah ini menjadi sebuah buku yang layak saji. Terima kasih tulus

juga penulis haturkan kepada keluarga tercinta yang menjadi sumber energi dan doa dalam setiap proses penulisan.

Akhir kata, tiada gading yang tak retak. Penulis menyadari bahwa keterbatasan ilmu manusia senantiasa menyisakan ruang bagi penyempurnaan. Kritik, saran, dan masukan konstruktif sangat diharapkan demi perbaikan karya ini di masa depan. Semoga buku ini menjadi amal jariyah yang bermanfaat dan menjadi wasilah bagi kemajuan pendidikan kimia di Indonesia.

Selamat membaca dan menjelajahi cakrawala baru kimia komputasi.

Semarang, April 2026

KASMUI

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR	4
DAFTAR ISI.....	6
BAB 1: PENGENALAN KIMIA KOMPUTASI DALAM ERA DIGITAL	12
1.1 Evolusi Kimia Komputasi dalam Pendidikan	12
1.1.1 Sejarah Perkembangan Komputasi Kimia	12
1.1.2 Pergeseran Paradigma Pembelajaran Kimia.....	12
1.1.3 Integrasi Teknologi dan Kurikulum Makmal	13
1.2 Konsep Dasar Pemodelan Molekul.....	13
1.2.1 Analisis Mekanik Kuantum vs Mekanik Molekular.....	13
1.2.2 Representasi Submikroskopik dalam Kefahaman Kimia	14
1.2.3 Validiti dan Kebolehpercayaan Model Teori	15
1.3 Manfaat Pedagogik Makmal Maya (Virtual Laboratory)	15
1.3.1 Visualisasi Konsep Kuantum yang Abstrak	16
1.3.2 Kecekapan Kos dan Keselamatan Makmal Fizikal	16
1.3.3 Peningkatan Penglibatan dan Kognitif Pelajar	16
1.4 Perisian Sumber Terbuka (Open Source) vs Komersial.....	17
1.4.1 Analisis Kebolehcapaian dan Pembiayaan	17
1.4.2 Sokongan Komuniti dan Ekosistem Perisian.....	18
1.4.3 Kajian Kes: Penggunaan dalam Institusi Pengajian Tinggi.....	18
1.5 Rangka Kerja Buku dan Panduan Penggunaan	19
1.5.1 Objektif dan Sasaran Pembaca	19
1.5.2 Metodologi Penerapan Perisian dalam Bilik Darjah	20
1.5.3 Pemetaan Bab terhadap Silibus Kimia Fizik	20
DAFTAR PUSTAKA BAB 1	21
BAB 2: ASAS PEMODELAN 3D DENGAN AVOGADRO.....	23
2.1 Pengenalan kepada Ekosistem Avogadro	23
2.1.1 Falsafah Reka Bentuk dan Aksesibiliti.....	23
2.1.2 Pemasangan dan Konfigurasi Antara Muka Pengguna	23
2.1.3 Menavigasi Ruang Kerja 3D dan Kesedaran Spasial	24

2.2 Teknik Melukis Struktur Molekul.....	25
2.2.1 Pembinaan Rangka Molekul Organik Ringkas	25
2.2.2 Manipulasi Parameter: Panjang Ikatan dan Sudut.....	26
2.2.3 Pembinaan Makromolekul dan Polimer Termaju.....	26
2.3 Pengoptimuman Geometri Awal.....	27
2.3.1 Memahami Konsep Permukaan Minimum Tenaga (PES)	27
2.3.2 Aplikasi Medan Daya (Force Fields): UFF dan MMFF94.....	28
2.3.3 Algoritma Penurunan Curam (Steepest Descent).....	28
2.4 Analisis Sifat Struktur Lanjutan.....	29
2.4.1 Penentuan Sudut Dihedral dan Konformasi	29
2.4.2 Visualisasi Permukaan (Surface Visualization)	30
2.4.3 Pemetaan Potensi Elektrostatik (MEP).....	31
2.5 Penyediaan Fail Input untuk Enjin Komputasi	32
2.5.1 Sintaks Format Fail (.xyz, .mol, .inp).....	32
2.5.2 Interoperabiliti Bersepadu dengan ORCA dan Gaussian	32
2.5.3 Penyelesaian Ralat Awalan (Troubleshooting)	33
DAFTAR PUSTAKA BAB 2	34
BAB 3: EKSPLORASI ANTARA MUKA GABEDIT.....	36
3.1 Seni Bina dan Fungsionaliti Gabedit.....	36
3.1.1 Peranan sebagai GUI (Graphical User Interface) Sejangat	36
3.1.2 Keceragaman Silang dengan Pelbagai Enjin Komputasi	36
3.1.3 Pengurusan Projek Komputasi yang Efisien	37
3.2 Pembinaan Geometri Terstruktur	38
3.2.1 Penggunaan Templat Struktur dan Serpihan (Fragments).....	38
3.2.2 Pembangunan Molekul Tiga Dimensi yang Kompleks.....	39
3.2.3 Pemakaian dan Analisis Kumpulan Titik Simetri (Point Group Symmetry)	39
3.3 Penyesuaian Fail Input Komputasi.....	40
3.3.1 Sintaks dan Kata Kunci (Keywords) Spesifik	40
3.3.2 Kriteria Pemilihan Basis Set dan Metodologi	41
3.3.3 Pengurusan Pekerjaan (Job Management) Tempatan dan Pelayan	41
3.4 Visualisasi Pasca Komputasi.....	42

3.4.1 Ekstraksi Data dari File Output (.out / .log)	42
3.4.2 Visualisasi Orbital Molekul (HOMO-LUMO).....	43
3.4.3 Pemetaan Kerapatan Elektron Terperinci (MEP).....	43
BAB 4: PERHITUNGAN <i>AB INITIO</i> DAN DFT DENGAN ORCA	44
4.1 Kerangka Teori Sistem ORCA.....	44
4.1.1 Dasar Metodologi <i>Ab Initio</i>	44
4.1.2 Teori Fungsional Kerapatan (DFT): Pendekatan Modern	45
4.1.3 Anatomi Blok Input Perangkat Lunak ORCA.....	46
4.2 Optimasi Geometri dan Dinamika Pencarian.....	46
4.2.1 Kriteria Konvergensi (Convergence Criteria) SCF	47
4.2.2 Analisis Energi Titik Tunggal (Single Point Energy)	47
4.2.3 Algoritma Pencarian Keadaan Transisi (Transition State).....	48
4.3 Analisis Termokimia Kuantitatif.....	49
4.3.1 Ekstraksi Energi Bebas Gibbs dan Fungsi Partisi	49
4.3.2 Perhitungan Entalpi Reaksi Mutlak.....	50
4.3.3 Pemodelan Efek Pelarut (Solvation Models).....	50
4.4 Spektroskopi Komputasi Tingkat Lanjut	51
4.4.1 Prediksi Pergeseran Kimia Resonansi Magnetik Inti (NMR)	51
4.4.2 Dampak Multiplisitas Spin dan Spektroskopi Resonansi Paramagnetik Elektron (EPR/ESR).....	52
4.4.3 Spektroskopi UV-Vis, Eksitasi Vertikal, dan Kekuatan Osilator Kuantum.....	53
4.5 Transformasi ORCA dalam Modul Akademik	54
4.5.1 Rancang Bangun Eksperimen Kuantum Maya.....	54
4.5.2 Perbandingan Galat Sistematis: Teori vs Eksperimen.....	54
4.5.3 Pembelajaran Berbasis Masalah (PBL) dalam Kinetika Kimia.....	55
DAFTAR PUSTAKA BAB 4	56
BAB 5: PENGUASAAN HYPERCHEM DALAM LABORATORIUM VIRTUAL	57
5.1 Ekosistem Pemodelan HyperChem.....	57
5.1.1 Integrasi Ruang Kerja dan Alat Menggambar	57
5.1.2 Kapabilitas Modul Komersial vs Akademik	57
5.1.3 Navigasi Penjajaran dan Transformasi Molekul	58

5.2 Mekanika Molekul dan Metode Semi-Empiris	59
5.2.1 Evaluasi Kinerja Metode AM1 dan PM3	59
5.2.2 Keterbatasan Pendekatan Semi-Empiris.....	59
5.2.3 Skala Pemodelan Biomolekul Organik Besar	60
5.3 Dinamika Molekuler (<i>Molecular Dynamics</i>)	61
5.3.1 Kontrol Suhu dan Energi Kinetik Termodinamika.....	61
5.3.2 Evolusi Waktu dan Analisis Trajektori	61
5.3.3 Algoritma <i>Simulated Annealing</i> (Pemanasan dan Pendinginan Bertahap)	62
5.4 Analisis Interaksi Antarmolekul.....	63
5.4.1 Dinamika Pembentukan Ikatan Hidrogen.....	63
5.4.2 Studi Kasus Solvasi: Air dan n-Metilasetamida.....	63
5.4.3 Konfigurasi Syarat Batas Periodik (Periodic Boundary Conditions / PBC)	64
5.5 Penyelidikan Keadaan Elektronik Tereksitasi.....	65
5.5.1 Mekanisme Interaksi Konfigurasi (<i>Configuration Interaction</i>)	65
5.5.2 Perbedaan Energi Eksitasi Vertikal dan Adiabatik.....	66
5.5.3 Aplikasi Praktis dalam Sains Fotokimia.....	66
DAFTAR PUSTAKA BAB 5	67
BAB 6: GAUSSIAN DAN GAUSSVIEW UNTUK ANALISIS KOMPREHENSIF.....	68
6.1 Struktur Interaksi Gaussian-GaussView	68
6.1.1 Model Eksekusi <i>Client-Server</i>	68
6.1.2 Anatomi Perintah File Input (.gjf / .com).....	69
6.1.3 Peran Perintah Link 0 dan Bagian Rute (<i>Route Section</i>).....	69
6.2 Taksonomi Set Basis (<i>Basis Sets</i>) Terperinci.....	70
6.2.1 Fungsi Gaussian Tipe-Slater (STO-nG)	71
6.2.2 Set Basis Valensi-Terbelah (<i>Split-Valence 6-31G</i> dan Variannya).....	71
6.2.3 Fungsi Polarisasi dan Fungsi Difusi (<i>Diffuse Functions</i>).....	72
6.3 Eksplorasi Permukaan Energi Potensial (PES).....	73
6.3.1 Metodologi Pemindaian Koordinat (<i>Coordinate Scan</i>).....	73
6.3.2 Identifikasi Puncak Titik Pelana (<i>Saddle Points</i>).....	74
6.3.3 Pemetaan Jalur Reaksi Intrinsik (IRC).....	74
6.4 Pendekatan Orbital Ikatan Natural (Natural Bond Orbital / NBO).....	75

6.4.1 Dinamika Donasi Elektron Kuantum	75
6.4.2 Analisis Hiperkonjugasi terhadap Kestabilan Molekul	76
6.4.3 Visualisasi Interaksi Kerapatan Orbital (NBO/NRT).....	76
6.5 Pedagogi Termodinamika Komputasi.....	77
6.5.1 Ketepatan Kalkulasi Entalpi Pembentukan	77
6.5.2 Studi Kasus: Entalpi Turunan Alkil Tiofena	78
6.5.3 Analisis Perbandingan Pendekatan Hartree-Fock dan DFT	78
DAFTAR PUSTAKA BAB 6	79
BAB 7: PLATFORM WEB DAN AKSES LABORATORIUM AWAN (CHEMCOMPUTE & JMOL).....	81
7.1 Paradigma Komputasi Awan dalam Kimia.....	81
7.1.1 Demokratisasi Akses melalui ChemCompute dan NWChem	81
7.1.2 Pengurangan Ketergantungan Perangkat Keras Lokal	81
7.1.3 Keamanan dan Manajemen Data Daring.....	82
7.2 Visualisasi Interaktif Lanjutan dengan Jmol dan JSmol	83
7.2.1 Transisi Arsitektur dari Java ke HTML5 (JSmol).....	83
7.2.2 Manipulasi Biomolekuler dari Pangkalan Data Publik	83
7.2.3 Literasi Logika melalui Bahasa Skrip (<i>Scripting</i>) Jmol	84
7.3 Integrasi Basis Data Kimia Publik (PubChem dan PDB)	85
7.3.1 PubChem dan Arsitektur Senyawa Berbobot Molekul Rendah	85
7.3.2 <i>Protein Data Bank</i> (PDB) sebagai Pustaka Makromolekul Struktural	85
7.3.3 Filosofi Akses Terbuka (<i>Open Access</i>) dan Demokratisasi Pengetahuan	86
7.4 Aplikasi Penambatan Molekuler (<i>Molecular Docking</i>) Berbasis Web.....	87
7.4.1 Transisi Algoritma ke Peladen Web (Studi Kasus: SwissDock).....	87
7.4.2 Penentuan Ruang Pencarian (<i>Grid Box</i>) dan Algoritma Pencarian	87
7.4.3 Fungsi Penilaian (<i>Scoring Function</i>) dan Afinitas Termodinamika.....	88
7.5 Sinergi Masa Depan: Pembelajaran Mesin (AI) di Awan.....	89
7.5.1 Jaringan Saraf Tiruan untuk Prediksi Termodinamika.....	89
7.5.2 Desain Obat Generatif dan Revolusi AlphaFold	89
7.5.3 Ruang Kimia Kosong dan Keterbatasan Ilmu Pengetahuan Manusia	90
DAFTAR PUSTAKA BAB 7	91

BAB 8: OTOMATISASI DAN PEMROGRAMAN PYTHON DALAM KIMIA KOMPUTASI	93
8.1 Ekosistem Python sebagai Penggerak Otomatisasi (<i>Automation Engine</i>)	93
8.1.1 Arsitektur Otomatisasi Alur Kerja (<i>Workflow Pipeline</i>)	93
8.1.2 Pustaka (<i>Libraries</i>) Fundamental: cclib dan RDKit	94
8.1.3 Kesadaran Algoritmik dan Keteraturan Sunnatullah	94
8.2 Analisis Data Spektroskopi dan Termodinamika dengan Python	95
8.2.1 Ekstraksi dan Visualisasi Spektrum (UV-Vis dan IR)	95
8.2.2 Pemrosesan Massal Termodinamika Molekuler (Pandas DataFrames)	95
8.2.3 Jupyter Notebook sebagai Jurnal Laboratorium Interaktif	96
8.3 Pembelajaran Mesin dan Kecerdasan Buatan untuk Kimia Prediktif	97
8.3.1 Representasi Molekuler: Transformasi Struktur menjadi Vektor Angka	97
8.3.2 Pemodelan QSAR Tradisional dengan Pustaka <i>Scikit-Learn</i>	97
8.3.3 Pembelajaran Mendalam (<i>Deep Learning</i>) dan Jaringan Graf	98
8.3.4 Refleksi Filosofis: "Nama-Nama" (Sifat) di Balik Struktur Materi	98
8.4 Membangun Antarmuka Grafis (GUI) Mandiri dengan Python	99
8.4.1 Kerangka Kerja GUI: Dari Tkinter hingga PyQt	99
8.4.2 Integrasi Visualisasi Molekuler Tiga Dimensi (<i>py3Dmol</i>)	100
8.4.3 Distribusi Perangkat Lunak dan Demokratisasi Akses	100
8.5 Masa Depan Kimia Komputasi dan Etika Pemodelan	101
8.5.1 Fajar Komputasi Kuantum (<i>Quantum Computing</i>)	101
8.5.2 Sindrom "Kotak Hitam" dan Prinsip GIGO	101
8.5.3 Etika Pemodelan dan Pertanggungjawaban Ilmu	102
DAFTAR PUSTAKA BAB 8	103
GLOSARIUM	105
LAMPIRAN 1 CHEMCOMPUTE.ORG	113

BAB 1: PENGENALAN KIMIA KOMPUTASI DALAM ERA DIGITAL

1.1 Evolusi Kimia Komputasi dalam Pendidikan

Transformasi pendidikan sains, khususnya kimia fisik dan struktur molekul, tidak dapat dilepaskan dari lintasan sejarah perkembangan teknologi komputasi itu sendiri. Integrasi komputasi ke dalam kurikulum bukan sekadar substitusi alat bantu, melainkan sebuah pergeseran epistemologis dalam cara pengetahuan kimia diproduksi, divalidasi, dan ditransmisikan.

1.1.1 Sejarah Perkembangan Komputasi Kimia

Akar dari kimia komputasi tertanam kuat pada dekade 1920-an ketika Erwin Schrödinger dan Paul Dirac merumuskan dasar-dasar mekanika kuantum. Namun, seperti yang diprediksi oleh Dirac pada tahun 1929, persamaan matematis yang mendasari perilaku sistem multi-elektron terlalu kompleks untuk diselesaikan secara analitik. Disrupsi nyata baru terjadi pasca Perang Dunia II dengan hadirnya komputer digital generasi pertama. Dekade 1970-an menandai tonggak penting ketika John Pople merilis versi perdana perangkat lunak Gaussian (Gaussian 70), yang mendemokratisasi perhitungan *ab initio* bagi para ahli kimia (Cramer, 2013).

Dalam konteks akademik, dekade 1990-an hingga 2000-an memperlihatkan transisi perangkat lunak dari instrumen riset elitis menjadi alat bantu instruksional. Munculnya Teori Fungsional Kerapatan (Density Functional Theory/DFT) yang lebih efisien secara komputasional dibandingkan metode Hartree-Fock (HF) pasca-korelasi, serta perkembangan perangkat lunak visualisasi grafis (GUI) seperti GaussView dan HyperChem, memungkinkan pemodelan termokimia yang sangat presisi (seperti perhitungan entalpi pembentukan derivatif alkil tiofena pada suhu 298.15 K) dapat dilakukan bahkan menggunakan komputer personal (Koch & Holthausen, 2001; Nikoofard, 2015).

1.1.2 Pergeseran Paradigma Pembelajaran Kimia

Hadirnya kimia komputasi memicu dekonstruksi terhadap "Segitiga Johnstone" (Johnstone's Triangle)—sebuah model pedagogik klasik yang membagi pemahaman kimia ke dalam domain makroskopik, submikroskopik, dan simbolik (Johnstone, 1991). Secara historis, pendidik kesulitan menjembatani observasi makroskopik (misalnya, perubahan warna atau pelepasan kalor) dengan realitas submikroskopik (pergerakan elektron, pemutusan ikatan).

Kimia komputasi bertindak sebagai jembatan kognitif definitif. Melalui representasi tiga dimensi interaktif yang dihasilkan oleh perangkat lunak seperti Avogadro atau Jmol, sifat-sifat abstrak seperti permukaan potensial elektrostatik (Molecular Electrostatic Potential/MEP), bentuk orbital molekul (HOMO-LUMO), dan dinamika keadaan transisi (transition states) kini beralih dari sekadar ilustrasi statis di buku teks menjadi entitas dinamis yang dapat dimanipulasi secara *real-*

time oleh mahasiswa (Lewars, 2016). Paradigma bergeser dari transmisi pengetahuan pasif menuju pembelajaran konstruktivis yang berpusat pada inkuiri saintifik.

1.1.3 Integrasi Teknologi dan Kurikulum Makmal

Integrasi arsitektur komputasi ke dalam silabus makmal (laboratorium) melahirkan konsep *Virtual Laboratory* atau makmal maya. Implementasi ini bukan bertujuan untuk mengeliminasi kemampuan motorik di laboratorium basah (wet lab), melainkan menciptakan kerangka *blended learning* yang komprehensif. Berdasarkan kerangka kerja TPACK (Technological Pedagogical Content Knowledge), pengajar kimia dituntut untuk mampu mensinergikan konten materi (seperti kinetika reaksi atau mekanika molekular AM1/PM3) dengan instrumen teknologi yang tepat (Mishra & Koehler, 2006).

Sebagai contoh, mahasiswa kini dapat melakukan eksperimen *in silico* untuk meramalkan spektrum Inframerah (IR) dan Resonansi Magnetik Nuklear (NMR) suatu senyawa yang belum disintesis. Sebelum masuk ke makmal basah untuk melakukan reaksi organik berbahaya atau mahal, mereka menggunakan *software* ORCA atau Gaussian melalui antarmuka Gabedit untuk menghitung parameter termodinamika (ΔG , ΔH) dan menganalisis sterik konformasi (Foresman & Frisch, 2015). Pendekatan ini secara drastis meningkatkan kecekapan analisis, menekan biaya pengadaan reagen, mengoptimalkan manajemen keselamatan laboratorium, dan memberikan fondasi kognitif yang kokoh sebelum eksperimen empiris dilakukan.

1.2 Konsep Dasar Pemodelan Molekul

Pemodelan molekul merupakan manifestasi dari upaya manusia untuk mengkuantifikasi dan memvisualisasikan entitas mikroskopik yang tidak dapat dijangkau oleh panca indera secara langsung. Dalam konteks pendidikan dan riset kimia modern, pemodelan ini bukan sekadar representasi artistik, melainkan konstruksi matematis dan fisika yang ketat untuk mensimulasikan geometri, profil energi, dan reaktivitas suatu molekul. Pemahaman yang mendalam mengenai konsep dasar ini merupakan prasyarat mutlak sebelum pendidik atau mahasiswa menggunakan perangkat lunak seperti Gaussian, ORCA, atau HyperChem, guna mencegah terjadinya sindrom *garbage in, garbage out*—di mana pengguna hanya memasukkan data tanpa memahami rasionalisasi teoretis di balik algoritma yang berjalan.

1.2.1 Analisis Mekanik Kuantum vs Mekanik Molekular

Secara arsitektural, metode komputasi dalam pemodelan molekul terbagi menjadi dua kutub utama: Mekanika Kuantum (Quantum Mechanics/QM) dan Mekanika Molekular (Molecular Mechanics/MM). Pemilihan antara kedua metode ini sangat bergantung pada ukuran sistem molekul yang dikaji dan tingkat akurasi termodinamik yang dibutuhkan (Cramer, 2013).

Mekanika Kuantum berlandaskan pada prinsip dasar fisika subatomik, secara spesifik berupaya mencari penyelesaian bagi Persamaan Schrödinger ($H\Psi = E\Psi$). Pendekatan QM, yang mencakup metode *ab initio* (seperti Hartree-Fock) dan Teori Fungsional Kerapatan (Density Functional Theory/DFT), memandang molekul sebagai sekumpulan inti atom dan elektron yang saling

berinteraksi. Metode ini secara eksplisit memperhitungkan struktur elektronik, pertukaran elektron, dan efek korelasi. Keunggulan absolut dari QM adalah kemampuannya memodelkan pemutusan dan pembentukan ikatan kimia, serta menghitung properti elektronik seperti keadaan transisi (transition states) dan afinitas elektron. Namun, beban komputasinya sangat eksponensial; algoritma Hartree-Fock standar memiliki skala komputasi N^4 (di mana N adalah jumlah fungsi basis), sehingga QM umumnya terbatas pada sistem molekul kecil hingga menengah (sekitar ratusan atom) (Jensen, 2017).

Sebaliknya, Mekanika Molekular mengabaikan eksistensi elektron secara eksplisit. MM mengadopsi prinsip fisika klasik (Hukum Newton dan Hukum Hooke), di mana molekul direpresentasikan sebagai model "bola dan pegas". Atom diasumsikan sebagai bola dengan massa tertentu (titik pusat massa), sedangkan ikatan kimia direpresentasikan sebagai pegas dengan tetapan gaya spesifik. Parameter-parameter interaksi ini—mencakup regangan ikatan, tekukan sudut, torsi dihedral, serta interaksi non-kovalen (Van der Waals dan elektrostatik)—dikompilasi ke dalam apa yang disebut sebagai Medan Gaya (Force Field), seperti AMBER, CHARMM, atau MMFF94 (Leach, 2001). Pendekatan ini sangat efisien secara komputasional, memungkinkan simulasi dinamika molekul (Molecular Dynamics/MD) untuk sistem raksasa yang melibatkan jutaan atom, seperti protein, DNA, dan sistem pelarut berkala. Keterbatasan utama MM adalah ketidakmampuannya memodelkan reaksi kimia (perubahan konektivitas ikatan) dan ketergantungannya yang tinggi pada parameter empiris.

1.2.2 Representasi Submikroskopik dalam Kefahaman Kimia

Dalam dimensi pedagogik, pemodelan molekul berfungsi sebagai instrumen kognitif untuk memecahkan hambatan abstraksi dalam ilmu kimia. Kesulitan fundamental mahasiswa dalam mempelajari kimia fisik atau kimia organik sering kali bermuara pada rendahnya kapasitas memori kerja (working memory) saat harus memanipulasi objek 3D dalam ruang mental (spatial ability) (Tasker & Dalton, 2006).

Representasi submikroskopik yang difasilitasi oleh perangkat lunak visualisasi (seperti GaussView, Avogadro, atau Jmol) mengubah data numerik matriks dari hasil *output* komputasi menjadi model heuristik visual. Sebagai contoh, konsep elektronegativitas dan polaritas yang bersifat konseptual dapat ditransformasikan menjadi visualisasi Permukaan Potensial Elektrostatik (Molecular Electrostatic Potential/MEP). Melalui pemetaan gradien warna (merah untuk daerah kaya elektron, biru untuk daerah miskin elektron), mahasiswa dapat memprediksi sisi serangan nukleofilik atau elektrofilik secara intuitif (Wu, Krajcik, & Soloway, 2001).

Lebih jauh, representasi dinamis seperti animasi frekuensi vibrasi normal (stretching, bending, rocking) yang dihitung pada tingkat teori inframerah (IR) memberikan justifikasi ontologis bagi mahasiswa bahwa molekul bukanlah entitas yang statis, melainkan sistem yang terus bergetar pada tingkat energi nol (zero-point energy). Pengalaman spasial dan visual ini terbukti secara empiris mampu menurunkan beban kognitif (extraneous cognitive load) dan mengarahkan fokus pembelajar pada pembentukan skema konseptual yang lebih solid (Sweller, Ayres, & Kalyuga, 2011).

1.2.3 Validiti dan Kebolehpercayaan Model Teori

Setiap model matematis dalam kimia komputasi pada hakikatnya adalah pendekatan (approximation) terhadap realitas fisika yang sesungguhnya. Prinsip fundamental dalam kimia teoretik menyatakan bahwa satu-satunya sistem yang dapat diselesaikan secara analitik (eksak) menggunakan persamaan Schrödinger hanyalah atom hidrogen; sistem yang lebih kompleks membutuhkan serangkaian asumsi, seperti Aproksimasi Born-Oppenheimer yang memisahkan pergerakan inti yang masif dari pergerakan elektron yang sangat cepat.

Oleh karena itu, validitas dan kebolehpercayaan (*reliability*) sebuah model komputasi wajib diuji silang (benchmarking) dengan data termodinamika atau spektroskopi eksperimental. Pemilihan *basis set* (seperti 6-31G(d,p) atau def2-TZVP) serta fungsional kerapatan (seperti B3LYP, M06-2X, atau ω B97XD) tidak boleh dilakukan secara arbitrer, melainkan harus didasarkan pada justifikasi literatur terdahulu yang telah memvalidasi akurasi terhadap set data standar (misalnya kumpulan data termokimia G3/99) (Grimme et al., 2010).

Kesadaran akan limitasi dari setiap teori *ab initio* dan semi-empiris ini membawa ilmuwan pada pemahaman filosofis yang mendalam tentang relativitas sains. Betapapun majunya algoritma dan infrastruktur superkomputer kuantum yang dikembangkan manusia untuk memetakan arsitektur molekul, kebenaran absolut dari realitas mikroskopik tersebut tetap menjadi rahasia yang teramat kompleks. Hal ini merupakan sebuah keniscayaan epistemologis yang telah ditegaskan dalam epistemologi Islam, bahwa hakikat pengetahuan manusia hanyalah representasi kecil dari semesta ilmu Tuhan. Allah SWT berfirman:

وَيَسْأَلُونَكَ عَنِ الرُّوحِ قُلِ الرُّوحُ مِنْ أَمْرِ رَبِّي وَمَا أُوتِيتُمْ مِنَ الْعِلْمِ إِلَّا قَلِيلًا

“Dan mereka bertanya kepadamu tentang roh. Katakanlah: ‘Roh itu termasuk urusan Tuhanku, dan tidaklah kamu diberi pengetahuan melainkan sedikit’.” (QS. Al-Isra' [17]: 85).

Walaupun ayat ini secara spesifik merujuk pada roh, para mufasir modern dan pemikir sains Islam seperti Tantawi Jauhari memperluas makna *ar-ruh* dan *al-'ilm* pada batasan absolut rasio manusia dalam memahami fenomena tak kasat mata (ghaib secara fisika maupun metafisika), termasuk pergerakan fungsi gelombang elektronik di alam subatomik (Jauhari, 1933). Sains komputasi, dengan demikian, merupakan bentuk ikhtiar intelektual (ijtihad saintifik) yang valid untuk mendekati kebenaran empiris, namun ia harus tetap tunduk pada kesadaran akan "keterbatasan" (*approximation*) itu sendiri.

1.3 Manfaat Pedagogik Makmal Maya (Virtual Laboratory)

Eksistensi perangkat lunak kimia komputasi tidak hanya merevolusi cara ilmuwan melakukan riset di tingkat industri dan pascadoktoral, tetapi juga menawarkan disrupti pedagogik yang masif melalui konsep Makmal Maya (*Virtual Laboratory*). Makmal maya dalam konteks kimia komputasi didefinisikan sebagai ekosistem simulasi interaktif di mana pelajar dapat memanipulasi parameter molekuler, menjalankan eksperimen teoretis, dan mengamati hasil termodinamika atau kinetika tanpa memerlukan reagen fisik (Tatli & Ayas, 2013). Integrasi makmal maya ini memberikan tiga manfaat fundamental dalam lanskap pendidikan sains modern.

1.3.1 Visualisasi Konsep Kuantum yang Abstrak

Tantangan terbesar dalam pendidikan kimia fisik dan mekanika kuantum adalah tingginya tingkat abstraksi. Konsep-konsep seperti probabilitas penemuan elektron, hibridisasi, degenerasi orbital, dan keadaan eksitasi fotokimia sering kali tidak dapat diamati secara makroskopik (Tuvi-Arad & Blonder, 2010). Mahasiswa kerap mengalami miskonsepsi karena buku teks konvensional hanya mampu menyajikan diagram dua dimensi yang statis.

Melalui makmal maya yang digerakkan oleh mesin seperti Gaussian atau ORCA dan divisualisasikan oleh GaussView atau Avogadro, sifat-sifat gelombang tak kasat mata ini diterjemahkan menjadi representasi grafis tiga dimensi yang interaktif. Sebagai contoh, saat mempelajari Teori Orbital Molekul (MOT), pelajar tidak lagi sekadar menghafal diagram tingkat energi. Mereka dapat membangun molekul etilena (C_2H_4), melakukan komputasi *single-point energy*, dan memvisualisasikan secara langsung bentuk lobus dari orbital HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) dan LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*). Mereka dapat memutar molekul tersebut pada sumbu X-Y-Z untuk memahami simetri ikatan π dan π^* . Visualisasi interaktif ini membuktikan secara *in silico* eksistensi simpul (*node*) di mana probabilitas elektron adalah nol, sebuah konsep yang sebelumnya murni teoretis dalam ruang kelas (Lewars, 2016).

1.3.2 Kecekapan Kos dan Keselamatan Makmal Fizikal

Dari perspektif managerial dan etika lingkungan, penyelenggaraan laboratorium kimia fisik yang komprehensif menuntut anggaran yang sangat besar untuk pengadaan instrumen spektroskopi (seperti NMR, IR, UV-Vis), bahan kimia berkaliber analitis (PA), serta pengelolaan limbah bahan berbahaya dan beracun (B3). Bagi banyak institusi pendidikan di negara berkembang, keterbatasan infrastruktur ini menjadi penghambat utama dalam pelaksanaan eksperimen tingkat lanjut.

Makmal maya komputasi memberikan solusi efisiensi kos (biaya) yang radikal. Dengan bermodalkan perangkat keras komputer standar dan perangkat lunak *open-source* (seperti Gabedit, Jmol, dan ORCA), institusi dapat menyelenggarakan ratusan eksperimen maya dengan presisi yang dapat dikalibrasi (Dalgarno et al., 2009). Lebih jauh lagi, makmal maya mengeliminasi risiko keselamatan secara absolut. Mahasiswa dapat mensimulasikan reaksi eksotermis ekstrem, reaksi yang melibatkan gas beracun (seperti karbon monoksida atau fosgen), atau memodelkan mekanisme reaksi katalis logam transisi langka tanpa risiko ledakan, keracunan, atau degradasi lingkungan. Ini sangat selaras dengan prinsip pertama *Green Chemistry* (Kimia Hijau), yaitu pencegahan limbah pada sumbernya (Anastas & Warner, 1998).

1.3.3 Peningkatan Penglibatan dan Kognitif Pelajar

Berdasarkan Teori Beban Kognitif (*Cognitive Load Theory*), pembelajaran konsep sains yang kompleks sering kali membebani kapasitas memori kerja (*working memory*) mahasiswa, terutama

jika mereka harus memproses persamaan matematis rumit sekaligus membayangkan struktur spasial 3D secara bersamaan. Makmal maya mengambil alih beban komputasi matematis tersebut (melalui algoritma *ab initio* atau DFT yang berjalan di latar belakang), sehingga mahasiswa dapat mengalokasikan kapasitas kognitif mereka sepenuhnya untuk analisis konseptual dan pemecahan masalah (Makransky, Terkildsen, & Mayer, 2019).

Proses ini mendorong pergeseran dari pembelajaran pasif menuju *active learning* dan inkuiri saintifik. Alih-alih menerima data entalpi pembentukan (ΔH_f) dari tabel literatur secara dogmatis, mahasiswa bertindak layaknya peneliti: mereka membangun struktur molekul, menetapkan set basis (*basis set*) seperti 6-31G(d), menjalankan optimasi geometri, dan mengekstrak sendiri nilai energi bebas Gibbs dari *file output* komputasi. Keterlibatan (*engagement*) mendalam ini tidak hanya memvalidasi hukum-hukum termodinamika secara mandiri, tetapi juga melatih ketajaman intuisi kimia (*chemical intuition*).

Dalam lensa epistemologi Islam, proses visualisasi, observasi interaktif, dan penemuan pola keteraturan mikroskopik di dalam makmal maya ini merupakan manifestasi modern dari *Tafakkur* (kontemplasi). Mengamati arsitektur molekul yang begitu presisi dan interaksi elektron yang tunduk pada hukum alam yang stabil akan membimbing akal seorang pelajar menuju pengakuan atas keagungan Sang Pencipta, sebagaimana diisyaratkan dalam Al-Qur'an:

الَّذِينَ يَذْكُرُونَ اللَّهَ قِيَامًا وَقُعُودًا وَعَلَىٰ جُنُوبِهِمْ وَيَتَفَكَّرُونَ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ رَبَّنَا مَا خَلَقْتَ هَذَا بَاطِلًا سُبْحَانَكَ فَقِنَا عَذَابَ النَّارِ

"... (yaitu) orang-orang yang mengingat Allah sambil berdiri, duduk atau dalam keadaan berbaring, dan mereka memikirkan tentang penciptaan langit dan bumi (seraya berkata), 'Ya Tuhan kami, tidaklah Engkau menciptakan semua ini sia-sia; Mahasuci Engkau, lindungilah kami dari azab neraka'." (QS. Ali 'Imran [3]: 191).

Makmal maya memungkinkan manusia untuk "memikirkan penciptaan" di skala angstrom (10^{-10} meter), sebuah wilayah kekuasaan ilahiah yang di masa lampau mustahil untuk dieksplorasi secara visual.

1.4 Perisian Sumber Terbuka (Open Source) vs Komersial

Dalam lanskap kimia komputasi kontemporer, institusi pendidikan dan pusat penelitian dihadapkan pada sebuah dikotomi strategis: memilih perangkat lunak komersial (proprietary) yang mapan atau mengadopsi ekosistem sumber terbuka (*open source*) dan perangkat lunak gratis untuk akademik (*free for academia*). Keputusan ini bukan sekadar persoalan teknis atau preferensi antarmuka pengguna (UI), melainkan sebuah kebijakan institusional yang berdampak langsung pada arsitektur pendanaan, aksesibilitas pedagogik, dan filosofi keterbukaan sains itu sendiri.

1.4.1 Analisis Kebolehcapaian dan Pembiayaan

Secara historis, perangkat lunak kimia komputasi didominasi oleh produk komersial seperti Gaussian, HyperChem, dan ChemOffice. Perangkat lunak ini menawarkan algoritma yang sangat teroptimasi, ekosistem yang terintegrasi penuh (mulai dari pembangun molekul hingga analisis

spektrum), serta stabilitas komputasi tingkat tinggi. Namun, lisensi perangkat lunak komersial—terutama lisensi *site-wide* (skala institusi) dan pengaktifan *multiprocessor*—sering kali membutuhkan investasi puluhan hingga ratusan ribu dolar (Young, 2001). Bagi universitas di negara berkembang atau institusi dengan anggaran riset terbatas, biaya eksekusi ini menciptakan "tembok finansial" yang menghalangi adopsi kimia komputasi dalam silabus tingkat sarjana.

Sebagai antitesis dari monopoli komersial ini, gerakan sains terbuka melahirkan generasi perangkat lunak yang merombak struktur pembiayaan secara radikal. Perangkat lunak seperti Avogadro (pembangun molekul 3D) dan Gabedit (antarmuka grafis universal) dirilis di bawah lisensi GNU *General Public License* (GPL), memungkinkan akses gratis, modifikasi, dan distribusi ulang (Hanwell et al., 2012; Allouche, 2011). Di sisi mesin komputasi (*backend*), program tangguh seperti ORCA (dikembangkan oleh Max Planck Institute) dan GAMESS tidak bersifat *open source* murni, namun memberikan lisensi gratis secara absolut bagi pengguna akademik (Neese, 2012). Demokratisasi perangkat lunak ini menghapus hambatan finansial, memungkinkan setiap mahasiswa untuk menginstal perangkat komputasi kaliber riset (research-grade) langsung di komputer jinjing (laptop) pribadi mereka tanpa melanggar hak kekayaan intelektual (HAKI).

1.4.2 Sokongan Komuniti dan Ekosistem Perisian

Perbedaan fundamental antara perisian komersial dan sumber terbuka juga terletak pada model dukungan teknis (tech support) dan evolusi ekosistemnya. Perangkat lunak komersial beroperasi sebagai model *Black Box* (kotak hitam) bagi penggunanya. Kode sumber tertutup rapat, namun sebagai kompensasinya, pengguna mendapatkan manual dokumentasi yang sangat komprehensif, layanan pelanggan khusus, dan jaminan stabilitas dari vendor. Hal ini sangat krusial bagi riset industri farmasi atau material yang membutuhkan sertifikasi kepatuhan dan keandalan tanpa henti.

Sebaliknya, ekosistem sumber terbuka digerakkan oleh paradigma *crowdsourcing* dan kolaborasi komunitas global. Meskipun manual resminya mungkin tidak sesteril produk komersial, dukungan teknis mengalir secara dinamis melalui forum diskusi, repositori GitHub, dan milis (*mailing lists*) antar ilmuwan. Keuntungan ontologis dari ekosistem terbuka ini bagi pembelajaran adalah transparansi; mahasiswa pascasarjana bidang kimia teori dapat membongkar kode sumber (misalnya pada algoritma NWChem atau PySCF) untuk memahami secara persis bagaimana matriks Fock diselesaikan, bukan sekadar menekan tombol (*push-button chemistry*) (Sun et al., 2018). Lebih jauh, ekosistem ini sangat modular. Program seperti Gabedit bertindak sebagai *hub* agnostik yang dapat menghubungkan pengguna ke berbagai mesin komputasi secara bergantian—baik itu Gaussian (komersial) maupun ORCA dan FireFly (gratis)—memberikan fleksibilitas komparatif yang tak tertandingi (Allouche, 2011).

1.4.3 Kajian Kes: Penggunaan dalam Institusi Pengajian Tinggi

Adaptasi di berbagai universitas terkemuka menunjukkan tren pergeseran menuju model hibrida (*hybrid model*), di mana perangkat lunak *open source* dan komersial disinergikan dalam satu kurikulum untuk mencapai efisiensi maksimum. Sebuah kajian kes integrasi komputasi di kurikulum sarjana (*undergraduate*) menunjukkan keberhasilan penerapan model "Bring Your Own Device" (BYOD).

Dalam tahap praklinis (tahun pertama dan kedua), universitas menggunakan Avogadro dan ORCA. Mahasiswa diinstruksikan untuk mengunduh dan menjalankan simulasi termokimia dasar (seperti optimasi geometri \$H_2O\$ atau perhitungan frekuensi vibrasi etanol) di laptop masing-masing. Pendekatan ini mengeliminasi *bottleneck* (ketersendatan) akibat keterbatasan jumlah komputer (PC) di makmal fisik kampus, serta mendorong pembelajaran mandiri di luar jam kuliah (Moran et al., 2014).

Ketika mahasiswa melangkah ke tahap riset akhir (skripsi/tesis) yang membutuhkan perhitungan tingkat tinggi seperti *Coupled Cluster* (CCSD(T)) atau Dinamika Molekul (MD) dengan jutaan langkah waktu, mereka dialihkan menggunakan perangkat lunak komersial yang terinstal secara terpusat di fasilitas Komputasi Kinerja Tinggi (High-Performance Computing/HPC) milik universitas (seperti kluster superkomputer). Transisi pedagogik ini berlangsung mulus karena konsep dasar penalaran komputasional (*computational thinking*)—seperti penyusunan *file input* koordinat XYZ, pemilihan *basis set*, dan ekstraksi *file output*—telah dikuasai sepenuhnya selama masa pelatihan menggunakan perangkat lunak terbuka.

1.5 Rangka Kerja Buku dan Panduan Penggunaan

Buku referensi ini dirancang bukan sekadar sebagai himpunan manual teknis berorientasi tombol (*button-clicking manual*), melainkan sebagai sebuah risalah saintifik komprehensif yang menjembatani jurang pemisah antara mekanika kuantum teoretis dan implementasi pedagogiknya di ruang kelas. Agar pemanfaatan literatur ini mencapai tingkat kemangkusan (efektivitas) yang optimal, pembaca dituntut untuk memahami arsitektur konseptual dan rute navigasi yang telah disusun di dalam bab-bab berikutnya.

1.5.1 Objektif dan Sasaran Pembaca

Objektif fundamental dari buku ini adalah mendemokratisasikan literasi kimia komputasi. Di tingkat global, penguasaan *software* komputasi telah menjadi kompetensi wajib (*core competency*) yang ditetapkan oleh badan akreditasi pendidikan kimia antarabangsa, seperti *American Chemical Society* (ACS), untuk program sarjana. Oleh karena itu, buku ini menggariskan tiga hierarki tujuan:

1. **Ranah Kognitif:** Membongkar abstraksi konsep struktur elektron, termodinamika reaksi, dan spektroskopi melalui representasi visual dan pemodelan matematis.
2. **Ranah Psikomotorik (Digital):** Melatih kecakapan mengoperasikan instrumen *open-source* (Avogadro, ORCA, Gabedit) dan *proprietary* (Gaussian, HyperChem) untuk membangun, mensimulasikan, dan mengekstrak data dari model molekuler.
3. **Ranah Afektif & Epistemologis:** Menumbuhkan intuisi kimiawi (*chemical intuition*) serta kesadaran kritis terhadap validitas dan limitasi (batasan) dari setiap metode komputasi (*ab initio* vs semi-empiris).

Sasaran pembaca literatur ini mencakup spektrum akademis yang luas: mulai dari mahasiswa prasiswa (sarjana) yang baru bersentuhan dengan kimia kuantum, mahasiswa pascasarjana yang membutuhkan panduan komputasi fungsional untuk mendukung riset basah (*wet lab*) mereka, hingga para pensyarah (dosen) dan pendidik yang sedang merancang modul makmal maya (*virtual laboratory*) berbasis *blended learning*.

1.5.2 Metodologi Penerapan Perisian dalam Bilik Darjah

Transmisi pengetahuan dari buku ini ke dalam realitas bilik darjah (ruang kelas) memerlukan strategi didaktik yang terukur. Penulis merekomendasikan adopsi model *Inquiry-Based Learning* (IBL) dan *Project-Based Learning* (PBL) dalam penerapan perisian ini.

Alih-alih memberikan instruksi kaku seperti "gambaran molekul air dan hitung energinya", pendidik disarankan untuk menggunakan pendekatan inkuiri termodinamika. Sebagai contoh, mahasiswa diberikan sebuah teka-teki saintifik: "Mengapa reaksi hidrasi etilena menghasilkan etanol secara eksotermis, dan struktur intermediet apa yang memfasilitasi reaksi tersebut?" Mahasiswa kemudian diarahkan ke Bab 4 (ORCA) atau Bab 6 (Gaussian) dalam buku ini untuk merancang eksperimen maya secara mandiri. Mereka harus memodelkan reaktan, mencari Keadaan Transisi (*Transition State/TS*), dan menghitung Entalpi Reaksi (ΔH) pada suhu 298.15 K—sebagaimana prosedur yang dikemukakan dalam kajian termokimia derivatif alkil tiofena (Nikoofard, 2015).

Buku ini juga menyokong metodologi Bilik Darjah Berbalik (*Flipped Classroom*). Mahasiswa dapat menelaah teori Fungsional Kerapatan (DFT) dan mencoba menyusun *file input* dasar secara asinkronus (di rumah) menggunakan Gabedit (Bab 3), sehingga waktu sinkronus di dalam kelas (atau di makmal komputer universitas) dapat dioptimalkan penuh untuk diskusi tingkat tinggi, validasi *output*, dan penyelesaian *error* komputasi (Troubleshooting) bersama pensyarah.

1.5.3 Pemetaan Bab terhadap Silibus Kimia Fizik

Sistematika buku ini secara sengaja disejajarkan dengan silabus standar Kimia Fizik dan Kimia Anorganik Lanjutan di universitas, memastikan integrasi yang kohesif (menyatu) dengan kurikulum yang ada:

- **Pemodelan Molekul & Simetri Kumpulan Titik:** Diakomodasi melalui Bab 2 (Avogadro) dan Bab 3 (Gabedit), di mana mahasiswa mempelajari cara melukis topologi molekul kompleks dan menentukan elemen simetri yang krusial untuk spektroskopi.
- **Mekanika Kuantum & Struktur Elektronik:** Dijabarkan secara mendalam pada Bab 4 (ORCA) dan Bab 6 (Gaussian). Bagian ini merupakan rujukan wajib saat silabus menyentuh topik Teori Orbital Molekul (MOT), pengiraan *Single Point Energy*, Hibridisasi, dan Analisis Populasi NBO (*Natural Bond Orbital*).
- **Termodinamika Statistik & Kinetika Kimia:** Dipetakan pada Bab 4, Bab 5 (HyperChem), dan Bab 6. Mahasiswa akan belajar mengekstrak parameter Fungsi Partisi untuk memprediksi energi bebas Gibbs, memplot Profil Reaksi Intrinsik (IRC), dan mengkalkulasi konstanta laju reaksi komputasional.
- **Spektroskopi Molekuler (IR, NMR, UV-Vis):** Tersebar aplikasinya di Bab 3, 4, 5, dan 6, di mana *output* teoritis dari metode eksitasi (*Time-Dependent* DFT atau CI) dibandingkan langsung dengan spektrum hasil eksperimen untuk menguji validitas model (Cramer, 2013).

Dengan pemetaan yang terstruktur ini, buku *Software Kimia Komputasi untuk Pembelajaran Kimia* diharapkan tidak hanya menjadi literatur rujukan pasif, tetapi bertransformasi menjadi katalisator bagi lahirnya riset-riset kimia komputasi interdisipliner di kalangan civitas akademika internasional.

DAFTAR PUSTAKA BAB 1

Allouche, A. R. (2011). Gabedit—A graphical user interface for computational chemistry softwares. *Journal of Computational Chemistry*, 32(1), 174-182.

Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). *Green chemistry: theory and practice*. Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2013). *Essentials of computational chemistry: theories and models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Dalgarno, B., Bishop, A. G., Adlong, W., & Bedgood Jr, D. R. (2009). Effectiveness of a virtual laboratory as a preparatory resource for distance education chemistry students. *Computers & Education*, 53(3), 853-865.

Foresman, J. B., & Frisch, A. (2015). *Exploring chemistry with electronic structure methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *The Journal of Chemical Physics*, 132(15), 154104.

Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4(1), 1-17.

Jauhari, T. (1933). *Al-Jawahir fi Tafsir al-Qur'an al-Karim*. Dar al-Fikr.

Jensen, F. (2017). *Introduction to computational chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Johnstone, A. H. (1991). Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *Journal of Computer Assisted Learning*, 7(2), 75-83.

Koch, W., & Holthausen, M. C. (2001). *A chemist's guide to density functional theory* (2nd ed.). Wiley-VCH.

Leach, A. R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications* (2nd ed.). Pearson Education.

Lewars, E. G. (2016). *Computational chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics* (3rd ed.). Springer.

Makransky, G., Terkildsen, T. S., & Mayer, R. E. (2019). Adding immersive virtual reality to a science lab simulation causes more presence but less learning. *Learning and Instruction*, 60, 225-236.

Mishra, P., & Koehler, M. J. (2006). Technological pedagogical content knowledge: A framework for teacher knowledge. *Teachers College Record*, 108(6), 1017-1054.

Moran, A., Berkowitz, M. L., & Gellman, A. J. (2014). Integrating computational chemistry into the undergraduate curriculum. *Journal of Chemical Education*, 91(12), 2026-2027.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2(1), 73-78.

Nikoofard, H. (2015). Computational Thermo-chemical Study of Enthalpies of formation of Alkylthiophenes Using Ab Initio and DFT Calculations. *Acta Chimica Slovenica*, 62, 910-916.

Sun, Q., Berkelbach, T. C., Blunt, N. S., Booth, G. H., Chan, G. K. L., DePrince III, E. R., ... & Wouters, S. (2018). PySCF: the Python-based simulations of chemistry framework. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 8(1), e1340.

Sweller, J., Ayres, P., & Kalyuga, S. (2011). *Cognitive load theory*. Springer Science & Business Media.

Tasker, R., & Dalton, R. (2006). Research into practice: visualization of the molecular world using animations. *Chemistry Education Research and Practice*, 7(2), 141-159.

Tatli, Z., & Ayas, A. (2013). Effect of a virtual chemistry laboratory on students' achievement. *Educational Technology & Society*, 16(1), 159-170.

Tuvi-Arad, I., & Blonder, R. (2010). Continuous symmetry and chemistry teachers: learning advanced chemistry content through novel visualization tools. *Chemistry Education Research and Practice*, 11(1), 48-58.

Wu, H. K., Krajcik, J. S., & Soloway, E. (2001). Promoting understanding of chemical representations: Students' use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching*, 38(7), 821-842.

Young, D. C. (2001). *Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems*. John Wiley & Sons.

BAB 2: ASAS PEMODELAN 3D DENGAN AVOGADRO

2.1 Pengenalan kepada Ekosistem Avogadro

Transisi dari pemahaman kimia dua dimensi (struktural datar) menuju komprehensi tiga dimensi (spasial-stereokimia) merupakan salah satu loncatan kognitif paling krusial dalam pembelajaran kimia. Perangkat lunak Avogadro hadir sebagai instrumen penjembutan yang revolusioner dalam proses ini. Berbeda dengan program visualisasi generasi sebelumnya yang kaku dan tertutup, Avogadro dirancang secara fundamental sebagai editor kimia semantik yang dinamis, canggih, dan berorientasi pada pengguna dari berbagai level—mulai dari mahasiswa sarjana hingga peneliti pascadoktoral.

2.1.1 Falsafah Reka Bentuk dan Aksesibiliti

Avogadro dikembangkan dengan filosofi perangkat lunak sumber terbuka (*open-source*), yang berakar pada prinsip demokratisasi ilmu pengetahuan. Dirilis pertama kali di bawah lisensi GNU *General Public License* (GPL), peranti lunak ini menghancurkan rintangan finansial yang selama ini membatasi akses institusi pendidikan terhadap perangkat pemodelan molekul berkualitas tinggi (Hanwell et al., 2012).

Secara arsitektural, Avogadro dibangun menggunakan bahasa pemrograman C++ yang menjamin kecepatan eksekusi tinggi, dengan antarmuka pengguna grafis (GUI) yang disokong oleh *framework* Qt. Penggunaan *library* OpenGL memungkinkan *rendering* grafis tiga dimensi molekul secara *real-time* dengan akselerasi perangkat keras, memberikan pengalaman visual yang sangat halus bahkan untuk sistem biomolekul yang masif. Keistimewaan ontologis dari arsitektur Avogadro adalah sifatnya yang sangat ekstensibel (dapat diperluas). Melalui sistem *plugin*, pengguna atau pengembang pihak ketiga dapat menyisipkan skrip modul tambahan (misalnya dalam bahasa Python) untuk mengintegrasikan Avogadro dengan enjin komputasi kuantum lainnya, perhitungan kristalografi, maupun basis data material (Hutchison et al., 2016).

Keterbukaan dan modularitas ini bukan sekadar fitur teknis, melainkan representasi dari etos kolaborasi saintifik modern. Mahasiswa tidak hanya bertindak sebagai "konsumen" perangkat lunak, tetapi diajak untuk menyadari bahwa instrumen sains dapat terus berevolusi melalui kontribusi komunitas global.

2.1.2 Pemasangan dan Konfigurasi Antara Muka Pengguna

Aksesibiliti Avogadro juga terefleksi pada kemudahan lintas serambi (*cross-platform*). Perangkat lunak ini dapat diinstalasi secara natif pada sistem operasi Windows, macOS, maupun distribusi Linux tanpa mengalami degradasi fungsionalitas. Saat pengguna pertama kali membuka ekosistem Avogadro, mereka disajikan dengan tata letak (*layout*) ruang kerja yang sangat intuitif,

meminimalisasi lengkung pembelajaran (*learning curve*) yang sering kali menakutkan pada perangkat lunak setara komersial.

Komponen antarmuka pengguna terdiri dari kanvas 3D sentral, bilah menu (*menu bar*), dan panel pengaturan *Display Types*. Fungsionalitas inti Avogadro dikendalikan melalui sistem *Toolbars* yang spesifik:

1. **Draw Tool (Alat Lukis):** Memungkinkan pengguna untuk mengklik dan menarik (*click-and-drag*) untuk membentuk atom dan ikatan kimia secara langsung pada kanvas. Fitur *Adjust Hydrogens* terintegrasi secara otomatis memenuhi valensi atom pusat dengan hidrogen, mematuhi kaidah oktet (atau hipervalensi untuk unsur tertentu).
2. **Navigation Tool (Alat Navigasi):** Diperuntukkan bagi rotasi dan translasi molekul tanpa mengubah koordinat internal antaratom.
3. **Auto-Optimization Tool (Alat Pengoptimuman Otomatis):** Fitur ini merupakan inti dari keunggulan mekanika molekular Avogadro, di mana pengguna dapat meminimumkan energi sterik suatu geometri molekul secara *real-time* menggunakan medan gaya (*force field*) seperti UFF (Universal Force Field) yang didukung oleh integrasi *backend* perpustakaan Open Babel (O'Boyle et al., 2011).

Dalam aspek representasi visual, Avogadro memfasilitasi pengamatan fenomena submikroskopik melalui berbagai pilihan mode tayangan. Mode *Ball and Stick* ideal untuk mengamati sudut ikatan dan konektivitas, sementara mode *Van der Waals Spheres* merepresentasikan volume elektronika awan molekul, memungkinkan analisis untuk mendeteksi potensi halangan sterik (*steric hindrance*) sebelum perhitungan termokimia tingkat lanjut dilakukan.

2.1.3 Menavigasi Ruang Kerja 3D dan Kesadaran Spasial

Kemampuan menavigasi ruang kerja 3D dalam Avogadro memberikan dampak pedagogik yang mendalam terhadap kecerdasan spasial-visual (*visual-spatial intelligence*) pengguna. Dalam kimia organik, konsep konformasi (seperti konformasi kursi versus perahu pada sikloheksana) atau kiralitas (enantiomer R dan S) sering kali gagal dipahami karena keterbatasan media dua dimensi.

Melalui manipulasi *mouse* di dalam kanvas Avogadro, pengguna dapat memutar molekul kompleks hingga 360 derajat pada sumbu X, Y, dan Z. Tindakan fisik-digital ini membantu mengkalibrasi struktur mental mahasiswa, mengubah data abstrak koordinat Cartesian menjadi realitas geometri yang terukur. Kepresisian penempatan atom dan pengaturan panjang ikatan (dalam skala Angstrom) yang diizinkan oleh peranti lunak ini mencerminkan tingginya keteraturan arsitektur mikrokosmos di alam semesta.

Hal ini relevan dengan perspektif teologis-saintifik, di mana sains komputasi pada hakikatnya adalah proses penemuan (*discovery*) atas hukum-hukum presisi yang telah ditetapkan oleh Sang Pencipta pada materi terkecil sekalipun. Keteraturan sudut dihedral, panjang ikatan optimal, dan minimalisasi energi bukanlah sebuah fenomena acak, melainkan manifestasi dari ketetapan Ilahiah sebagaimana termaktub dalam firman Allah SWT:

الَّذِي لَهُ مُلْكُ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ وَلَمْ يَتَّخِذْ وَلَدًا وَلَمْ يَكُنْ لَهُ شَرِيكٌ فِي الْمُلْكِ وَخَلَقَ كُلَّ شَيْءٍ فَقَدَرَهُ تَقْدِيرًا

“yang kepunyaan-Nya-lah kerajaan langit dan bumi, dan Dia tidak mempunyai anak, dan tidak ada sekutu bagi-Nya dalam kekuasaan(Nya), dan Dia telah menciptakan segala sesuatu, dan Dia menetapkan ukuran-ukurannya dengan serapi-rapinya.” (QS. Al-Furqan [25]: 2).

Kata *taqdira* (ukuran-ukuran yang rapi/presisi) dalam ayat ini, ketika dikontekstualisasikan ke dalam kimia struktural, mewujud dalam bentuk ukuran jari-jari kovalen, batas tolak-menolak Van der Waals, serta keseimbangan tarikan elektrostatis antar inti atom dan elektron. Avogadro memungkinkan peneliti untuk mensimulasikan "ukuran-ukuran presisi" tersebut di layar komputer, mempersiapkan fondasi struktur geometri yang kokoh sebelum diserahkan (*submit*) kepada algoritma penyelesaian persamaan mekanika kuantum yang lebih berat di bab-bab selanjutnya.

2.2 Teknik Melukis Struktur Molekul

Pergeseran dari pemodelan molekul dua dimensi (2D) di atas kertas menuju kanvas tiga dimensi (3D) di dalam perisian komputasi bukan sekadar perubahan medium, melainkan transisi epistemologis dalam memahami arsitektur materi. Kesalahan dalam menetapkan koordinat awal (seperti panjang ikatan atau sudut torsi) pada tahap melukis ini akan berakibat fatal pada keseluruhan komputasi termodinamika di tahap selanjutnya, memicu kegagalan konvergensi dalam penyelesaian matriks mekanika kuantum (Cramer, 2013). Oleh karena itu, penguasaan peranti melukis (*drawing tools*) dalam Avogadro menuntut kombinasi antara keterampilan motorik digital dan intuisi kimia (*chemical intuition*) yang mendalam.

2.2.1 Pembinaan Rangka Molekul Organik Ringkas

Tahap fundamental dalam Avogadro dimulai dengan *Draw Tool* (ikon pensil). Berbeda dengan aplikasi menggambar konvensional, kanvas Avogadro terikat pada hukum-hukum valensi dan teori tolakan pasangan elektron kulit valensi (VSEPR). Saat pengguna memilih elemen Karbon (C) dari panel *Element* dan mengklik kiri pada kanvas (hitam secara lalai/default), satu atom karbon berbentuk sferis akan muncul. Tindakan menarik (*click-and-drag*) dari atom tersebut ke ruang kosong akan secara otomatis membentuk ikatan kovalen berorde tunggal dengan atom karbon kedua.

Satu fitur krusial yang menunjukkan kecerdasan semantik dari Avogadro adalah opsi *Adjust Hydrogens*. Jika fitur ini diaktifkan, algoritma perpustakaan *Open Babel* yang terintegrasi di dalam *backend* Avogadro akan secara otomatis mengira valensi atom yang belum terpenuhi dan memenuhinya dengan atom hidrogen (O'Boyle et al., 2011). Sebagai contoh, satu atom karbon tunggal di kanvas akan langsung dikelilingi oleh empat atom hidrogen dengan susunan tetrahedral yang memiliki sudut ideal $\sim 109.5^\circ$.

Kemampuan Avogadro untuk secara otomatis menyusun (*assembling*) atom-atom dasar menjadi molekul yang stabil dan seimbang ini secara filosofis mengingatkan kita pada keagungan arsitektur

penciptaan Tuhan. Pembentukan struktur dasar organik dari kepingan atom yang presisi selaras dengan firman Allah SWT:

﴿الَّذِي خَلَقَكَ فَسَوَّاكَ فَعَدَلَكَ﴾ (٧) فِي أَيِّ صُورَةٍ مَا شَاءَ رَكَّبَكَ ﴿٨﴾

“Yang telah menciptakan kamu lalu menyempurnakan kejadianmu dan menjadikan (susunan tubuh)mu seimbang, dalam bentuk apa saja yang Dia kehendaki, Dia menyusun tubuhmu.” (QS. Al-Infitar [82]: 7-8).

Lafadz *rakkabaka* (Dia menyusun/merakitmu) mengisyaratkan adanya proses penggabungan dari komponen-komponen mikroskopik dasar—yang dalam ilmu kimia dikenali sebagai penggabungan atom menjadi molekul, asam amino, hingga polimer DNA—menjadi sebuah struktur besar yang sangat seimbang (*fa'adalak*) dan fungsional.

2.2.2 Manipulasi Parameter: Panjang Ikatan dan Sudut

Meskipun fitur *Adjust Hydrogens* memberikan geometri ideal secara teoretis, dalam realitas riset kimia fisik, pengguna sering kali perlu menstimulasi molekul pada konformasi non-ideal (misalnya keadaan keadaan transisi/ *transition state*). Untuk keperluan presisi spasial tingkat tinggi ini, Avogadro menyediakan *Bond Centric Manipulate Tool*.

Instrumen ini membenarkan pengguna untuk mengubah tiga parameter internal molekul yang dikenal sebagai koordinat Z-Matrix:

1. **Panjang Ikatan (r):** Dengan memilih satu ikatan, pengguna dapat menarik atau mendorong atom di satu sisi sepanjang paksi ikatan tersebut. Jarak ditunjukkan secara masa-nyata (*real-time*) dalam satuan Angstrom (\AA).
2. **Sudut Ikatan (θ):** Melibatkan tiga atom. Pengguna dapat "membengkokkan" molekul untuk melanggar hibridisasinya secara sengaja (misalnya menguji regangan cincin/*ring strain* pada siklopropana).
3. **Sudut Dihedral atau Torsi (ϕ):** Parameter paling kritis dalam kajian konformasi. Melibatkan empat atom yang saling berikatan berurutan (A-B-C-D). Melalui modifikasi sudut dihedral ini, mahasiswa dapat mensimulasikan unjuran Newman (*Newman projection*), seperti mengubah konformasi butana dari *staggered* (anti) dengan nilai $\phi = 180^\circ$ menjadi *eclipsed* (tindih) pada $\phi = 0^\circ$ (Jensen, 2017).

Memodifikasi koordinat secara manual sebelum melakukan komputasi sangatlah penting untuk memastikan optimasi geometri nantinya tidak terjebak pada titik minimum lokal (*local minima*) di dalam Permukaan Potensi Tenaga (*Potential Energy Surface/PES*), melainkan berhasil mencapai titik minimum global (*global minima*) yang merepresentasikan konformer paling stabil secara termodinamik.

2.2.3 Pembinaan Makromolekul dan Polimer Termaju

Pembinaan molekul raksasa (makromolekul) seperti protein, heliks DNA, atau polimer material sintetik menggunakan metode *click-and-drag* atom-demi-atom tidak hanya memakan waktu (*time-*

consuming), tetapi juga rentan terhadap ralat (kesalahan) topologi. Menyadari hal ini, ekosistem Avogadro mengintegrasikan pelbagai alat automasi berskala besar melalui menu *Build*.

- **Penyisipan Rantainya Peptida (Peptide Builder):** Mahasiswa bioinformatika dapat membina struktur primer protein secara instan dengan hanya menaip jujukan (sekuens) asid amino tunggal (seperti "A-L-A-G-L-Y"). Perisian akan menjana tulang belakang (*backbone*) polipeptida dengan sudut ϕ (ϕ) dan ψ (ψ) lalai untuk membentuk sama ada heliks- α atau kepingan- β (β -sheet).
- **Pembangun DNA/RNA:** Membolehkan penjanaan asid nukleik berantai tunggal mahupun ganda mengikut susunan pasangan bes (Adenin-Timin, Guanin-Sitosin) spesifik.
- **Terjemahan Input SMILES:** Avogadro menyokong spesifikasi format rentetan *Simplified Molecular-Input Line-Entry System* (SMILES). Ini merupakan bahasa linear yang mengubah graf molekul menjadi teks ASCII (Weininger, 1988). Sebagai contoh, jika pelajar memasukkan rentetan c1ccccc1, Avogadro dengan serta-merta akan menterjemahkannya dan memplot struktur 3D bagi cincin benzena di atas kanvas.

Penggunaan pangkalan data terbina dalam dan alat siri seperti ini melatih efisiensi kerja yang sangat diperlukan dalam era *High-Throughput Screening* (HTS) pada industri penemuan ubat-ubatan (*drug discovery*), di mana ribuan ligan molekul kompleks perlu dibina dan disaring secara maya dalam masa yang singkat.

2.3 Pengoptimuman Geometri Awal

Setelah struktur molekul berhasil dibangun di atas kanvas digital, struktur tersebut pada hakikatnya masih berada dalam keadaan tereksitasi secara sterik. Koordinat atom-atom yang diletakkan melalui metode *click-and-drag* manusia sering kali menghasilkan panjang ikatan yang tidak rasional, benturan awan elektron (tolakan sterik), dan sudut yang menyimpang jauh dari hibridisasi idealnya. Oleh karena itu, sebelum molekul ini diekspor ke perangkat lunak perhitungan tingkat tinggi seperti ORCA atau Gaussian, ia wajib menjalani proses "relaksasi" yang dikenal sebagai Pengoptimuman Geometri (*Geometry Optimization*). Avogadro menyediakan modul *Auto-Optimization Tool* yang memungkinkan proses ini terjadi secara seketika (*real-time*) di hadapan mata pelajar.

2.3.1 Memahami Konsep Permukaan Minimum Tenaga (PES)

Pondasi teoretis dari pengoptimuman geometri adalah konsep Permukaan Tenaga Potensi (Potential Energy Surface / PES). PES adalah sebuah fungsi matematis multidimensi yang memetakan energi total molekul sebagai fungsi dari semua koordinat inti atomnya (Cramer, 2013). Jika dibayangkan dalam tiga dimensi, PES menyerupai lanskap pegunungan yang memiliki puncak (keadaan transisi / *transition states*), lereng, dan lembah (titik minimum).

Molekul yang baru saja digambar oleh pengguna biasanya "mendarat" di bagian lereng bukit yang curam pada lanskap PES ini, merepresentasikan tingkat energi potensial yang tinggi dan tidak

stabil. Tujuan dari algoritma pengoptimuman adalah memandu molekul tersebut "turun gunung" hingga mencapai dasar lembah terdalam. Lembah terendah ini merepresentasikan *Global Minimum* (konformasi paling stabil secara termodinamik, seperti konformasi kursi pada sikloheksana), sedangkan lembah-lembah dangkal lainnya disebut *Local Minima* (seperti konformasi perahu). Dalam konteks pembelajaran, menyimulasikan PES secara langsung membantu mahasiswa memahami bahwa setiap molekul di alam semesta selalu berusaha mencari keadaan dengan energi terendah yang paling stabil.

2.3.2 Aplikasi Medan Daya (Force Fields): UFF dan MMFF94

Karena optimasi awal di Avogadro dirancang untuk berjalan sangat cepat (dalam hitungan detik), ia tidak menggunakan persamaan mekanika kuantum yang rumit, melainkan menggunakan pendekatan Mekanika Molekular (MM) yang didasarkan pada fisika klasik (Hukum Hooke). Parameter fisik ini dikompilasi dalam apa yang disebut Medan Daya (*Force Field*). Avogadro didukung oleh perpustakaan ekstensif dari *Open Babel* yang menyediakan beberapa pilihan *Force Field* (O'Boyle et al., 2011).

Dua medan daya yang paling krusial untuk dipelajari oleh mahasiswa adalah:

1. **UFF (Universal Force Field):** Dikembangkan oleh Rappe et al. (1992), UFF adalah medan daya yang sangat tangguh karena parameternya mencakup seluruh unsur dalam tabel periodik. Ini menjadikannya pilihan utama ketika mahasiswa sedang memodelkan senyawa kompleks inorganik atau kompleks logam transisi yang tidak dapat ditangani oleh medan daya standar.
2. **MMFF94 (Merck Molecular Force Field):** Diciptakan oleh Halgren (1996) di laboratorium farmasi Merck, medan daya ini sangat terkalibrasi secara ketat untuk molekul organik dan interaksi non-kovalen (seperti ikatan hidrogen dan tolakan Van der Waals). MMFF94 adalah instrumen standar emas (gold standard) bagi mahasiswa yang mensimulasikan ligan obat sebelum proses penambatan molekul (*molecular docking*).

Kemampuan memilih dan mempertanggungjawabkan penggunaan medan daya tertentu melatih kemampuan literasi komputasional mahasiswa, menjauhkan mereka dari mentalitas "asal klik" tanpa justifikasi saintifik.

2.3.3 Algoritma Penurunan Curam (Steepest Descent)

Bagaimana perangkat lunak mengarahkan koordinat atom menuju lembah terdalam pada PES? Ini dijawab melalui algoritma matematika. Avogadro menggunakan algoritma turunan pertama, di mana yang paling menonjol dan digunakan sebagai default adalah *Steepest Descent* (Penurunan Paling Curam).

Secara konseptual, algoritma *Steepest Descent* menghitung gradien (kemiringan) energi terhadap koordinat pada setiap titik atom. Ia kemudian memindahkan atom-atom tersebut ke arah di mana energi menurun paling tajam (vektor gradien negatif). Bayangkan seorang pendaki gunung yang turun dengan mata tertutup; pada setiap langkah, ia akan meraba tanah dan melangkah ke arah

yang paling curam ke bawah. Meskipun algoritma ini sangat tangkas dalam menurunkan energi molekul yang sangat tidak beraturan pada tahap-tahap awal relaksasi, ia memiliki kelemahan: pergerakannya menjadi sangat lambat (berosilasi) ketika sudah mendekati titik dasar lembah, karena kemiringannya (gradien) mendekati nol (Leach, 2001).

Keunikan pedagogik Avogadro adalah fitur *Auto-Optimization* yang mengeksekusi algoritma ini secara *live*. Saat tombol "Start" ditekan, mahasiswa dapat melihat secara visual bagaimana ikatan-ikatan yang tadinya bengkok perlahan melurus, cincin yang tegang menjadi rileks, dan atom-atom bergetar mencari posisi idealnya hingga nilai ΔE (perubahan energi) mencapai nol.

Keteraturan dan kecenderungan alamiah materi untuk mencari posisi keseimbangan yang paling rileks dan harmoni ini, secara epistemologis, selaras dengan prinsip penyempurnaan ciptaan Ilahi. Dalam kosmologi Islam, setiap entitas diciptakan tidak hanya dalam bentuk asalnya, tetapi juga diberikan "petunjuk" dan hukum fisika untuk mencapai proporsi atau keadaan yang paling sempurna (keseimbangan energi minimum). Allah SWT berfirman:

﴿الَّذِي خَلَقَ فَسَوَّىٰ ﴿٢﴾ وَالَّذِي قَدَّرَ فَهَدَىٰ ﴿٣﴾﴾

“Yang menciptakan, lalu menyempurnakan (penciptaan-Nya), dan Yang menentukan kadar (masing-masing) dan memberi petunjuk.” (QS. Al-A'la [87]: 2-3).

Kata *fasawwa* (menyempurnakan) dan *qaddara* (menentukan kadar/ukuran) bermanifestasi secara saintifik dalam proses relaksasi geometri ini. Atom-atom dipandu (*fahada*) oleh hukum gaya tarik-menolak elektrostatik murni menuju tatanan geometri yang paling proporsional dan presisi, memastikan bahwa tidak ada ketegangan (tegangan sterik) yang menyalahi desain keseimbangan alam semesta.

2.4 Analisis Sifat Struktur Lanjutan

Pencapaian geometri optimum (titik minimum pada Permukaan Potensi Tenaga) bukanlah destinasi akhir dalam pemodelan molekul, melainkan titik tolak (starting point) bagi analisis struktur secara komprehensif. Pada tahap inilah data numerik mentah—berupa matriks koordinat Cartesian (X, Y, Z)—diekstraksi dan ditransformasikan menjadi informasi kimiawi yang bermakna. Ekosistem Avogadro menyediakan peranti pengukuran dan visualisasi permukaan termaju yang membolehkan penyelidik membedah sifat sterik, elektronik, dan reaktivitas molekul sebelum sebarang reaksi disimulasikan secara komputasi kuantum.

2.4.1 Penentuan Sudut Dihedral dan Konformasi

Dalam kajian stereokimia dan dinamika molekul organik, parameter yang paling menentukan kestabilan termodinamik bukanlah panjang ikatan tunggal, melainkan sudut dihedral (sudut torsi). Sudut dihedral (τ atau ϕ) secara geometris didefinisikan sebagai sudut yang terbentuk di antara dua bidang yang berpotongan, di mana bidang-bidang tersebut dibangun oleh empat atom yang saling berikatan berurutan (misalnya atom 1-2-3-4). Rotasi bebas mengelilingi ikatan sigma

(σ) tunggal (ikatan 2-3) akan menghasilkan pelbagai keadaan spasial yang dikenali sebagai konformasi.

Avogadro memfasilitasi analisis ini melalui *Measure Tool* (ikon penggaris). Dengan memilih empat atom secara berurutan, perisian akan secara langsung memaparkan nilai sudut dihedral dalam satuan derajat. Fungsionalitas ini sangat kritikal apabila mahasiswa mempelajari profil tenaga n-butana. Dengan mengukur sudut dihedral C1-C2-C3-C4, pelajar dapat mengidentifikasi secara kuantitatif konformasi *anti-staggered* (sudut $\sim 180^\circ$), *gauche* ($\sim 60^\circ$), atau *eclipsed* (0°).

Pemahaman mendalam tentang konformasi ini membuka jalan untuk menjelaskan fenomena regangan sterik (steric strain) dan regangan torsional. Tolakan awan elektron antara gugus metil yang bervolume besar pada konformasi *eclipsed* n-butana memberikan justifikasi saintifik mengapa konformasi tersebut memiliki tingkat energi yang lebih tinggi (kurang stabil) berbanding konformasi *anti* (Carey & Sundberg, 2007). Dalam bioinformatika, pengukuran sudut dihedral (ϕ dan ψ) pada tulang punggung (backbone) rantai asam amino adalah asas kepada pembentukan Plot Ramachandran, instrumen utama untuk memvalidasi struktur sekunder protein seperti *alpha-helix* dan *beta-sheet* (Hovmöller et al., 2002).

2.4.2 Visualisasi Permukaan (Surface Visualization)

Model "bola-dan-batang" (ball-and-stick) klasik yang sering digunakan dalam pengajaran kimia secara ontologis tidaklah akurat. Sebuah molekul tidak memiliki batasan fisik yang keras seperti bola biliard; sebaliknya, molekul adalah entitas mekanika kuantum yang tersusun atas inti positif yang diselubungi oleh awan kebolehdarian elektron yang menyebar hingga ke jarak tak terhingga. Untuk memecahkan miskonsepsi pedagogik ini, Avogadro menyediakan alat Penjanaan Permukaan (*Surface Generation*).

Melalui modul visualisasi *Van der Waals (VdW) Surface*, Avogadro merender (melukis) batas terluar dari awan elektron molekul berdasarkan jejari Van der Waals setiap atom penyusunnya. Representasi ini memberikan gambaran yang sangat realistik mengenai "volume sejati" yang ditempati oleh molekul tersebut di dalam ruang tiga dimensi.

Lebih jauh, analisis *Solvent Accessible Surface Area* (SASA) membolehkan pengkaji mensimulasikan kawasan permukaan molekul yang secara fisik dapat disentuh atau diakses oleh molekul pelarut (biasanya diasumsikan sebagai bola air dengan jejari probe ~ 1.4 Angstrom). Metodologi visualisasi permukaan ini sangat vital dalam kajian desain ubat-ubatan berbantu komputer (Computer-Aided Drug Design / CADD). Penyelidik dapat mengamati secara langsung topologi dari poket aktif sebuah enzim, menilai kelengkungan (curvature) ruang, dan menentukan sama ada ligan ubat memiliki kesesuaian bentuk (shape complementarity) yang cukup untuk masuk tanpa mengalami benturan sterik (steric clash) yang akan menolak ligan tersebut keluar (Leach, 2001).

2.4.3 Pemetaan Potensi Elektrostatik (MEP)

Sifat paling prediktif yang dapat diekstraksi dari topologi awan elektron adalah Permukaan Potensi Elektrostatik (Molecular Electrostatic Potential / MEP). MEP adalah representasi visual dari distribusi muatan di sekeliling molekul, yang dihitung berdasarkan hukum Coulomb. Secara konseptual, MEP mengukur interaksi energi yang dirasakan oleh sebuah muatan titik positif khayalan (seperti proton) ketika didekatkan pada berbagai titik di sekitar permukaan isodensitas awan elektron molekul tersebut (Politzer & Murray, 2002).

Dalam antarmuka Avogadro, nilai potensi elektrostatik ini dipetakan di atas permukaan molekul menggunakan spektrum warna standar termodinamik yang sangat intuitif:

- **Merah:** Menandakan kawasan dengan potensi elektrostatik yang sangat negatif. Ini adalah kawasan yang kaya akan ketumpatan elektron, biasanya terpusat pada atom-atom elektronegatif (seperti Oksigen dalam air atau gugus karbonil) atau pada awan elektron π yang terdelokalisasi (seperti pada cincin benzena). Kawasan merah ini adalah situs spesifik untuk serangan pereaksi elektrofilik atau pembentukan ikatan hidrogen sebagai akseptor.
- **Biru:** Merepresentasikan kawasan dengan potensi elektrostatik yang positif (miskin elektron). Kawasan ini timbul akibat penarikan ketumpatan elektron oleh atom tetangga yang elektronegatif, meninggalkan inti yang kurang terlindungi. Kawasan biru adalah titik sasaran utama bagi serangan pereaksi nukleofilik.
- **Hijau/Kuning:** Menunjukkan kawasan yang bersifat netral atau non-polar secara elektrostatik, lazimnya ditemukan pada rantai hidrokarbon alifatik (ikatan C-H).

Kemampuan visualisasi MEP ini mengubah cara mahasiswa meramal mekanisme reaksi organik. Mereka tidak lagi perlu menghafal "panah lengkung" perpindahan elektron secara membabi buta dari buku teks. Melalui pengamatan MEP *in silico*, polaritas molekul menjadi bukti empiris yang kasatmata.

Secara filosofis, keberadaan kutub positif dan negatif yang mengendalikan seluruh interaksi dan reaksi kimiawi di alam semesta ini memberikan manifestasi yang terukur dari konsep *Zaujain* (berpasang-pasangan). Keseimbangan tarik-menarik antara wilayah yang berlawanan muatan ini memastikan materi dapat bergabung, bereaksi, dan menciptakan kehidupan, bukan sekadar entitas statis yang diam. Kesempurnaan arsitektur polaritas mikroskopik ini merupakan pantulan nyata dari ketetapan Ilahiah:

وَمِنْ كُلِّ شَيْءٍ خَلَقْنَا زَوْجَيْنِ لَعَلَّكُمْ تَذَكَّرُونَ

"Dan segala sesuatu Kami ciptakan berpasang-pasangan supaya kamu mengingat kebesaran Allah." (QS. Az-Zariyat [51]: 49).

Spektrum "warna" potensi elektrostatik ini merupakan bukti saintifik dari penciptaan yang berpasangan di tingkat subatomik. Interaksi antara molekul—antara si penyumbang elektron

(merah) dan si penerima elektron (biru)—adalah sunnatullah yang mutlak dalam mempertahankan dinamika kesetimbangan termodinamik alam semesta.

2.5 Penyediaan Fail Input untuk Enjin Komputasi

Fasa terakhir dalam ekosistem pemodelan visual menggunakan Avogadro adalah transformasi dari representasi grafis tiga dimensi menjadi barisan kod dan matriks numerik yang dapat difahami oleh enjin komputasi mekanika kuantum (seperti ORCA, Gaussian, atau GAMESS). Proses penjanaan fail input (*input file generation*) ini merupakan jambatan kritikal yang menghubungkan makmal maya visual dengan pelayan pengkomputeran berprestasi tinggi (HPC). Kesalahan pada tahap ini akan menyebabkan kegagalan logik (*logical error*) atau penamatan pramatang (*normal termination error*) pada program komputasi.

2.5.1 Sintaks Format Fail (.xyz, .mol, .inp)

Pelajar kimia komputasi wajib memahami perbezaan ontologis antara pelbagai format fail kimia digital. Setiap sambungan (*extension*) fail menyimpan hierarki informasi yang berbeza:

- **Format .xyz:** Ini adalah format koordinat Cartesian yang paling primitif. Fail ini hanya menyimpan dua entiti maklumat: jumlah atom di baris pertama, dan matriks tiga jalur (X, Y, Z) bagi setiap unsur di baris seterusnya. Format ini tidak menyimpan maklumat tentang orde ikatan (tunggal, ganda) mahupun cas formal molekul (Lewars, 2016).
- **Format .mol (MDL Molfile):** Berbeza dengan .xyz, fail .mol menyimpan jadual ketersambungan (*connectivity table*). Selain menyimpan koordinat ruang, ia mendefinisikan secara eksplisit atom mana yang berikatan dengan atom mana, serta jenis ikatan tersebut. Ini sangat penting untuk visualisasi awal dan pemindahan data antara perisian.
- **Format .inp / .gjf (Fail Input Komputasi):** Ini adalah format hibrida (gabungan). Selain memuatkan koordinat Cartesian atau koordinat internal (Z-Matrix), fail ini diimbui dengan blok arahan/kata kunci (*keywords*) mekanika kuantum yang spesifik untuk enjin yang dituju (contohnya, arahan untuk menggunakan basis set tertentu, had kitaran integrasi, dan peruntukan memori RAM) (Cramer, 2013).

2.5.2 Interoperabiliti Bersepadu dengan ORCA dan Gaussian

Keunggulan pedagogik Avogadro terletak pada kemampuannya bertindak sebagai "Penterjemah Universal" melalui menu *Extensions*. Daripada menaip kod matriks koordinat secara manual menggunakan *Notepad* yang sangat terdedah kepada ralat, pelajar dapat menjana sintaks fail input secara automatik.

Sebagai contoh, apabila pelajar ingin mengira tenaga keadaan dasar molekul etanol menggunakan ORCA, mereka hanya perlu memilih menu *Extensions > ORCA > Generate ORCA Input*. Satu tettingkap dialog akan muncul membenarkan pelajar menyesuaikan parameter tanpa perlu menghafal sintaks spesifik ORCA. Avogadro akan menjana blok arahan yang secara amnya terbahagi kepada tiga seksyen:

1. **Route Section (Baris Perintah):** Mengandung metodologi komputasi. Contohnya arahan ! B3LYP OPT FREQ 6-31G(d) yang menginstruksikan enjin untuk menggunakan Fungsional Ketumpatan B3LYP, melakukan pengoptimuman geometri (OPT), mengira frekuensi getaran (FREQ), dengan set asas 6-31G(d).
2. **Ketergandaan dan Cas (Charge & Multiplicity):** Mendefinisikan status elektronika molekul secara keseluruhan.
3. **Blok Koordinat:** Avogadro secara langsung menyalin koordinat X, Y, Z molekul yang telah dioptimumkan melalui medan daya (Force Field) di kanvas visual (Neese, 2012).

Proses ini sangat relevan untuk Gaussian (.gjf), di mana Avogadro menyesuaikan format pautan (*Link 0*) seperti %chk=etanol.chk dan %mem=2GB (Foresman & Frisch, 2015). Ini mengurangkan beban kognitif (extraneous cognitive load) pelajar dalam menghafal bahasa pengaturcaraan, membenarkan mereka fokus pada analisis kimia fizikal.

2.5.3 Penyelesaian Ralat Awalan (Troubleshooting)

Walaupun Avogadro menyediakan automasi input, kegagalan (*crash*) kerap terjadi disebabkan oleh kelalaian manusia dalam menetapkan parameter fundamental. Terdapat dua parameter yang paling krusial untuk disemak (troubleshoot) sebelum mengeksekusi fail input:

1. **Keseimbangan Cas (Charge):** Pelajar sering kali membina ion (seperti kation ammonium, NH_4^+) tetapi membiarkan nilai cas pada fail input bernilai 0 (neutral). Algoritma komputasi akan memprotes ralat kerana jumlah proton dalam inti tidak sepadan dengan spektrum elektron yang cuba dikira.
2. **Ketergandaan Spin (Spin Multiplicity):** Formula ketergandaan spin adalah $S = 2s + 1$, di mana S adalah jumlah spin elektron tidak berpasangan. Molekul organik neutral lazimnya berspin singlet (Multiplicity = 1). Namun, untuk spesies radikal (seperti radikal metil) atau molekul oksigen (O_2) dalam keadaan dasar yang bersifat diradikal, ketergandaan spin wajib diset pada nilai 2 (Doublet) atau 3 (Triplet). Kegagalan mendefinisikan spin ini akan menyebabkan keadaan Matriks Fock tidak mencapai konvergensi (Cramer, 2013).

Dalam perspektif falsafah sains Islam, parameter cas dan spin ini mencerminkan takdir atau identiti intrinsik suatu zarah. Keseimbangan (balance) antara proton dan elektron, serta pasangan spin (up and down) adalah syarat mutlak bagi eksistensi materi yang stabil. Memasukkan parameter komputasi yang salah bererti menyalahi "sunnatullah" atau ketetapan alam yang telah diatur dengan penuh hikmah. Allah SWT berfirman:

قَالَ رَبُّنَا الَّذِي أَعْطَى كُلَّ شَيْءٍ خَلْقَهُ ثُمَّ هَدَىٰ

"Musa berkata: 'Tuhan kami ialah (Tuhan) yang telah memberikan kepada tiap-tiap sesuatu bentuk kejadiannya, kemudian memberinya petunjuk.'" (QS. Taha [20]: 50).

Ayat ini menegaskan bahawa setiap entiti—termasuk molekul dan elektron—telah diberikan sifat kejadian (khalqahu) yang unik dan pasti, seperti nilai cas dan momentum sudut spin. Memaksakan pengiraan keadaan singlet pada radikal bebas adalah suatu tindakan "memaksa" materi keluar dari

"petunjuk" (hidayah takwiniyyah) atau sifat asal terjadiannya, yang secara saintifik akan ditolak oleh logik persamaan gelombang mekanika kuantum.

DAFTAR PUSTAKA BAB 2

Carey, F. A., & Sundberg, R. J. (2007). *Advanced organic chemistry: Part A: Structure and mechanisms* (5th ed.). Springer Science & Business Media.

Cramer, C. J. (2013). *Essentials of computational chemistry: theories and models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Foresman, J. B., & Frisch, A. (2015). *Exploring chemistry with electronic structure methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Halgren, T. A. (1996). Merck molecular force field. I. Basis, form, scope, parameterization, and performance of MMFF94. *Journal of Computational Chemistry*, 17(5-6), 490-519.

Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4(1), 1-17.

Hovmöller, S., Zhou, T., & Ohlson, T. (2002). Conformations of amino acids in proteins. *Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography*, 58(5), 768-776.

Hutchison, G. R., Lonie, D. C., & Hanwell, M. D. (2016). *Extending Avogadro: Python Scripting and Plugins*. In *Python in Chemistry* (pp. 1-25). Springer.

Jensen, F. (2017). *Introduction to computational chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Leach, A. R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications* (2nd ed.). Pearson Education.

Lewars, E. G. (2016). *Computational chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics* (3rd ed.). Springer.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2(1), 73-78.

O'Boyle, N. M., Banck, M., James, C. A., Morley, C., Vandermeersch, T., & Hutchison, G. R. (2011). Open Babel: An open chemical toolbox. *Journal of Cheminformatics*, 3(1), 1-14.

Politzer, P., & Murray, J. S. (2002). The fundamental nature and role of the electrostatic potential in atoms and molecules. *Theoretical Chemistry Accounts*, 108(3), 134-142.

Rappe, A. K., Casewit, C. J., Colwell, K. S., Goddard III, W. A., & Skiff, W. M. (1992). UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations. *Journal of the American Chemical Society*, 114(25), 10024-10035.

Weininger, D. (1988). SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 28(1), 31-36.

BAB 3: EKSPLORASI ANTARA MUKA GABEDIT

3.1 Seni Bina dan Fungsionaliti Gabedit

Sejarah awal perkembangan kimia komputasi sangat identik dengan penggunaan terminal baris perintah (*Command Line Interface / CLI*) dalam persekitaran sistem operasi UNIX atau Linux. Pada era tersebut, penyelidik harus menaip secara manual ratusan baris matriks koordinat dan kod pengaturcaraan yang kaku. Hal ini mencipta halangan kognitif (*cognitive barrier*) yang sangat tinggi bagi mahasiswa kimia tulen yang tidak mempunyai latar belakang sains komputer. Kehadiran perisian Gabedit merombak landskap ini secara radikal dengan menawarkan seni bina Antara Muka Pengguna Grafis (GUI) yang memisahkan kerumitan bahasa pengaturcaraan dari fungsionalitas kimia fizikal itu sendiri.

3.1.1 Peranan sebagai GUI (Graphical User Interface) Sejagat

Gabedit, yang dibangunkan oleh Abdul-Rahman Allouche, tidak diklasifikasikan sebagai enjin komputasi (penyelesai persamaan kuantum), melainkan sebuah "GUI Sejagat" atau *Universal Graphical User Interface* (Allouche, 2011). Falsafah seni bina Gabedit dibina atas premis untuk merapatkan jurang antara pembinaan molekul tiga dimensi visual dengan pengekstrakan data termodinamik teks yang kompleks.

Sebagai perisian sumber terbuka (*open source*), fungsionaliti Gabedit merangkumi keseluruhan kitaran hayat eksperimen maya: bermula dari melukis molekul (melalui *Molecule Builder* terbina dalam), menjana fail input, mengeksekusi pelayan komputasi, sehinggalah kepada penterjemahan matriks keluaran (*output*) menjadi representasi visual seperti spektrum dan orbital molekul.

Dalam konteks pedagogik, penggunaan GUI seperti Gabedit menukar paradigma pembelajaran dari "belajar mengekod" (*learning to code*) kepada "belajar sifat kimia" (*learning chemistry*). Apabila seorang mahasiswa tidak lagi diugut oleh ketakutan terhadap ralat sintaks (*syntax error*) yang remeh seperti titik perpuluhan atau jarak koma yang salah, mereka dapat mengalihkan keseluruhan beban memori kerja (*working memory*) mereka ke arah penganalisan yang lebih kritikal, seperti menjustifikasi mengapa peralihan tenaga orbital HOMO ke LUMO pada etilena menghasilkan spektrum UV-Vis pada panjang gelombang tertentu (Lewars, 2016).

3.1.2 Keserasian Silang dengan Pelbagai Enjin Komputasi

Ciri ontologis yang paling dominan dan membezakan Gabedit daripada perisian pesaing seperti GaussView (yang terhad secara eksklusif kepada Gaussian) adalah sifat keserasian silangnya (*cross-compatibility*). Seni bina penterjemah Gabedit membolehkannya bertindak sebagai "Pusat Komando" yang menyokong integrasi dengan pelbagai pakej kimia komputasi berskala besar, termasuk Gamess-US, Gaussian, Molcas, Molpro, MPQC, OpenMopac, ORCA, PCGamess, dan Q-Chem (Allouche, 2011).

Fleksibiliti ini menawarkan kelebihan institusional dan didaktik yang luar biasa. Universiti tidak lagi terikat kepada dasar "penguncian vendor" (*vendor lock-in*). Sebagai contoh, jika sebuah jabatan kimia hanya mampu melanggan Gaussian untuk komputer makmal tertentu, mahasiswa masih boleh berlatih menyusun fail input menggunakan Gabedit di rumah mereka dan menjalankannya menggunakan enjin percuma seperti ORCA atau MOPAC.

Lebih jauh, ciri ini mendidik mahasiswa tentang perbandingan kaedah saintifik (*methodological comparison*). Menggunakan struktur geometri yang sama persis (yang dibina dalam tettingkap Gabedit), pelajar boleh menjana dua fail input berbeza: satu dihantar ke enjin MOPAC untuk pengiraan Semi-Empirikal (PM3), dan satu lagi dihantar ke ORCA untuk pengiraan *Ab Initio* (*Hartree-Fock*). Mereka kemudian membandingkan variasi ralat entalpi pembentukan (ΔH_f) dari kedua-dua teori tersebut. Pemahaman komparatif ini merupakan kemahiran analitik aras tinggi yang dituntut dalam penyelidikan saintifik bertaraf antarabangsa (Cramer, 2013).

3.1.3 Pengurusan Projek Komputasi yang Efisien

Pengiraan kimia kuantum, terutamanya untuk sistem biomolekul kompleks atau simulasi keadaan peralihan (*transition state*), tidak akan selesai dalam hitungan saat. Proses ini boleh memakan masa berjam-jam, hari, malah minggu, serta menghasilkan banyak sisa fail sementara (seperti .chk, .rwf, .tmp). Tanpa mekanisme pengurusan yang baik, eksperimen komputasi akan menjadi kacau-bilau (*chaotic*).

Gabedit mengintegrasikan sistem pengurusan projek dan eksekusi pekerjaan (*job management*) yang sangat efisien.

- **Penyunting Teks Terbina Dalam:** Gabedit menyediakan editor teks pintar dengan sorotan sintaks (*syntax highlighting*) warna. Kata kunci arahan (*route commands*) ditandai dengan warna berbeza berbanding koordinat XYZ, membolehkan pengguna mengesan kesilapan logik sebelum kerja dihantar.
- **Integrasi Eksekusi Tempatan dan Pelayan:** Pelajar boleh memilih untuk menjalankan pengiraan secara "Tempatan" (*Local*) di mana Gabedit akan memanggil direktori C:\Orca (sebagai contoh) secara langsung menggunakan sumber RAM komputer tersebut. Untuk pengiraan aras tinggi, Gabedit membenarkan konfigurasi protokol rangkaian (FTP, SSH) secara natif untuk menghantar skrip kerja terus ke Pelayan Kluster Jarak Jauh (*Remote HPC Server*), tanpa perlu pelajar menguasai arahan PuTTY atau klien SSH berasingan.
- **Penjejakan Masa Nyata (*Real-time parsing*):** Apabila enjin latar belakang sedang berjalan, Gabedit mampu membaca fail log (.out atau .log) secara masa nyata. Pelajar boleh menekan butang *Update/End* untuk memantau nilai Penumpuan Tenaga (*Energy Convergence*) pada setiap langkah kitaran *Self-Consistent Field* (SCF). Jika tenaga berayun dan tidak menunjukkan tanda konvergensi, penyelidik boleh menamatkan kerja lebih awal untuk menjimatkan masa pelayan, kemudian memodifikasi geometri dan memulakannya semula.

Kemampuan menyusun atur data kompleks dari alam mikrokosmik dan menguruskannya ke dalam antara muka terpusat yang teratur ini adalah refleksi kepada prinsip saintifik untuk membawa keteraturan dari kekacauan (entropi).

3.2 Pembinaan Geometri Terstruktur

Fasa paling kritikal yang menentukan kejayaan atau kegagalan (convergence failure) suatu komputasi kuantum adalah kualiti tekaan geometri awal (initial guess geometry). Berbanding dengan Avogadro yang menonjol dalam manipulasi seret-dan-lepas (drag-and-drop) secara intuitif, alat pembina molekul (Molecule Builder) di dalam Gabedit menawarkan pendekatan yang lebih terstruktur dan berorientasi secara langsung kepada penjana matriks koordinat (Z-matrix) yang ketat. Antara muka lukisan Gabedit direka khusus untuk mengendalikan pembinaan sistem molekul dari tahap asas hingga kepada supermolekul kompleks dengan tahap presisi geometri tertinggi.

3.2.1 Penggunaan Templat Struktur dan Serpihan (Fragments)

Dalam penyelidikan kimia organik dan reka bentuk ubat-ubatan, membina struktur cincin aromatik berbilang, sistem polisiklik, atau rangkaian asid amino atom demi atom adalah proses yang sangat tidak efisien dan mendedahkan pengguna kepada ralat penempatan koordinat. Gabedit mengatasi halangan kognitif dan mekanikal ini melalui pangkalan data Serpihan (*Fragments Library*) yang komprehensif.

Apabila pengguna membuka tetingkap *Geometry*, mereka tidak bermula dari kanvas kosong semata-mata, sebaliknya diberikan akses kepada pustaka fragmen prabina yang telah dioptimumkan secara empirikal. Fragmen ini merangkumi:

- **Cincin (Rings):** Dari siklopropana hingga fulerena (C60).
- **Kumpulan Fungsian:** Karboksilat, amida, ester, dan pelbagai substituen umum yang orientasi steriknya telah dikalibrasi.
- **Biomolekul:** Residu asid amino lengkap dan bes nukleik purin/pirimidin untuk pembinaan DNA/RNA.

Dari sudut pedagogi, penggunaan templat ini melatih pelajar untuk berfikir secara "retrosintetik" dalam persekitaran maya. Daripada melihat molekul asid asetilsalisilik (Aspirin) sebagai himpunan rawak 21 atom, pelajar diajar untuk melihatnya sebagai cantuman blok-blok binaan terstruktur: satu cincin benzena, satu kumpulan karboksilat, dan satu kumpulan asetil (Allouche, 2011). Gabedit membenarkan cantuman (*docking/fusing*) serpihan-serpihan ini dengan memilih dua atom yang ingin diikat dan memadam kapasiti valensi berlebihannya. Kaedah ini secara drastik meminimumkan ralat tegangan sterik awal yang sering menyebabkan fail *output* mengalami kegagalan *Segmentation Fault* pada kitaran *Self-Consistent Field* (SCF) yang pertama.

3.2.2 Pembangunan Molekul Tiga Dimensi yang Kompleks

Pembinaan geometri menjadi lebih rumit apabila penyelidik memasuki domain kimia inorganik, khususnya sebatian kompleks logam peralihan (transition metal complexes). Logam peralihan sering mempamerkan nombor koordinasi yang tinggi (seperti oktahedral atau antiprisma persegi) dan memecahkan peraturan oktet konvensional. Melukis ikatan datif secara manual menggunakan koordinat Cartesian (.xyz) adalah sangat menyukarkan.

Gabedit menyediakan fasiliti *Z-Matrix Editor* yang membolehkan manipulasi koordinat internal—iaitu panjang ikatan (r), sudut ikatan (θ), dan sudut dihedral (ϕ)—secara numerik dan presis. Untuk molekul yang kompleks dan berskala makro, Gabedit menyokong pembinaan polimer dan struktur kekisi kristal periodik. Berdasarkan dokumentasi tutorial rasmi perisian ini, Gabedit turut mengintegrasikan keupayaan *Simulated Annealing* melalui pendekatan Dinamika Molekular, menggunakan parameter mekanik molekul AMBER99. Ini bermakna, jika pelajar membina rantai peptida yang berlipat secara rawak, mereka boleh merelaksasikan molekul tersebut (mencari lipatan konformasi paling stabil) menggunakan algoritma dinamika molekul terus dari dalam antara muka Gabedit sebelum mengeksportnya ke penyelesaian kuantum aras tinggi (Allouche, 2011; Leach, 2001).

3.2.3 Pemakaian dan Analisis Kumpulan Titik Simetri (Point Group Symmetry)

Dalam mekanika kuantum teoretik, simetri bukan sekadar elemen estetika visual; ia adalah instrumen matematis yang sangat berkuasa untuk mengurangkan kos pengiraan secara eksponensial. Teori Kumpulan (*Group Theory*) membolehkan matriks persamaan Schrödinger ditapis. Jika sesuatu molekul memiliki elemen simetri tertentu, banyak kamiran tolakan elektron-elektron (electron-electron repulsion integrals) secara automatik akan bernilai sifar, lantas tidak perlu dikira oleh komputer (Cotton, 1990).

Gabedit memiliki keunggulan luar biasa melalui alat *Symmetrize* terbina dalamnya. Apabila pelajar membina molekul benzena, koordinatnya mungkin tidak tepat-tepat rata, menyebabkan perisian komputasi membacanya sebagai struktur tidak simetri (C_1). Melalui Gabedit, pengguna boleh menetapkan toleransi ralat (contohnya 0.1 Angstrom), dan menekan fungsi *Symmetrize*. Algoritma akan mengesan elemen operasi simetri terdekat—seperti paksi putaran C_6 , satah cermin σ_h , dan pusat songsangan i —lalu membetulkan koordinat secara paksa sehingga molekul tersebut mencapai kumpulan titik simetri D_{6h} yang sempurna (Cramer, 2013; Tuvia-Arad & Blonder, 2010).

Penetapan simetri ini bukan sahaja mengurangkan masa Pemprosesan Pusat (CPU Time) berjam-jam kepada hanya beberapa minit, tetapi ia juga sangat kritikal dalam memprediksi mod aktif spektrum Inframerah (IR) dan Raman. Hanya vibrasi yang menyebabkan perubahan momen dipol (secara tak bersimetri) akan muncul dalam spektrum IR.

Secara filosofis dan teologis, kesedaran terhadap kewujudan Kumpulan Titik Simetri molekul ini membuktikan bahawa alam mikrokosmos (subatomik) tidak dibina secara semberono. Ciptaan molekul yang stabil mempunyai pusat simetri, keseimbangan bentuk, dan keharmonian yang amat

rapi. Kesempurnaan ciptaan alam yang tidak ada kepincangan atau kecacatan simetri padanya telah ditegaskan oleh Allah SWT:

الَّذِي خَلَقَ سَبْعَ سَمَاوَاتٍ طِبَاقًا مَّا تَرَى فِي خَلْقِ الرَّحْمَنِ مِنْ تَفَافُوتٍ فَارْجِعِ الْبَصَرَ هَلْ تَرَى مِنْ فُطُورٍ

“Yang telah menciptakan tujuh langit berlapis-lapis. Kamu sekali-kali tidak melihat pada ciptaan Tuhan Yang Maha Pemurah sesuatu yang tidak seimbang. Maka lihatlah berulang-ulang, adakah kamu lihat sesuatu yang tidak seimbang (cacat)?” (QS. Al-Mulk [67]: 3).

Lafaz *tafawut* (ketidakseimbangan / ketidaksahihan proporsi) dinafikan secara mutlak dalam alam semesta. Apabila pengkaji kimia komputasi meneliti putaran operasi $\$C_2\$$, satah σ_v , dan kekisi ruang tiga dimensi suatu geometri yang dioptimumkan menggunakan Gabedit, mereka sejatinya sedang mentadabburi "ketiadaan *tafawut*" tersebut. Keharmonian operasi matriks simetri di dalam molekul adalah bukti iradah Tuhan yang menciptakan materi di atas fondasi keseimbangan yang hakiki dan kekal.

3.3 Penyesuaian Fail Input Komputasi

Fungsi utama Gabedit sebagai Antara Muka Pengguna Grafis (GUI) sejagat bukan sekadar memfasilitasi lukisan molekul, tetapi lebih penting lagi, bertindak sebagai penterjemah logik antara visualisasi manusia dan enjin komputasi matriks. Walaupun Gabedit mengabstraksikan kerumitan kod pengaturcaraan, penyelidik tetap diwajibkan memahami struktur sintaks fail input. Kebergantungan buta kepada tetapan lalai (default) tanpa penyesuaian parameter termodinamika dan kuantum sering kali membuahkan ralat konvergensi atau data yang tidak valid secara saintifik.

3.3.1 Sintaks dan Kata Kunci (Keywords) Spesifik

Setiap enjin komputasi (seperti ORCA, Gaussian, atau Gamess) mempunyai "dialek" bahasa pengaturcaraannya yang tersendiri. Gabedit memecahkan halangan linguistik ini melalui alat *Input Generator* yang dikhususkan mengikut program sasaran.

Sebagai contoh, apabila pengguna menyasarkan enjin ORCA, Gabedit menyediakan kotak dialog interaktif di mana pengguna hanya perlu menanda (check) kotak pilihan seperti *Optimization*, *Frequencies*, atau *Solvation*. Gabedit kemudiannya akan menterjemahkan pilihan tersebut ke dalam blok sintaks arahan (route section) yang tepat, contohnya ! B3LYP OPT FREQ 6-31G(d). Sebaliknya, jika pengguna beralih kepada enjin Gaussian, Gabedit secara automatik menyusun struktur fail yang berbeza, bermula dengan arahan pemaotan memori %mem, fail semakan %chk, dan baris arahan #p B3LYP/6-31G(d) opt freq (Foresman & Frisch, 2015).

Kemahiran yang paling kritikal di sini adalah penentuan *Charge* (Cas Formal) dan *Spin Multiplicity* (Ketergandaan Spin). Bagi molekul radikal atau ion kompleks logam peralihan, penentuan spin yang salah dalam fail input akan menyebabkan pengiraan korelasi elektron gagal secara total. Gabedit membolehkan pelajar mengubah suai parameter ini secara terus dari antara muka sebelum kod input dijana, melatih kesedaran awal (pre-computation awareness) terhadap identiti elektronik molekul (Cramer, 2013).

3.3.2 Kriteria Pemilihan Basis Set dan Metodologi

Jantung kepada mana-mana pengiraan mekanika kuantum terletak pada pemilihan gabungan Metodologi (seperti Hartree-Fock, MP2, atau Teori Fungsi Ketumpatan/DFT) dan *Basis Set* (Set Asas). Gabedit menyediakan pustaka jantai bawah (drop-down library) yang ekstensif, membebaskan pengguna daripada keharusan menghafal nama set asas yang rumit.

Dalam mengkaji mekanisme tindak balas atau tenaga pengujaan, pelajar harus diedukasi untuk tidak sentiasa memilih set asas terbesar (seperti *aug-cc-pVQZ*) kerana ia akan menuntut kos pengiraan dan memori RAM yang melampau. Melalui Gabedit, pendidik dapat menunjukkan cara menambah Fungsi Polarisasi (dilambangkan dengan '*' atau '(d,p)') untuk memperhitungkan asimetri awan elektron ketika ikatan kimia terbentuk. Tambahan Fungsi Resapan (Diffuse Functions, dilambangkan dengan '+' atau '++') turut boleh dipilih secara spesifik apabila simulasi melibatkan anion (ion negatif) yang awan elektronnya mengembang menjauhi nukleus (Jensen, 2017).

Kefahaman tentang tahap hierarki teori ini mendidik sifat saintifik yang berhati-hati (prudent). Penyelidik harus mengimbangi antara ketepatan (accuracy) mutlak alam realiti dan batasan (approximation) sumber daya komputasi yang dimiliki.

3.3.3 Pengurusan Pekerjaan (Job Management) Tempatan dan Pelayan

Setelah fail input (seperti *h2.inp*) berjaya disesuaikan dan disimpan, fasa seterusnya adalah pengeksekusian (running) kerja komputasi. Menguruskan simulasi yang memakan masa berjam-jam memerlukan protokol eksekusi yang sistematik. Melalui menu eksekusi Gabedit, pengguna diperhadapkan dengan seni bina pengurusan kerja yang canggih, yang terbahagi kepada dua mode utama:

Pertama, *Server Local* (Pelayan Tempatan). Bagi molekul ringkas, pelajar boleh menetapkan direktori kerja tempatan (contohnya memanggil perisian secara terus di *C:\Orca*) dan Gabedit akan mengarahkan pemproses komputer meja (CPU) untuk menyelesaikan matriks pengiraan.

Kedua, *Remote Host* (Pelayan Jarak Jauh). Untuk sistem biomolekul yang masif, Gabedit mengintegrasikan protokol rangkaian (seperti FTP, SSH, dan SCP) secara natif. Pelajar hanya perlu memasukkan Alamat IP pelayan (Superkomputer Universiti), nama pengguna, dan kata laluan. Gabedit akan menghantar fail *.inp* merentasi rangkaian, mengarahkan pelayan untuk mengirannya, dan menarik kembali fail output (*.out* atau *.log*) ke komputer pengguna secara automatik setelah tamat (Allouche, 2011).

Semasa program berjalan, Gabedit menyediakan butang *Update/End* yang amat berguna untuk penganalisan masa nyata (real-time). Pelajar boleh menekan butang ini untuk meninjau kitaran *Self-Consistent Field* (SCF) atau peminimuman kecerunan geometri. Apabila skrin log memaparkan teks "ORCA TERMINATED NORMALLY", ia menandakan perhitungan telah mencapai konvergensi tenaga yang dituntut.

Proses penyesuaian fail input yang sangat teliti, dengan mengambil kira setiap parameter, ukuran memori, dan fungsi gelombang ini, sejatinya merupakan cerminan kepada keuniversalan undang-undang "ukuran" (miqdar) di alam semesta. Tidak ada satu pun entiti di alam ini, waima pergerakan elektron, yang bebas daripada ketetapan ukurannya. Kesedaran ini disandarkan kepada firman Allah SWT:

اللَّهُ يَعْلَمُ مَا تَحْمِلُ كُلُّ أُنْثَىٰ وَمَا تَغِيضُ الْأَرْحَامَ وَمَا تَزْدَادُ وَكُلُّ شَيْءٍ عِنْدَهُ بِمِقْدَارٍ

"Allah mengetahui apa yang dikandung oleh setiap perempuan, dan kandungan rahim yang kurang sempurna dan yang bertambah. Dan segala sesuatu pada sisi-Nya ada ukurannya." (QS. Ar-Ra'd [13]: 8).

Lafaz *bimiqdar* (dengan ukuran yang terperinci) dalam ayat ini mengingatkan ahli kimia komputasi bahawa keupayaan meramal tenaga entalpi atau mod getaran dengan tepat sangat bergantung kepada sejauh mana ketepatan "ukuran parameter" (basis set, toleransi ralat, limit kitaran SCF) yang dimasukkan ke dalam fail input. Kecuaian dalam menetapkan parameter akan menghasilkan jawapan yang melencong daripada ketetapan *sunnatullah* yang sebenar.

3.4 Visualisasi Pasca Komputasi

Tahap komputasi yang dijalankan oleh mesin (seperti Gaussian atau ORCA) pada dasarnya hanyalah proses penyelesaian matriks persamaan matematika kompleks yang menghasilkan ribuan baris angka. Bagi seorang ahli kimia, angka-angka mentah ini tidak memiliki makna empiris hingga ia ditransformasikan kembali menjadi model tiga dimensi. Di sinilah letak keunggulan komparatif Gabedit; ia tidak hanya berfungsi sebagai "pintu masuk" (pembuat *file input*), tetapi juga sebagai "pintu keluar" yang menerjemahkan data abstrak numerik menjadi visualisasi kimia fisik yang komprehensif dan intuitif.

3.4.1 Ekstraksi Data dari File Output (.out / .log)

Setelah algoritma *Self-Consistent Field* (SCF) mencapai konvergensi dan program dinyatakan berhenti secara normal (*normal termination*), perangkat lunak akan menghasilkan *file output* berekstensi .out atau .log. File ini sering kali berukuran sangat besar dan berisi matriks fungsi gelombang penuh. Jika mahasiswa ditugaskan untuk membuka file ini menggunakan editor teks biasa (seperti *Notepad*), mereka akan kewalahan mencari data spesifik seperti entalpi pembentukan atau frekuensi vibrasi di antara puluhan ribu baris teks.

Gabedit mengatasi beban kognitif ini melalui modul *Gabedit's Output Parser*. Modul cerdas ini secara otomatis menavigasi struktur teks file *output* dan mengekstraksi data termodinamika secara instan. Melalui satu klik pada menu, mahasiswa dapat menarik nilai Energi Total (dalam satuan Hartree), Energi Bebas Gibbs, Entalpi (H), dan Entropi (S) pada suhu referensi 298.15 K. Fitur ekstraksi ini sangat krusial ketika mahasiswa melakukan studi komparatif kestabilan konformasi atau saat menghitung konstanta laju reaksi menggunakan profil energi keadaan transisi (*transition state*) (Lewars, 2016). Pendekatan ini mengubah mahasiswa dari sekadar "pembaca data" menjadi "analisis termodinamika", menghemat waktu secara signifikan dalam pengumpulan data penelitian.

3.4.2 Visualisasi Orbital Molekul (HOMO-LUMO)

Dalam Teori Orbital Molekul Garis Depan (*Frontier Molecular Orbital / FMO Theory*) yang digagas oleh Kenichi Fukui, reaktivitas suatu molekul sangat ditentukan oleh interaksi antara orbital terluarnya, yaitu HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) dan LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*). Secara konvensional, mahasiswa diajarkan FMO melalui diagram energi satu dimensi di papan tulis, yang sering kali gagal menyampaikan bentuk spasial dari orbital tersebut.

Gabedit merombak metodologi pedagogik ini secara radikal. Dengan memuat file *output* komputasi (seperti .chk dari Gaussian atau .gbw dari ORCA), antarmuka grafis Gabedit mampu menghitung nilai isosurface (permukaan isodensitas) dari fungsi gelombang elektronik dan memproyeksikannya secara tiga dimensi di sekitar kerangka atom (Allouche, 2011).

- **HOMO:** Divisualisasikan dengan warna khas (misalnya merah dan biru untuk membedakan fase gelombang positif dan negatif), menunjukkan di wilayah ruang manakah elektron berikatan paling tidak stabil dan siap didonorkan kepada molekul penyerang (elektrofil).
- **LUMO:** Divisualisasikan sebagai ruang kosong (antibonding) yang merepresentasikan sisi paling menguntungkan untuk menerima serangan elektron dari molekul lain (nukleofil).

Dengan memutar molekul yang dilapisi orbital ini secara 3D, mahasiswa dapat melihat secara langsung konsep halangan sterik (*steric hindrance*) dan orientasi serangan nukleofilik (seperti lintasan Burgi-Dunitz pada gugus karbonil). Memahami bahwa reaksi kimia bukan sekadar pertukaran garis ikatan di atas kertas, melainkan tumpang tindih spasial (*spatial overlap*) dari awan fungsi gelombang, merupakan salah satu pencerahan epistemologis terbesar dalam pendidikan kimia modern (Fukui, 1982).

3.4.3 Pemetaan Kerapatan Elektron Terperinci (MEP)

Selain orbital spesifik, perilaku makroskopik molekul—seperti kelarutan, pembentukan ikatan hidrogen, dan titik didih—ditentukan oleh sebaran kerapatan elektron secara keseluruhan (*total electron density*). Gabedit menyediakan instrumen untuk memetakan Permukaan Potensial Elektrostatik (*Molecular Electrostatic Potential / MEP*).

Proses ini melibatkan pemetaan nilai potensial (muatan) Coulomb di atas permukaan batas volume Van der Waals molekul. Antarmuka Gabedit merender permukaan ini dengan spektrum warna termodinamika. Daerah yang kaya elektron (potensial negatif) diwarnai merah, sedangkan daerah yang miskin elektron (potensial positif) diwarnai biru (Cramer, 2013). Sebagai contoh, pemetaan MEP pada molekul air (H_2O) menggunakan Gabedit secara kasatmata akan memperlihatkan kutub merah menyala di sekitar atom Oksigen dan dua kutub biru pada atom Hidrogen, membuktikan secara kuantum mengapa air bersifat sangat polar.

Secara filosofis, visualisasi komputasi yang menjembatani alam abstrak kuantum (yang tidak dapat dilihat oleh mata telanjang atau mikroskop elektron terkuat sekalipun) menjadi gambaran visual

yang dapat diindra oleh akal manusia, sangat sejalan dengan konsep sains Islam tentang membedah alam *Bathin* (tersembunyi) melalui instrumen *Zhahir* (nyata). Allah SWT berfirman:

هُوَ الْأَوَّلُ وَالْآخِرُ وَالظَّاهِرُ وَالْبَاطِنُ ۗ وَهُوَ بِكُلِّ شَيْءٍ عَلِيمٌ

“Dialah Yang Awal dan Yang Akhir, Yang Zhahir dan Yang Bathin; dan Dia Maha Mengetahui segala sesuatu.” (QS. Al-Hadid [57]: 3).

Sains fisika kuantum berurusan dengan hal yang "Bathin"—pergerakan tak kasatmata fungsi gelombang probabilitas elektron yang menyelimuti inti atom. Perangkat lunak seperti Gabedit, melalui layar komputernya, mengangkat rahasia yang *Bathin* tersebut menjadi fenomena *Zhahir* (terlihat dan terukur) berupa gradien warna potensial elektrostatik dan bentuk balon orbital. Kesadaran ini mendidik para ilmuwan bahwa betapapun canggihnya teknologi visualisasi yang diciptakan, ia hanyalah alat untuk menyingkap sebagian kecil dari ketetapan dan arsitektur rapi yang telah dikonstruksi oleh Al-Khaliq (Sang Pencipta) di alam mikrokosmos.

BAB 4: PERHITUNGAN *AB INITIO* DAN DFT DENGAN ORCA

4.1 Kerangka Teori Sistem ORCA

Transisi dari tahap pemodelan visual (seperti menggunakan Avogadro atau Gabedit) menuju ranah simulasi energi teoretis memerlukan pemahaman mendalam tentang instrumen penyelesaian persamaan matematika kuantum. Salah satu perangkat lunak yang paling revolusioner dan mendominasi publikasi jurnal internasional saat ini adalah ORCA. Dikembangkan oleh kelompok riset Prof. Frank Neese di Max Planck Institute, ORCA menonjol karena sifatnya yang gratis untuk kepentingan akademik, sangat efisien dalam komputasi paralel, dan dirancang khusus dengan keunggulan pada perhitungan spektroskopi serta sistem molekul bercangkang terbuka (*open-shell*), seperti kompleks logam transisi (Neese, 2012). Memahami kerangka teori di balik ORCA adalah prasyarat mutlak agar mahasiswa tidak terjebak menjadi sekadar "operator program" yang buta terhadap konsep fisika di dalamnya.

4.1.1 Dasar Metodologi *Ab Initio*

Secara etimologis, *ab initio* berasal dari bahasa Latin yang berarti "dari awal" atau "dari prinsip pertama". Dalam kimia komputasi, metode *ab initio* merujuk pada penyelesaian Persamaan Schrödinger yang sepenuhnya bergantung pada konstanta fisika fundamental (seperti massa elektron, tetapan Planck, dan kecepatan cahaya) tanpa menggunakan parameter empiris atau data eksperimen apa pun untuk menyesuaikan hasil (Cramer, 2013).

Pondasi dari perhitungan *ab initio* di dalam ORCA bermula dari pendekatan Hartree-Fock (HF). Pendekatan ini mengasumsikan bahwa setiap elektron bergerak secara independen dalam sebuah medan potensial rata-rata yang dihasilkan oleh seluruh inti atom dan elektron lainnya (medan rata-

rata atau *mean-field approximation*). Meskipun metode HF mampu memberikan gambaran awal mengenai konfigurasi orbital dan mampu memulihkan sekitar 99% dari energi total molekul, 1% energi yang hilang tersebut sangatlah fatal. Kehilangan energi ini disebabkan oleh kegagalan HF dalam memperhitungkan "korelasi elektron"—fakta bahwa elektron, karena muatannya yang sejenis, akan selalu berusaha menghindari satu sama lain secara instan, bukan sekadar merasakan gaya tolakan rata-rata (Jensen, 2017).

Untuk memulihkan energi korelasi ini, ORCA menyediakan algoritma pasca-Hartree-Fock (*post-HF*) dengan tingkat presisi yang sangat tinggi, seperti Teori Pertubasi Møller-Plesset orde kedua (MP2) dan metode *Coupled Cluster* (CCSD(T)). Metode CCSD(T) hingga saat ini diakui secara global sebagai "Standar Emas" (*Gold Standard*) dalam kimia komputasi karena akurasinya yang hampir menyamai data termodinamika eksperimental.

Secara filosofis, keberhasilan metode *ab initio* yang murni mengandalkan konstanta fundamental ini menjadi bukti keagungan "Sunnatullah" (ketetapan Allah). Alam semesta subatomik beroperasi berdasarkan hukum-hukum matematis yang sangat teratur dan tidak berubah-ubah. Keteraturan konstanta fisika dasar ini merefleksikan firman Allah SWT:

فَلَنْ تَجِدَ لِسُنَّتِ اللَّهِ تَبْدِيلًا ۖ وَلَنْ تَجِدَ لِسُنَّتِ اللَّهِ تَحْوِيلًا

“Maka sekali-kali kamu tidak akan mendapat penggantian bagi sunnah Allah, dan sekali-kali tidak (pula) akan menemui penyimpangan bagi sunnah Allah itu.” (QS. Fathir [35]: 43).

Persamaan mekanika kuantum yang dipecahkan oleh program ORCA pada dasarnya adalah upaya akal manusia untuk membaca sandi-sandi ketetapan fisika (sunnatullah) yang tak pernah mengalami penyimpangan sejak alam semesta diciptakan.

4.1.2 Teori Fungsional Kerapatan (DFT): Pendekatan Modern

Meskipun metode *post-HF* sangat akurat, beban komputasinya (waktu dan memori RAM) meningkat secara eksponensial seiring bertambahnya jumlah atom. Oleh karena itu, simulasi untuk sistem biokimia yang besar atau nanopartikel tidak mungkin dilakukan menggunakan metode CCSD(T). Sebagai solusinya, ORCA sangat dioptimalkan untuk mengeksekusi Teori Fungsional Kerapatan (Density Functional Theory / DFT).

Berbeda dengan mekanika gelombang konvensional yang berupaya mencari fungsi gelombang elektron Ψ yang sangat rumit, DFT (berdasarkan Teorema Hohenberg-Kohn) menyederhanakan masalah dengan menyatakan bahwa energi total dari keadaan dasar suatu sistem sepenuhnya dapat ditentukan oleh Kerapatan Elektron-nya, $\rho(r)$ (Koch & Holthausen, 2001). DFT menjadi sangat populer karena ia mampu memasukkan efek korelasi elektron dengan biaya komputasi yang hampir sama murahannya dengan metode Hartree-Fock dasar.

Dalam praktiknya menggunakan ORCA, mahasiswa akan sering menggunakan fungsional hibrida seperti B3LYP atau fungsional meta-GGA seperti M06-2X. Kelemahan utama dari DFT standar adalah ketidakmampuannya mendeskripsikan interaksi dispersi London (gaya Van der Waals jarak jauh). Kegagalan ini dapat menyebabkan dua rantai polimer yang berdekatan saling menjauh

secara tidak logis di dalam simulasi komputasi. ORCA mengatasi kelemahan ini secara brilian dengan mengintegrasikan koreksi dispersi empiris Grimme (seperti DFT-D3 atau D4) secara langsung di dalam kode perhitungannya (Grimme et al., 2010). Penambahan kata kunci seperti ! B3LYP D3BJ pada blok input telah menjadi standar publikasi internasional untuk mendapatkan energi ikatan non-kovalen yang akurat.

4.1.3 Anatomi Blok Input Perangkat Lunak ORCA

Salah satu alasan kuat mengapa ORCA sangat direkomendasikan dalam modul pedagogik di universitas adalah kemudahan dan keluwesan sintaks inputnya. Dibandingkan dengan program generasi lama yang menuntut format kolom yang kaku, file input ORCA berbentuk teks bebas (*free-format*) yang sangat ramah pengguna.

Struktur anatomi file input ORCA (.inp) terdiri dari blok-blok yang logis dan jelas:

1. **Baris Perintah Utama (Simple Input Line):** Selalu diawali dengan tanda seru (!). Di sinilah instruksi metodologi diletakkan. Contoh: ! B3LYP def2-TZVP Opt Freq. Baris sederhana ini menginstruksikan ORCA untuk menggunakan metode DFT fungsional B3LYP, set basis def2-TZVP (Ahlich basis set yang sangat efisien dalam ORCA), serta melakukan Optimasi Geometri sekaligus perhitungan Frekuensi Vibrasi.
2. **Blok Instruksi Khusus (Block Input):** Diawali dengan % dan diakhiri dengan end. Digunakan untuk modifikasi level mahir, seperti pengaturan jumlah inti memori (RAM), alokasi komputasi paralel (CPU *cores*), atau parameter untuk memprediksi spektrum Resonansi Magnetik Nuklear (NMR) dan UV-Vis (Neese, 2012).
3. **Blok Geometri:** Mendefinisikan struktur molekul, yang dimulai dengan tanda bintang tunggal (*) diikuti oleh format input, cas (muatan), dan multiplisitas spin. Contoh untuk molekul air netral dalam format koordinat X,Y,Z adalah * xyz 0 1, lalu barisan koordinat, dan diakhiri dengan *.

Desain sintaks yang transparan ini meminimalisasi tingkat stres (beban kognitif asing) mahasiswa saat menghadapi *error*. Mereka dapat fokus pada penalaran struktur elektronik molekul, bukan pada pencarian spasi atau koma yang salah tempat. Kejelasan input ORCA membuka jalan bagi analisis reaksi katalitik yang mendalam di sub-bab selanjutnya.

4.2 Optimasi Geometri dan Dinamika Pencarian

Setelah membangun struktur molekul awal menggunakan antarmuka grafis (GUI) dan menyusun *file input* yang tepat, tahapan komputasi esensial yang pertama kali dieksekusi oleh perangkat lunak ORCA adalah pencarian geometri yang stabil. Proses ini secara matematis dikenal sebagai optimasi geometri. Mahasiswa harus menyadari bahwa koordinat atom yang mereka gambar secara manual (atau bahkan melalui pembersihan instan *medan gaya/force field*) masih memiliki energi potensial yang tinggi. Algoritma ORCA bertugas menggerakkan atom-atom tersebut secara

sistematis melintasi Permukaan Energi Potensial (*Potential Energy Surface / PES*) hingga mencapai konfigurasi dengan tingkat energi terendah.

4.2.1 Kriteria Konvergensi (Convergence Criteria) SCF

Inti dari perhitungan mekanika kuantum dalam ORCA (baik menggunakan metode *ab initio* maupun DFT) adalah siklus *Self-Consistent Field* (SCF) atau Medan Konsisten Mandiri. Karena fungsi gelombang elektron bergantung pada potensial rata-rata, dan potensial rata-rata bergantung pada fungsi gelombang elektron, persamaan diferensial ini tidak dapat diselesaikan sekaligus. Ia harus dipecahkan secara iteratif (berulang-ulang) (Cramer, 2013).

Dalam proses iterasi ini, ORCA akan terus menebak matriks kerapatan baru hingga perubahan energi di antara dua siklus berturut-turut berada di bawah ambang batas (*threshold*) yang sangat kecil. Pada optimasi geometri, tidak hanya energi elektroniknya yang harus konvergen, tetapi juga gradien (kecerunan/turunan pertama energi terhadap posisi atom). Kriteria konvergensi di dalam ORCA didefinisikan dengan sangat ketat.

Mahasiswa dapat memodifikasi kriteria ini menggunakan kata kunci khusus:

- Opt: Kriteria optimasi standar yang memadai untuk molekul organik umum. ORCA akan berhenti memindahkan atom jika perubahan energi (ΔE) mencapai 5.0×10^{-6} Hartree dan gradien maksimum turun di bawah 3.0×10^{-4} a.u.
- TightOpt: Kriteria yang sangat ketat, wajib digunakan apabila struktur tersebut akan dilanjutkan untuk perhitungan frekuensi termodinamika presisi tinggi atau untuk publikasi jurnal internasional (Neese, 2012). Kriteria ini memastikan molekul benar-benar berada di dasar sumur potensial tanpa adanya gaya sisa (*residual force*) pada atom.

Pemahaman tentang proses konvergensi SCF ini menjauhkan mahasiswa dari mentalitas "kotak hitam" (*black box*). Ketika iterasi SCF gagal mencapai konvergensi (sebuah *error* yang sangat umum terjadi pada senyawa kompleks logam), mahasiswa yang literat secara komputasi akan tahu bahwa mereka perlu mengubah algoritma pergeseran level (*Level Shift*) atau memperlambat pembaruan matriks (*redaman/ Damping*) di dalam blok input ORCA, alih-alih menyerah dan menganggap program tersebut rusak.

4.2.2 Analisis Energi Titik Tunggal (Single Point Energy)

Terdapat perbedaan fundamental secara ontologis antara Optimasi Geometri dan perhitungan Energi Titik Tunggal (*Single Point Energy / SPE*). Jika optimasi geometri memanipulasi koordinat atom untuk mencari posisi paling stabil, maka perhitungan *Single Point* (ditandai dengan kata kunci ! SP atau dijalankan secara bawaan jika tidak ada kata kunci Opt) "membekukan" seluruh pergerakan atom. ORCA hanya akan menghitung struktur elektronik dan energi total dari molekul tepat pada konfigurasi spasial tunggal tersebut (Jensen, 2017).

Dari sudut pandang efisiensi riset, analisis komputasi modern sering kali mengombinasikan kedua teknik ini dalam strategi bertingkat (*multi-level strategy*). Sebagai contoh, jika mahasiswa ingin menghitung energi reaksi yang sangat akurat untuk sistem molekul besar, melakukan optimasi

geometri menggunakan metode *Coupled Cluster* (CCSD(T)) akan memakan waktu berbulan-bulan di superkomputer. Oleh karena itu, strategi yang direkomendasikan adalah:

1. Melakukan **Optimasi Geometri** menggunakan metode komputasi yang "murah" secara komputasional namun terpercaya secara struktural, seperti DFT (contoh: ! B3LYP/G def2-SVP Opt).
2. Setelah struktur mencapai minimum lokal, koordinat tersebut diambil, dan dilakukan perhitungan **Energi Titik Tunggal (SPE)** menggunakan metode teoretis tingkat tinggi dengan *basis set* yang jauh lebih besar (contoh: ! CCSD(T) def2-QZVPP).

Pendekatan hibrida ini (sering ditulis dalam format literatur sebagai CCSD(T)/def2-QZVPP // B3LYP/def2-SVP) memberikan energi termodinamika kelas dunia dengan memakan waktu riset yang jauh lebih masuk akal.

4.2.3 Algoritma Pencarian Keadaan Transisi (Transition State)

Eksplorasi yang paling kompleks namun memberikan wawasan paling revolusioner dalam kimia komputasi adalah penentuan Keadaan Transisi (*Transition State* / TS). Berbeda dengan molekul stabil (reaktan atau produk) yang berada di dasar lembah PES (minimum global/lokal), keadaan transisi adalah struktur antara (*intermediate*) berumur sangat pendek yang terletak persis di puncak lintasan reaksi. Secara matematis, TS adalah titik pelana orde pertama (*first-order saddle point*) pada Permukaan Energi Potensial—ia merupakan titik maksimum di sepanjang koordinat reaksi (jalur pemutusan/pembentukan ikatan), namun tetap merupakan minimum di semua dimensi getaran lainnya (Schlegel, 1982).

Dalam ORCA, penemuan struktur TS diinstruksikan melalui kata kunci ! OptTS. Algoritma ini jauh lebih sensitif dan mudah gagal dibandingkan optimasi standar. Untuk berhasil, algoritma ORCA membutuhkan tekaan geometri awal (*initial guess*) yang hampir sempurna menyerupai keadaan transisi yang sesungguhnya. Selain itu, kalkulasi ini wajib divalidasi dengan perhitungan Frekuensi Vibrasi (! Freq).

Validasi matematis dari keberhasilan TS adalah hasil matriks Hessian yang memunculkan **tepat satu frekuensi imajiner** (ditulis dengan angka negatif pada file *output*, misalnya -1500 cm^{-1}). Frekuensi imajiner tunggal ini merepresentasikan vektor getaran yang secara fisik mengarah pada terputusnya reaktan menjadi produk. Jika tidak ada frekuensi imajiner, molekul tersebut hanyalah reaktan stabil. Jika terdapat lebih dari satu frekuensi imajiner, molekul tersebut berada di titik pelana tingkat tinggi yang tidak memiliki makna kimia (Lewars, 2016).

Keseimbangan matematis yang luar biasa cermat antara lembah energi (molekul stabil) dan puncak energi (keadaan transisi) yang dihitung oleh algoritma ORCA ini merefleksikan prinsip keseimbangan agung (*Al-Mizan*) di alam semesta. Allah SWT menegaskan penciptaan yang berbasis pada keseimbangan ini dalam firman-Nya:

﴿وَالسَّمَاءَ رَفَعَهَا وَوَضَعَ الْمِيزَانَ ﴿٧﴾ أَلَّا تَطْغَوْا فِي الْمِيزَانِ ﴿٨﴾ وَأَقِيمُوا الْوَزْنَ بِالْقِسْطِ وَلَا تُخْسِرُوا الْمِيزَانَ ﴿٩﴾﴾

"Dan Allah telah meninggikan langit dan Dia meletakkan neraca (keadilan). Supaya kamu jangan melampaui batas tentang neraca itu. Dan tegakkanlah timbangan itu dengan adil dan janganlah kamu mengurangi neraca itu." (QS. Ar-Rahman [55]: 7-9).

Ketetapan "neraca" (mizan) di alam atomik bermanifestasi pada posisi koordinat nukleus dan elektron yang terus-menerus mencari kesetimbangan termodinamik. Memaksa atom melampaui batas energi aktivasinya (melampaui mizan) membutuhkan input energi yang proporsional. Kegagalan konvergensi dalam algoritma SCF atau kegagalan mencari titik pelana (*saddle point*) sejatinya adalah karena tekaan manusia (peneliti) yang menyalahi *mizan* koordinat ruang dan tolakan awan elektron yang telah ditetapkan sunnatullah-nya. Kimia komputasi dengan demikian merupakan usaha keras ilmuwan untuk menyelaraskan diri dan memahami "neraca" keseimbangan kuantum tersebut.

4.3 Analisis Termokimia Kuantitatif

Mekanika kuantum secara eksklusif beroperasi pada skala mikroskopis (pada suhu absolut 0 Kelvin dalam ruang hampa), sedangkan eksperimen kimia di dunia nyata (makroskopis) sangat bergantung pada variabel suhu, tekanan, dan pelarut. Analisis termokimia kuantitatif adalah instrumen matematis yang menjembatani kedua dunia ini. Melalui pendekatan mekanika statistik, perangkat lunak ORCA mampu mengekstrapolasi energi elektronik dari sebuah molekul tunggal menjadi besaran termodinamika makroskopis seperti Entalpi (\$H\$), Entropi (\$S\$), dan Energi Bebas Gibbs (\$G\$).

4.3.1 Ekstraksi Energi Bebas Gibbs dan Fungsi Partisi

Untuk mendapatkan parameter termodinamika di dalam ORCA, mahasiswa diwajibkan menyisipkan kata kunci ! Freq (kalkulasi frekuensi vibrasi) pada *file input*, yang biasanya dieksekusi setelah molekul mencapai geometri minimumnya (! Opt). Kalkulasi frekuensi ini tidak hanya berguna untuk memprediksi spektrum Inframerah (IR), tetapi merupakan fondasi utama dalam menghitung Fungsi Partisi (\$q\$) mekanika statistik.

Fungsi partisi merupakan ukuran jumlah status energi mikro yang dapat diakses oleh sebuah sistem pada suhu tertentu. Energi energi molekuler total dikonstruksi dari empat komponen utama:

1. **Energi Translasi (\$q_{trans}\$):** Pergerakan molekul secara keseluruhan di dalam ruang 3D.
2. **Energi Rotasi (\$q_{rot}\$):** Perputaran molekul pada sumbu utamanya (membutuhkan momen inersia dari geometri yang teroptimasi).
3. **Energi Vibrasi (\$q_{vib}\$):** Getaran pegas antar atom. Di sinilah letak parameter penting bernama Koreksi Energi Titik Nol (*Zero-Point Energy* / ZPE). Meskipun pada suhu absolut 0 Kelvin, molekul tidak pernah benar-benar diam secara kuantum; molekul selalu bergetar pada tingkat energi terendahnya.
4. **Energi Elektronik (\$q_{elec}\$):** Energi dari distribusi awan elektron (Cramer, 2013).

Dengan memproses keempat fungsi partisi ini menggunakan distribusi Boltzmann pada suhu standar (biasanya 298.15 K dan tekanan 1 atm), ORCA akan mencetak nilai koreksi termal. Energi Bebas Gibbs (ΔG) akhirnya diekstraksi dari *file output* dan menjadi penentu utama secara termodinamika apakah suatu reaksi bersifat spontan ($\Delta G < 0$) atau tidak spontan ($\Delta G > 0$). Melatih mahasiswa mencari dan menggunakan nilai ini mendidik mereka untuk mengorelasikan kestabilan elektronik di tingkat subatomik dengan fenomena termodinamika kasatmata.

4.3.2 Perhitungan Entalpi Reaksi Mutlak

Penggunaan termokimia komputasi yang paling aplikatif dalam riset adalah memprediksi entalpi suatu reaksi (ΔH_{rxn}). Hal ini sangat krusial terutama untuk senyawa yang sulit, mahal, atau berbahaya untuk disintesis di laboratorium. Secara komputasional, entalpi reaksi dihitung menggunakan modifikasi Hukum Hess, yaitu dengan mengurangi total Entalpi produk dengan total Entalpi reaktan.

Sebagai sebuah studi kasus tingkat lanjut, termokimia komputasi ORCA/Gaussian dapat diaplikasikan untuk menghitung entalpi pembentukan (ΔH_f°) turunan alkil tiofena, sebagaimana dikaji dalam riset empiris oleh Nikoofard (2015). Dalam kajian tersebut, entalpi pembentukan standar fase gas dievaluasi menggunakan teori fungsional kerapatan tingkat B3LYP dengan *basis set* 6-31G(d,p) (Nikoofard, 2015).

Prosedur matematis yang dilakukan oleh peneliti (dan dapat direplikasi oleh mahasiswa) adalah:

1. Menghitung entalpi total molekul target (misalnya 2-metiltiofena) dengan ! Opt Freq.
2. Menghitung entalpi total atom-atom penyusunnya dalam keadaan standar secara terpisah (misalnya atom C dan atom H dalam fasa gas).
3. Memasukkan koreksi Energi Atomisasi termal dan mengkalibrasinya dengan data eksperimen dari tabel standar (seperti NIST *Chemistry WebBook*).

Akurasi luar biasa yang ditunjukkan oleh perhitungan komputasi terhadap nilai eksperimen (dengan ralat atau galat seringkali di bawah 2 kkal/mol) menumbuhkan keyakinan epistemologis bahwa rumus-rumus abstrak mekanika gelombang memiliki pijakan realitas yang kuat di alam fisika.

4.3.3 Pemodelan Efek Pelarut (Solvation Models)

Kelemahan fatal dari perhitungan energi fase gas (*gas phase*) adalah ketidaksesuaiannya dengan reaksi kimia organik sintesis, di mana hampir 90% reaksi dilakukan di dalam labu Erlenmeyer yang berisi pelarut (air, etanol, aseton, dsb). Molekul pelarut akan menstabilkan spesi bermuatan (kation/anion) atau molekul polar melalui interaksi elektrostatik dan ikatan hidrogen, yang secara drastis menurunkan Energi Bebas Gibbs dan dapat sepenuhnya mengubah jalur mekanisme reaksi.

Karena memodelkan ratusan molekul pelarut secara eksplisit di sekeliling molekul target membutuhkan memori komputasi yang mustahil untuk dipenuhi (terlalu berat), ORCA

menggunakan pendekatan Pelarut Implisit (*Implicit Solvation Model*). Pendekatan yang paling modern dan dianjurkan adalah SMD (*Solvation Model based on Density*) atau CPCM (*Conductor-like Polarizable Continuum Model*) (Marenich et al., 2009).

Dalam model ini, rongga (*cavity*) tiga dimensi dibangun di sekitar molekul target (zat terlarut). Di luar rongga tersebut, ruang tidak dianggap sebagai ruang hampa, melainkan diisi oleh medium dielektrik kontinu yang memiliki tetapan dielektrik (ϵ) spesifik. Misalnya, jika mahasiswa menambahkan kata kunci ! CPCM(Water) pada file input ORCA, perangkat lunak akan menerapkan medan dielektrik dengan nilai $\epsilon \approx 78.3$ di sekitar molekul. Awan elektron dari molekul terlarut akan mempolarisasi pelarut kontinu tersebut, dan pelarut (sebagai gantinya) akan memberikan "medan reaksi" yang menstabilkan awan elektron molekul terlarut. Proses iteratif ini (hingga mencapai stabilisasi elektrostatik bersama) terjadi tanpa perangkat lunak harus melukis satu pun molekul H_2O secara fisik.

Keseluruhan hukum termodinamika yang melibatkan transfer panas, pembentukan energi, dan stabilisasi pelarut ini pada hakikatnya merupakan sistem sirkulasi energi yang telah ditetapkan ukurannya secara presisi oleh Tuhan semesta alam. Keteraturan kalkulasi kapasitas panas dan entalpi mengingatkan kita pada prinsip pembagian "khazanah" atau perbendaharaan energi alam semesta, sebagaimana difirmankan oleh Allah SWT:

وَأَنْ مِنْ شَيْءٍ إِلَّا عِنْدَنَا خَزَائِنُهُ وَمَا نُنزِّلُهُ إِلَّا بِقَدَرٍ مَعْلُومٍ

"Dan tidak ada sesuatu pun melainkan pada sisi Kami-lah khazanahnya; dan Kami tidak menurunkannya melainkan dengan ukuran yang tertentu." (QS. Al-Hijr [15]: 21).

Kata *khaza'inuhu* (khazanah/sumber daya) dapat ditafsirkan secara saintifik sebagai reservoir energi (entalpi dan entropi) alam semesta. Setiap molekul memiliki "kapasitas" energi spesifik (ukuran tertentu / *biqadarin ma'lum*) yang dikandung di dalam ikatan-ikatan kimianya. Ilmu kimia komputasi tidak lain adalah instrumen matematis yang dirancang oleh manusia untuk "membaca" ukuran energi yang sangat presisi tersebut.

4.4 Spektroskopi Komputasi Tingkat Lanjut

Titik temu yang paling krusial antara kimia komputasi dan penelitian laboratorium basah (*wet lab*) terletak pada spektroskopi. Tanpa data spektroskopi, sebuah struktur molekul yang dioptimasi oleh komputer hanyalah sebatas entitas hipotetis. Keunggulan absolut perangkat lunak ORCA dibandingkan program lainnya terletak pada modul prediksi spektroskopinya yang sangat komprehensif, terkalibrasi dengan baik, dan diakui secara global. Melalui perhitungan mekanika kuantum tingkat lanjut, mahasiswa dapat mensimulasikan interaksi antara awan elektron molekul dengan radiasi elektromagnetik untuk menghasilkan spektrum teoretis yang sangat akurat.

4.4.1 Prediksi Pergeseran Kimia Resonansi Magnetik Inti (NMR)

Spektroskopi Resonansi Magnetik Inti (NMR) adalah instrumen paling vital dalam elusidasi struktur molekul organik. Tantangan pedagogis utama dalam mengajarkan NMR adalah bahwa

pergeseran kimia (*chemical shift*, δ) sering kali hanya dihafal dari tabel empiris tanpa mahasiswa memahami asal-usul kuantum dari efek pelindungan (*shielding*).

ORCA memungkinkan perhitungan parameter NMR dari prinsip pertama (*first principles*). Ketika sebuah molekul ditempatkan dalam medan magnet eksternal, awan elektron di sekitar inti atom akan beredar dan menginduksi medan magnet lokal yang berlawanan arah (Hukum Lenz), sehingga "melindungi" inti tersebut. Perhitungan tensor pelindungan magnetik ini secara komputasi sangat rumit karena adanya masalah "ketergantungan titik asal gauge" (*gauge origin problem*). ORCA memecahkan masalah ini dengan mengimplementasikan metode *Gauge-Independent Atomic Orbital* (GIAO) yang merupakan standar emas dalam kalkulasi NMR (Cheeseman et al., 1996).

Dalam praktiknya, mahasiswa cukup menyisipkan kata kunci ! NMR pada *file input* yang telah dioptimasi. ORCA akan menghitung konstanta pelindungan isotropik (σ_{iso}) untuk setiap inti, seperti ^1H dan ^{13}C . Untuk mengonversinya menjadi nilai pergeseran kimia (δ) yang lazim dibaca di laboratorium, mahasiswa harus melakukan simulasi yang sama pada molekul referensi, yaitu Tetrametilsilan (TMS), pada tingkat teori dan *basis set* yang sama persis. Nilai δ kemudian dihitung secara matematis dengan rumus $\delta = \sigma_{\text{TMS}} - \sigma_{\text{sampel}}$. Melalui proses ini, mahasiswa membuktikan sendiri mengapa atom karbon pada gugus karbonil sangat tidak terlindungi (*deshielded*) dan muncul pada area frekuensi tinggi (sekitar 200 ppm) akibat penarikan densitas elektron oleh atom oksigen (Cramer, 2013).

4.4.2 Dampak Multiplisitas Spin dan Spektroskopi Resonansi Paramagnetik Elektron (EPR/ESR)

Salah satu alasan utama Frank Neese mengembangkan ORCA adalah untuk meneliti sistem molekul bercangkang terbuka (*open-shell systems*), seperti radikal bebas reaktif, enzim metaloprotein, dan senyawa kompleks logam transisi yang memiliki elektron tidak berpasangan. Sistem paramagnetik ini tidak dapat dianalisis menggunakan spektrum NMR konvensional, melainkan membutuhkan Spektroskopi Resonansi Paramagnetik Elektron (EPR) atau *Electron Spin Resonance* (ESR).

Berbeda dengan sistem cangkang tertutup (*singlet*), molekul paramagnetik mengharuskan pengguna mendefinisikan multiplisitas spin (seperti *doublet*, *triplet*, atau *quartet*) secara akurat. Komputasi spektrum EPR di dalam ORCA difokuskan pada ekstraksi dua parameter fundamental:

1. **Tensor-g (*g-tensor*):** Mengukur deviasi momen magnetik elektron di dalam molekul dibandingkan dengan elektron bebas murni, yang memberikan informasi mendalam mengenai keadaan oksidasi logam dan lingkungan ligan di sekitarnya.

2. **Konstanta Kopling Hiperhalus (*Hyperfine Coupling Constant* / *A-tensor*):** Mengukur interaksi magnetik antara momen spin elektron tunggal dengan momen spin inti atom di dekatnya.

Modul EPR/NMR dalam ORCA sangat efisien dan merupakan yang terbaik di kelasnya. Melalui simulasi komputasi ini, mahasiswa tingkat lanjut dapat mempelajari efek kopling spin-orbit (*spin-orbit coupling*) secara kuantitatif, sebuah konsep relativistik yang sangat sulit dijelaskan hanya melalui buku teks konvensional (Neese, 2001).

4.4.3 Spektroskopi UV-Vis, Eksitasi Vertikal, dan Kekuatan Osilator Kuantum

Untuk memprediksi warna molekul atau mengkaji sifat fotokimia senyawa (seperti pewarna sel surya sensitasi pewarna / DSSC), transisi elektronik antar orbital harus dihitung. Analisis ini menggunakan ekstensi dari Teori Fungsional Kerapatan yang dikenal sebagai *Time-Dependent DFT* (TD-DFT).

Dengan menambahkan blok arahan khusus (seperti `%tddft nroots 10 end`), ORCA akan menghitung energi eksitasi dari keadaan dasar (*ground state*) ke 10 keadaan tereksitasi (*excited states*) pertama. Konsep kunci yang harus dikuasai oleh mahasiswa di sini adalah **Kekuatan Osilator** (*Oscillator Strength*, dilambangkan dengan huruf f).

Secara fisik, eksitasi kuantum terjadi secara vertikal (Prinsip Franck-Condon), di mana transisi elektron terjadi begitu cepat sehingga inti atom diasumsikan tidak bergerak. Namun, tidak semua transisi dari orbital tersibuk tertinggi (HOMO) ke orbital kosong terendah (LUMO) diizinkan oleh hukum mekanika kuantum. Aturan seleksi simetri (seperti aturan seleksi Laporte) menentukan probabilitas transisi tersebut. Kekuatan osilator (f) merepresentasikan probabilitas ini; nilai f yang besar (mendekati 1.0) menunjukkan serapan (*absorbance*) cahaya yang sangat kuat dan diizinkan, sedangkan $f = 0$ menunjukkan transisi yang terlarang (*forbidden transition*) sehingga tidak akan memunculkan puncak serapan (puncak spektrum) pada alat spektrofotometer UV-Vis di dunia nyata (Runge & Gross, 1984; Lewars, 2016).

Secara epistemologis dan teologis, keseluruhan cabang spektroskopi—yang menggunakan cahaya (foton) elektromagnetik untuk menyingkap struktur materi yang gelap dan tak kasatmata—memberikan metafora saintifik yang sangat indah tentang hakikat pengetahuan. Hal ini selaras dengan firman Allah SWT:

اللَّهُ نُورُ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ ۗ مَثَلُ نُورِهِ كَمِشْكَاةٍ فِيهَا مِصْبَاحٌ

"Allah (Pemberi) cahaya (kepada) langit dan bumi. Perumpamaan cahaya Allah, adalah seperti sebuah lubang yang tak tembus, yang di dalamnya ada pelita besar..." (QS. An-Nur [24]: 35).

Cahaya (*Nur*) secara empiris adalah gelombang elektromagnetik. Spektroskopi UV-Vis dan inframerah menggunakan foton cahaya untuk membombardir awan elektron. Ketika frekuensi cahaya tersebut beresonansi (seimbang) dengan celah energi (*energy gap*) kuantum antar molekul, cahaya itu diserap dan informasi struktur molekul yang tersembunyi pun menjadi terang benderang. Ilmu komputasi adalah upaya manusia mendesain "pelita" (*misbah*) matematis di

dalam komputer untuk memahami bagaimana cahaya ilahiah berinteraksi dengan materi di tingkat mikrokosmos, mengungkap tatanan alam semesta yang maha teratur.

4.5 Transformasi ORCA dalam Modul Akademik

Hadirnya ORCA sebagai perangkat lunak riset tingkat tinggi yang dapat diakses secara gratis oleh institusi akademik memberikan peluang emas untuk merombak kurikulum kimia fisik dan kimia anorganik. Transformasi ini bukan sekadar mengganti praktikum laboratorium basah (*wet lab*) dengan duduk di depan komputer, melainkan sebuah rekayasa pedagogis untuk mengangkat pemahaman mahasiswa dari tingkat makroskopis (fenomena kasatmata) menuju tingkat submikroskopis yang berlandaskan mekanika kuantum murni.

4.5.1 Rancang Bangun Eksperimen Kuantum Maya

Untuk mengintegrasikan ORCA ke dalam kurikulum, dosen atau instruktur harus menyusun modul "Eksperimen Kuantum Maya" (*Virtual Quantum Experiment*) yang berlandaskan inkuiri terbimbing. Berbeda dengan eksperimen tradisional yang sering kali bersifat "resep masakan" (*cookbook-style*), eksperimen maya menuntut mahasiswa untuk mengonstruksi hipotesis mereka sendiri sebelum mengeksekusi *file input*.

Sebagai contoh, dalam modul spektroskopi molekuler, mahasiswa diberikan tugas untuk mengidentifikasi isomer dari senyawa $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ (dimetil eter vs. etanol). Alih-alih memberikan spektrum Inframerah (IR) jadi, mahasiswa diminta menggunakan ORCA (dengan instruksi !B3LYP def2-SVP Opt Freq) untuk memprediksi spektrum IR dari kedua isomer tersebut secara teoretis. Mahasiswa kemudian menganalisis visualisasi vektor regangan (*stretching*) ikatan O-H pada etanol yang muncul di kisaran teoretis $\sim 3700 \text{ cm}^{-1}$, yang sama sekali tidak ditemukan pada model dimetil eter. Proses membedah molekul dari awal penciptaan strukturnya hingga memunculkan spektrum serapan ini secara signifikan menekan beban kognitif mahasiswa dan meningkatkan intuisi kimia mereka tanpa harus terpapar pelarut organik di laboratorium nyata.

4.5.2 Perbandingan Galat Sistematis: Teori vs Eksperimen

Aspek krusial dalam literasi sains komputasi adalah kesadaran bahwa komputer tidak pernah memberikan kebenaran mutlak; ia hanya memecahkan model perkiraan (*approximation*). Oleh karena itu, modul akademik wajib memasukkan sesi perbandingan antara hasil komputasi ORCA dengan pangkalan data termokimia eksperimen tepercaya, seperti *NIST Chemistry WebBook*.

Mahasiswa harus dilatih untuk menghitung dan menganalisis **galat sistematis** (*systematic error*). Misalnya, saat mahasiswa memprediksi frekuensi vibrasi harmonik menggunakan metode Hartree-Fock (HF), nilai frekuensi tersebut secara konsisten akan selalu lebih tinggi sekitar 10-12% dibandingkan frekuensi fundamental eksperimen. Mahasiswa diajak untuk berpikir kritis: "Mengapa perhitungan teoritis meleset?"

Jawabannya terletak pada fakta matematis bahwa ikatan kimia di alam nyata bukanlah osilator harmonis sempurna (pegas ideal), melainkan bersifat anharmonis. Selain itu, metode HF mengabaikan korelasi elektron. Untuk mengatasi galat ini, literatur komputasi internasional

memperkenalkan konsep **Faktor Skala** (*Scaling Factor*). Mahasiswa diajarkan untuk mengalikan frekuensi mentah hasil ORCA dengan faktor skala empiris (contohnya, 0.9613 untuk B3LYP/6-31G(d)) agar hasilnya sejajar dengan data dunia nyata (Merrick, Moran, & Radom, 2007). Mengidentifikasi, mengakui, dan mengoreksi galat teoritis ini mendidik mahasiswa menjadi ilmuwan yang jujur dan presisi.

4.5.3 Pembelajaran Berbasis Masalah (PBL) dalam Kinetika Kimia

Aplikasi tertinggi dari ORCA dalam modul akademik adalah integrasinya dengan model *Problem-Based Learning* (PBL) pada mata kuliah Kinetika Kimia. Dalam skenario PBL, mahasiswa diberikan sebuah masalah nyata industri: "Mengapa sintesis amonia melalui Proses Haber-Bosch membutuhkan suhu sangat tinggi (sekitar 450 °C) dan katalis besi, padahal secara termodinamika reaksi tersebut bersifat eksotermis (melepaskan panas)?"

Mahasiswa diinstruksikan untuk menggunakan ORCA dalam memodelkan gas Nitrogen (N_2). Mereka melakukan optimasi geometri dan menghitung *Single Point Energy*, lalu mengkaji celah energi HOMO-LUMO serta kekuatan orde ikatan rangkap tiga ($N \equiv N$). Lebih jauh, mahasiswa tingkat akhir dapat diajarkan untuk mencari struktur Keadaan Transisi (*Transition State* / TS) dari pemutusan ikatan nitrogen tersebut (! OptTS). Dari perhitungan ini, mahasiswa akan menemukan sendiri bahwa Energi Aktivasi (E_a) yang dibutuhkan untuk memutus ikatan N_2 di fase gas sangatlah masif (sebuah bukit energi potensial yang sangat tinggi). Hal ini memberikan justifikasi rasional mengapa secara kinetika reaksi tersebut sangat lambat pada suhu ruang, dan mengapa katalis mutlak diperlukan untuk menyediakan jalur alternatif dengan bukit E_a yang lebih rendah.

Pendekatan pedagogis yang membandingkan kebenaran matematis dalam mesin komputasi dengan realitas empiris di alam (eksperimen) ini sejatinya membangun kerendahan hati epistemologis. Ia menyadarkan ilmuwan bahwa secanggih apa pun pendekatan *ab initio* atau *Density Functional Theory* yang diformulasikan manusia, ilmu tersebut hanyalah "perkiraan" atau tekaan yang mendekati kenyataan, sementara kebenaran absolut murni milik Sang Pencipta. Sikap ini terekam jelas dalam pengakuan para malaikat ketika dihadapkan pada keterbatasan pengetahuan mereka:

قَالُوا سُبْحَانَكَ لَا عِلْمَ لَنَا إِلَّا مَا عَلَّمْتَنَا إِنَّكَ أَنْتَ الْعَلِيمُ الْحَكِيمُ

"Mereka menjawab: 'Maha Suci Engkau, tidak ada yang kami ketahui selain dari apa yang telah Engkau ajarkan kepada kami; sesungguhnya Engkaulah Yang Maha Mengetahui lagi Maha Bijaksana'." (QS. Al-Baqarah [2]: 32).

Melatih mahasiswa untuk kritis terhadap galat (kesalahan) komputasi dan selalu memvalidasinya (tabayyun) dengan data empiris adalah bentuk dari internalisasi ayat ini. Kimia komputasi bukan diciptakan untuk menggantikan eksperimen laboratorium, melainkan bekerja berdampingan untuk saling menjelaskan bagian dari ilmu Allah yang tak terbatas.

DAFTAR PUSTAKA BAB 4

Cheeseman, J. R., Trucks, G. W., Keith, T. A., & Frisch, M. J. (1996). A comparison of models for calculating nuclear magnetic resonance shielding tensors. *The Journal of Chemical Physics*, 104(14), 5497-5509.

Cramer, C. J. (2013). *Essentials of computational chemistry: theories and models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *The Journal of Chemical Physics*, 132(15), 154104.

Jensen, F. (2017). *Introduction to computational chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Koch, W., & Holthausen, M. C. (2001). *A chemist's guide to density functional theory* (2nd ed.). Wiley-VCH.

Lewars, E. G. (2016). *Computational chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics* (3rd ed.). Springer.

Marenich, A. V., Cramer, C. J., & Truhlar, D. G. (2009). Universal solvation model based on solute electron density and on a continuum model of the solvent defined by the bulk dielectric constant and atomic surface tensions. *The Journal of Physical Chemistry B*, 113(18), 6378-6396.

Merrick, J. P., Moran, D., & Radom, L. (2007). An evaluation of harmonic vibrational frequency scale factors. *The Journal of Physical Chemistry A*, 111(45), 11683-11700.

Neese, F. (2001). Prediction of electron spin resonance g values using density functional theory. *The Journal of Chemical Physics*, 115(24), 11080-11096.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2(1), 73-78.

Nikoofard, H. (2015). Computational Thermo-chemical Study of Enthalpies of formation of Alkylthiophenes Using Ab Initio and DFT Calculations. *Acta Chimica Slovenica*, 62, 910-916.

Runge, E., & Gross, E. K. (1984). Density-functional theory for time-dependent systems. *Physical Review Letters*, 52(12), 997.

Schlegel, H. B. (1982). Optimization of equilibrium geometries and transition structures. *Journal of Computational Chemistry*, 3(2), 214-218.

BAB 5: PENGUASAAN HYPERCHEM DALAM LABORATORIUM VIRTUAL

5.1 Ekosistem Pemodelan HyperChem

Dalam evolusi perangkat lunak kimia komputasi, HyperChem menempati posisi historis dan strategis sebagai salah satu pionir yang berhasil mengintegrasikan fungsionalitas pemodelan molekuler tingkat tinggi ke dalam sistem operasi personal (seperti Windows). Berbeda dengan perangkat lunak yang hanya bertindak sebagai antarmuka grafis (GUI) murni (seperti GaussView atau Gabedit), HyperChem merupakan paket perangkat lunak mandiri yang mencakup instrumen penggambaran visual sekaligus mesin komputasinya (*computational engine*) di dalam satu ekosistem yang terpadu. Penguasaan ekosistem ini memberikan fondasi yang sangat kokoh bagi mahasiswa untuk memahami simulasi mekanika molekuler dan metode semi-empiris di dalam laboratorium virtual.

5.1.1 Integrasi Ruang Kerja dan Alat Menggambar

Salah satu keunggulan pedagogis utama dari HyperChem adalah integrasi *seamless* (tanpa jeda) antara ruang kerja visual (*workspace*) dan pengaturan komputasi. Saat mahasiswa membuka HyperChem, mereka tidak dihadapkan pada layar terminal teks yang kaku, melainkan sebuah kanvas tiga dimensi tempat molekul dapat dirakit secara intuitif.

Alat menggambar (*Drawing Tools*) di dalam HyperChem didesain menyerupai proses perakitan model molekul fisik (seperti *molymod*). Pengguna dapat memilih elemen dari sistem periodik, mengklik pada layar untuk memunculkan atom, dan menarik garis antar-atom untuk membentuk ikatan. Fitur *Add Hydrogens* (Tambahkan Hidrogen) secara cerdas menggunakan kaidah valensi standar untuk melengkapi struktur organik, sementara fitur *Model Build* secara otomatis menerapkan panjang ikatan dan sudut ikatan ideal berdasarkan basis data kristalografi standar (Young, 2001).

Bagi mahasiswa, transisi langsung dari struktur dua dimensi ke topologi tiga dimensi yang rileks ini sangat membantu dalam memvisualisasikan konsep stereokimia. Mereka dapat mengamati secara langsung efek halangan sterik (*steric hindrance*) dan mengeksplorasi konformasi ruang tanpa terhalang oleh kerumitan penulisan matriks koordinat Cartesian.

5.1.2 Kapabilitas Modul Komersial vs Akademik

Sebagai perangkat lunak komersial (*proprietary*), HyperChem menawarkan keandalan (*reliability*) algoritma dan stabilitas komputasi yang sangat konsisten, sebuah fitur yang krusial untuk mencegah rasa frustrasi (*extraneous cognitive load*) pada mahasiswa saat sesi praktikum. Dari sisi kapabilitas, HyperChem menyediakan spektrum metode komputasi yang komprehensif: mulai dari Mekanika Molekuler (MM+, AMBER, OPLS) untuk simulasi makromolekul seperti protein,

hingga metode Semi-Empiris (AM1, PM3, RM1), *Ab Initio* (Hartree-Fock), dan Teori Fungsional Kerapatan (DFT) untuk molekul berukuran kecil hingga sedang (Cramer, 2013).

Dalam konteks akademik, modul *Student Version* (Versi Mahasiswa) dari HyperChem sering kali menjadi pilihan institusi pendidikan karena keseimbangan antara biaya dan fitur. Meskipun versi akademik ini mungkin memiliki batasan pada jumlah maksimum atom yang dapat dihitung menggunakan metode *Ab Initio* dibandingkan dengan versi profesionalnya, kapabilitasnya untuk menjalankan simulasi semi-empiris (seperti perhitungan panas pembentukan atau ΔH_f menggunakan PM3) sangat memadai untuk eksperimen kurikulum tingkat sarjana (S1). Modul ini mendemokratisasi akses menuju kimia kuantum, memungkinkan teori-teori abstrak diverifikasi secara numerik dan visual dalam hitungan menit di komputer kelas (Lewars, 2016).

5.1.3 Navigasi Penjajaran dan Transformasi Molekul

Sebelum interaksi antar-molekul atau dinamika reaksi dapat disimulasikan, orientasi spasial molekul di dalam ruang tiga dimensi harus diatur dengan sangat presisi. Memodelkan interaksi pelarutan, seperti interaksi ikatan hidrogen antara molekul air (H_2O) dengan n-metilasetamida (sebuah model esensial untuk ikatan peptida), membutuhkan manipulasi posisi yang spesifik.

HyperChem menyediakan instrumen transformasi molekul yang sangat presisi melalui fungsi Translasi (pergeseran koordinat X, Y, Z), Rotasi (perputaran pada sumbu kelembaman/ *inertial axes*), dan Skala (*Zooming*). Mahasiswa diajarkan untuk memilih gugus spesifik atau molekul tunggal (menggunakan alat *Selection Tool* berbentuk lingkaran hijau khas HyperChem), lalu menggeser molekul pelarut (air) mendekati situs pengikatan (gugus karbonil pada n-metilasetamida) hingga mencapai jarak ikatan hidrogen teoretis (sekitar 2.0 - 2.5 Angstrom). Alat *Align Molecules* (Menyejajarkan Molekul) juga memungkinkan mahasiswa menyejajarkan sumbu dipol dua molekul secara otomatis sebelum simulasi interaksi dimulai.

Presisi dalam navigasi ruang spasial dan penentuan jarak interaksi ini mencerminkan sebuah keteraturan ontologis di alam semesta, di mana setiap reaksi biokimia dalam sel hidup manusia bergantung pada kesesuaian ruang dan jarak antar-molekul yang teramat detail. Hal ini selaras dengan firman Allah SWT yang menyatakan bahwa setiap kejadian di alam semesta telah ditetapkan dengan kadar dan ketelitian yang sempurna:

وَحَلَقَ كُلَّ شَيْءٍ فَقَدَرَهُ تَقْدِيرًا

“...dan Dia telah menciptakan segala sesuatu, dan Dia menetapkan ukuran-ukurannya dengan serapi-rapinya.” (QS. Al-Furqan [25]: 2).

Ketetapan jarak interaksi Van der Waals dan optimalisasi posisi spasial yang diatur melalui antarmuka navigasi HyperChem sejatinya adalah instrumen manusiawi untuk menyimulasikan dan mentadabburi *taqdir* (ukuran spasial dan energi) molekuler yang sangat rapi dan spesifik tersebut.

5.2 Mekanika Molekul dan Metode Semi-Empiris

Dalam arsitektur komputasi, penyelesaian Persamaan Schrödinger secara analitik murni (*ab initio*) menuntut biaya komputasi yang sangat masif, baik dari segi waktu maupun memori (RAM). Untuk menjembatani kesenjangan antara akurasi kuantum dan kapasitas perangkat keras komputer laboratorium kelas, perangkat lunak HyperChem menyediakan modul perhitungan Mekanika Molekul (MM) dan Semi-Empiris secara komprehensif. Penguasaan kedua metode ini merupakan kompetensi dasar yang wajib dimiliki mahasiswa sebelum mereka memodelkan sistem biokimia yang kompleks seperti enzim atau rantai DNA.

5.2.1 Evaluasi Kinerja Metode AM1 dan PM3

Metode semi-empiris berakar pada mekanika kuantum, namun secara sengaja mengabaikan atau menyederhanakan perhitungan matriks integral yang rumit (seperti interaksi elektron inti dan elektron valensi tertentu) dengan menggantinya menggunakan parameter empiris yang diturunkan dari data eksperimen laboratorium. Di dalam ekosistem HyperChem, dua metode semi-empiris yang paling dominan dan sering digunakan dalam riset kimia organik adalah AM1 (*Austin Model 1*) dan PM3 (*Parameterization Method 3*).

AM1, yang dikembangkan oleh kelompok riset Michael Dewar, dirancang secara khusus untuk memperbaiki kelemahan metode generasi sebelumnya (MNDO) dalam menghitung ikatan hidrogen dan energi tolakan antar-atom pada jarak dekat (Dewar et al., 1985). Dalam praktiknya di laboratorium virtual, mahasiswa sering menggunakan AM1 untuk memprediksi konformasi molekul organik dasar dan menghitung entalpi aktivasi dari sebuah reaksi organik standar.

Di sisi lain, PM3 yang diformulasikan oleh J.J.P. Stewart, menggunakan pendekatan optimasi parameter turunan pertama dan kedua secara serentak terhadap ratusan molekul referensi (Stewart, 1989). Secara empiris, PM3 di dalam HyperChem terbukti jauh lebih akurat dibandingkan AM1 dalam menghitung entalpi pembentukan (ΔH_f°) standar fase gas, reaktivitas senyawa nitro, dan geometri senyawa yang mengandung ikatan hidrogen yang kuat. Oleh karena itu, bagi mahasiswa yang merancang penelitian desain obat (*drug design*) sederhana, PM3 sering kali dijadikan metode pilihan (*method of choice*) sebelum proses penambatan molekul (*molecular docking*) dilakukan.

5.2.2 Keterbatasan Pendekatan Semi-Empiris

Aspek pedagogis yang paling penting dalam mengajarkan metode semi-empiris adalah mendidik mahasiswa tentang **keterbatasan** atau batasan validitasnya. Karena metode seperti AM1 dan PM3 sangat bergantung pada parameter yang dicocokkan (*fitted*) dengan kelompok molekul tertentu (biasanya senyawa organik yang mengandung unsur C, H, N, O, P, S, dan Halogen), metode ini akan gagal total jika digunakan untuk menghitung molekul yang berada di luar set parameternya.

Sebagai contoh, jika seorang mahasiswa menggunakan PM3 standar di HyperChem untuk memodelkan senyawa kompleks logam transisi (seperti Ferrosen atau kompleks Platina), perangkat lunak mungkin akan tetap memproses dan mengeluarkan hasil tanpa peringatan (*error*). Namun, geometri koordinasi (seperti sudut ikatan logam-ligan) dan energi yang dihasilkan

kemungkinan besar salah dan tidak memiliki makna fisik. Untuk menangani logam transisi, mahasiswa harus diajarkan untuk beralih ke varian metode yang dikalibrasi khusus, seperti PM3(tm) (Cramer, 2013).

Pemahaman terhadap limitasi komputasi ini sangat penting untuk mencegah dogma saintifik (kepercayaan buta terhadap hasil mesin). Ilmuwan yang rasional harus selalu memvalidasi hasil perangkat lunak dengan literatur primer.

5.2.3 Skala Pemodelan Biomolekul Organik Besar

Ketika target riset mahasiswa meluas menjadi sistem yang mengandung ribuan atom, seperti struktur lipatan protein (*protein folding*), untai ganda DNA, atau simulasi kotak pelarut (ribuan molekul air), metode semi-empiris pun akan kewalahan dan gagal beroperasi akibat keterbatasan matriks alokasi memori. Pada titik inilah HyperChem menunjukkan keandalannya dengan menyediakan fasilitas Mekanika Molekul (seperti *Force Field* AMBER, OPLS, dan MM+).

Berbeda dengan mekanika kuantum, Mekanika Molekul (MM) sepenuhnya mengabaikan eksistensi elektron. Molekul dipandang murni menggunakan hukum fisika klasik (Hukum Newton): atom diasumsikan sebagai bola dengan massa parsial, dan ikatan kimia diasumsikan sebagai pegas (Hukum Hooke). Meskipun mahasiswa tidak dapat menggunakan MM untuk mensimulasikan pemutusan ikatan kimia atau perpindahan elektron (reaksi kimia murni), metode ini memfasilitasi Optimasi Geometri untuk biomolekul raksasa dalam waktu kurang dari satu menit di komputer standar (Leach, 2001). Modul MM+ di HyperChem sangat berguna untuk "membersihkan" geometri awal dari asam amino yang dibangun secara manual sebelum molekul tersebut dikirim untuk simulasi Dinamika Molekul (MD).

Secara filosofis, hierarki metode komputasi ini—mulai dari *ab initio* yang sangat teliti namun terbatas ruang lingkupnya, hingga Mekanika Molekul yang luas namun penuh dengan asumsi penyederhanaan—mengajarkan sebuah nilai kerendahan hati epistemologis. Ia menyadarkan ilmuwan bahwa kemampuan manusia dalam merengkuh totalitas realitas alam semesta sangatlah parsial. Hal ini merefleksikan kebenaran firman Allah SWT tentang luasnya ilmu-Nya dibandingkan dengan ilmu manusia yang sangat terbatas:

وَلَوْ أَنَّ فِي الْأَرْضِ مِنْ شَجَرَةٍ أَقْلَامٌ وَالْبَحْرُ يَمُدُّهُ مِنْ بَعْدِهِ سَبْعَةُ أَبْحُرٍ مَا نَفِدَتْ كَلِمَاتُ اللَّهِ إِنَّ اللَّهَ عَزِيزٌ حَكِيمٌ

"Dan seandainya pohon-pohon di bumi menjadi pena dan laut (menjadi tinta), ditambahkan kepadanya tujuh laut (lagi) sesudah (kering)nya, niscaya tidak akan habis-habisnya (dituliskan) kalimat Allah. Sesungguhnya Allah Maha Perkasa lagi Maha Bijaksana." (QS. Luqman [31]: 27).

Semua instrumen perangkat lunak seperti HyperChem, semua algoritma AM1, PM3, dan medan gaya (*force field*) AMBER, pada hakikatnya hanyalah tetesan kecil "tinta" dari samudra ilmu Allah yang tak terhingga. Menyadari hal ini, mahasiswa kimia komputasi dituntut untuk terus mengeksplorasi tanpa kesombongan intelektual, selalu memahami bahwa mesin komputasi terbaik pun hanya menyajikan pendekatan kompromistis terhadap kesempurnaan ciptaan-Nya yang mutlak.

5.3 Dinamika Molekuler (*Molecular Dynamics*)

Metode mekanika kuantum dan optimasi geometri konvensional pada dasarnya mengkaji molekul dalam keadaan statis pada suhu nol mutlak (0 Kelvin), di mana semua partikel diasumsikan diam di dasar lembah Permukaan Energi Potensial (PES). Namun, di dunia nyata, sistem kimia berada pada suhu kamar atau suhu reaksi tertentu yang dipenuhi dengan energi termal. Perangkat lunak HyperChem memfasilitasi transisi dari pemodelan statis ke pemodelan waktu-nyata melalui modul Dinamika Molekuler (*Molecular Dynamics* / MD). Modul ini menggunakan hukum fisika klasik Newton untuk mensimulasikan pergerakan setiap atom dari waktu ke waktu, memberikan wawasan mendalam tentang fluktuasi struktural, perubahan wujud zat, dan interaksi makromolekul yang mustahil dipahami hanya melalui satu struktur diam.

5.3.1 Kontrol Suhu dan Energi Kinetik Termodinamika

Dalam simulasi Dinamika Molekuler, konsep suhu makroskopis dihubungkan secara langsung dengan energi kinetik mikroskopis atom-atom penyusunnya melalui Teorema Ekuipartisi Energi. Secara matematis, suhu sistem (T) berbanding lurus dengan rata-rata energi kinetik (E_{k}) seluruh partikel dalam sistem tersebut.

Salah satu parameter paling kritis yang harus diatur oleh mahasiswa di dalam antarmuka pengaturan *Molecular Dynamics* HyperChem adalah *Bath Temperature* (Suhu Penangas) atau termostat. Mahasiswa tidak bisa sekadar menyalakan simulasi; mereka harus mengontrol bagaimana energi termal disuntikkan atau ditarik dari molekul. HyperChem menggunakan algoritma kontrol suhu (seperti algoritma *Berendsen thermostat*), di mana kecepatan setiap atom diskalakan secara berkala untuk memaksa suhu sistem mendekati suhu target yang diinginkan (Allen & Tildesley, 2017).

Dari sudut pandang pedagogis, mahasiswa dapat merancang eksperimen maya: misalnya, membangun kristal es (kumpulan molekul air dengan ikatan hidrogen yang sangat teratur), lalu menyalakan simulasi MD dengan pemanasan bertahap dari 100 K hingga 400 K. Di layar komputer, mahasiswa akan mengamati secara langsung fase transisi peleburan. Pada titik leleh (sekitar 273 K), ikatan hidrogen antar-molekul mulai putus dan molekul air bergerak secara translasi acak (menjadi fase cair), dan akhirnya terlepas sepenuhnya pada fase gas. Simulasi termodinamika visual ini membongkar hambatan kognitif mahasiswa dalam mengimajinasikan perpindahan kalor dan entropi (Leach, 2001).

5.3.2 Evolusi Waktu dan Analisis Trajektori

Inti dari Dinamika Molekuler adalah integrasi persamaan gerak Newton ($F = m \cdot a$) untuk setiap atom melintasi waktu. Perangkat lunak akan menghitung gaya yang bekerja pada suatu atom (berdasarkan gradien energi potensial dari *force field*), lalu memprediksi posisi dan kecepatan atom tersebut pada langkah waktu (*time step*) berikutnya.

Konsep yang wajib dipahami oleh mahasiswa adalah pemilihan besaran **Langkah Waktu** (*Time Step*). Di dalam HyperChem, *time step* standar sering kali diatur pada angka 1 femtosekon (1×10^{-15} detik). Mengapa harus sekecil itu? Di dalam molekul organik, pergerakan atom

yang paling cepat adalah vibrasi rentangan ikatan yang melibatkan atom hidrogen (seperti ikatan C-H atau O-H), yang memiliki periode vibrasi sekitar 10 femtosekon. Jika *time step* diatur terlalu besar (misalnya 20 femtosekon), algoritma (biasanya menggunakan integrasi *Verlet* atau *Leap-frog*) akan "melompati" fase vibrasi ini, menyebabkan gaya tolak-menolak menjadi tak terhingga dan membuat simulasi molekul meledak atau *crash* secara komputasional (Cramer, 2013).

Hasil dari integrasi ratusan ribu *time step* ini disimpan dalam sebuah file Trajektori (.hin atau .trc dalam ekosistem HyperChem). Mahasiswa dapat memutar ulang (seperti menonton film) pergerakan molekul tersebut. Melalui analisis trajektori, ilmuwan dapat memantau kapan sebuah ligan obat berikatan dengan reseptor, berapa lama ikatan tersebut bertahan (waktu tinggal), dan mengukur fluktuasi *Root Mean Square Deviation* (RMSD) untuk menentukan stabilitas sistem biokimia.

5.3.3 Algoritma *Simulated Annealing* (Pemanasan dan Pendinginan Bertahap)

Salah satu kelemahan terbesar dari metode Optimasi Geometri konvensional (seperti *Steepest Descent*) adalah kecenderungannya untuk terjebak di *Local Minimum* (lembah energi dangkal pada Permukaan Energi Potensial), terutama untuk molekul fleksibel seperti rantai peptida atau polimer yang memiliki ribuan konformasi yang mungkin.

Untuk menemukan konformasi yang paling stabil di alam (*Global Minimum*), HyperChem menyediakan instrumen pencarian konformasional tingkat lanjut yang disebut *Simulated Annealing*. Algoritma ini terinspirasi dari teknik metalurgi pembuatan pedang baja, di mana logam dipanaskan pada suhu yang ekstrem agar atom-atomnya memiliki cukup energi kinetik untuk mengatur ulang diri, lalu didinginkan secara sangat perlahan agar mencapai struktur kristal yang sempurna dan bebas cacat (Kirkpatrick, Gelatt, & Vecchi, 1983).

Di dalam praktikum HyperChem, mahasiswa memasukkan parameter pemanasan (misalnya dipanaskan hingga 1000 K). Pada suhu ekstrem ini, molekul polimer akan bergerak liar dan melewati berbagai bukit rintangan energi (rotasi ikatan secara bebas). Setelah waktu tertentu, mahasiswa menetapkan waktu pendinginan (*cooling time*) menuju 0 K. Saat molekul mendingin secara lambat, energi kinetiknya berkurang dan ia akan "jatuh" ke lembah energi yang terdalam (konformasi paling stabil secara termodinamika).

Secara filosofis, konsep gerak abadi atom pada tingkat submikroskopis—vibrasi, rotasi, dan translasi yang tiada henti ini—memberikan landasan rasional terhadap pandangan kosmologi Islam bahwa seluruh benda di alam semesta senantiasa bertasbih dan bergerak sesuai garis edarnya (orbitnya), betapapun terlihat diam secara kasatmata. Allah SWT berfirman:

تُسَبِّحُ لَهُ السَّمَاوَاتُ السَّبْعُ وَالْأَرْضُ وَمَنْ فِيهِنَّ وَإِنْ مِنْ شَيْءٍ إِلَّا يُسَبِّحُ بِحَمْدِهِ وَلَكِنْ لَا تَفْقَهُونَ تَسْبِيحَهُمْ إِنَّهُ كَانَ حَلِيمًا غَفُورًا

“Langit yang tujuh, bumi dan semua yang ada di dalamnya bertasbih kepada Allah. Dan tak ada satupun melainkan bertasbih dengan memuji-Nya, tetapi kamu sekalian tidak mengerti tasbih mereka. Sesungguhnya Dia adalah Maha Penyantun lagi Maha Pengampun.” (QS. Al-Isra' [17]: 44).

Melalui kacamata *Molecular Dynamics*, ilmuwan diberikan sedikit karunia untuk "melihat dan mengerti" (*tafqahun*) pergerakan tasbih molekuler tersebut. Molekul yang dipanaskan hingga suhu ekstrem maupun yang didinginkan menuju kestabilan (*annealing*), semuanya tunduk secara presisi pada hukum-hukum termodinamika dan gerak kinematika dasar yang ditetapkan Tuhan, menjaga keseimbangan struktur realitas alam semesta.

5.4 Analisis Interaksi Antarmolekul

Dalam kajian kimia fisik dan biokimia, memahami molekul secara terisolasi (fase gas) belumlah cukup untuk menjelaskan fenomena alam yang sesungguhnya. Sebagian besar reaksi biologis dan proses industri terjadi di dalam fase cair (larutan), di mana molekul target terus-menerus berbenturan, tarik-menarik, dan bertukar energi dengan molekul pelarut di sekitarnya. Perangkat lunak HyperChem menyediakan seperangkat alat komputasi yang sangat mumpuni untuk menganalisis interaksi antarmolekul secara non-kovalen, seperti gaya Van der Waals, interaksi dipol-dipol, dan ikatan hidrogen.

5.4.1 Dinamika Pembentukan Ikatan Hidrogen

Ikatan hidrogen merupakan interaksi non-kovalen yang paling krusial dalam menopang kehidupan; interaksi inilah yang mempertahankan struktur heliks ganda DNA dan menentukan pelipatan tiga dimensi dari protein. Secara komputasional, mendeteksi dan memvisualisasikan ikatan hidrogen membutuhkan penentuan parameter spasial yang presisi.

Di dalam antarmuka HyperChem, mahasiswa dapat mengaktifkan fitur Show Hydrogen Bonds (Tampilkan Ikatan Hidrogen). Algoritma HyperChem tidak sembarangan menarik garis putus-putus di antara atom. Perangkat lunak ini secara ketat akan mengevaluasi setiap pasangan atom donor (seperti Oksigen atau Nitrogen yang mengikat Hidrogen) dan atom akseptor di dekatnya. Garis ikatan hidrogen hanya akan divisualisasikan jika dua syarat geometris utama terpenuhi: pertama, jarak antara atom hidrogen dan atom akseptor harus berada di bawah ambang batas tertentu (biasanya maksimal 3,2 Angstrom); dan kedua, sudut ikatan yang terbentuk antara Donor-Hidrogen-Akseptor harus cukup linier (biasanya lebih besar dari 120 derajat) (Jeffrey, 1997).

Melalui visualisasi seketika (*real-time*) ini, mahasiswa dapat memutar konformasi sepasang molekul yang sedang berinteraksi dan mengamati bagaimana ikatan hidrogen dapat terbentuk dan terputus secara dinamis akibat perubahan sudut sterik. Pengalaman interaktif ini secara signifikan menguatkan pemahaman konsep bahwa interaksi antarmolekul sangat bergantung pada orientasi ruang (*spatial orientation*).

5.4.2 Studi Kasus Solvasi: Air dan n-Metilasetamida

Untuk menjembatani teori dengan praktik, modul praktikum HyperChem sering kali menggunakan sistem n-Metilasetamida (NMA) dan molekul air sebagai model simulasi. NMA dipilih karena molekul ini merupakan representasi paling sederhana dari struktur ikatan peptida (ikatan amida) yang menyusun seluruh protein makhluk hidup.

Dalam laboratorium virtual ini, mahasiswa diinstruksikan untuk menggambar molekul NMA dan satu molekul air (H_2O), lalu memposisikan atom hidrogen dari air agar mengarah pada atom oksigen karbonil dari NMA. Mahasiswa kemudian melakukan optimasi geometri pada "kompleks supermolekul" tersebut menggunakan metode semi-empiris (seperti PM3) atau *ab initio*.

Sasaran pedagogis dari eksperimen ini adalah menghitung **Energi Interaksi** atau **Energi Pengikatan** (ΔE). Mahasiswa ditugaskan untuk mencatat Energi Total dari kompleks (NMA- H_2O) yang telah teroptimasi. Selanjutnya, mereka menghitung Energi Total dari molekul NMA tunggal dan Energi Total molekul air tunggal secara terpisah. Energi interaksi ikatan hidrogen kemudian dihitung menggunakan persamaan sederhana:

$$\text{Energi Interaksi} = \text{Energi Kompleks} - (\text{Energi NMA tunggal} + \text{Energi Air tunggal}).$$

Apabila hasil komputasi menunjukkan angka negatif (misalnya sekitar -5 hingga -7 kkal/mol), hal ini membuktikan secara kuantitatif bahwa molekul tersebut saling tarik-menarik dan membentuk sistem termodinamika yang lebih stabil dan berada pada tingkat energi yang lebih rendah ketika mereka bersatu, dibandingkan ketika mereka terpisah sendiri-sendiri (Cramer, 2013).

5.4.3 Konfigurasi Syarat Batas Periodik (Periodic Boundary Conditions / PBC)

Menganalisis satu molekul air yang berinteraksi dengan satu molekul terlarut belumlah merepresentasikan keadaan larutan sesungguhnya (kondisi *bulk*). Namun, jika kita memasukkan 1000 molekul air ke dalam layar kerja HyperChem secara bebas, molekul-molekul tersebut akan menguap dan terbang menjauh ke ruang hampa di sekitarnya karena ketiadaan tekanan atmosfer (efek tepi/ *edge effect*).

Untuk mengatasi batasan ruang fisik di dalam komputer, ilmuwan komputasi mengembangkan konsep matematis yang disebut Syarat Batas Periodik (*Periodic Boundary Conditions / PBC*). Di dalam menu pengaturan HyperChem (biasanya melalui fitur Periodic Box), mahasiswa dapat memasukkan molekul terlarut ke dalam sebuah kubus imajiner, lalu memerintahkan program untuk mengisi sisa ruang kubus tersebut dengan molekul air pada kerapatan tertentu (misalnya 1 gram/mL).

Kecerdasan dari algoritma PBC adalah: kubus sentral ini dikelilingi oleh bayangan salinan (*clones*) dari dirinya sendiri di segala arah (sumbu X, Y, Z) hingga tak terhingga. Jika sebuah molekul air bergerak keluar dari sisi kanan kotak selama simulasi Dinamika Molekuler, salinan persis dari molekul tersebut akan secara otomatis masuk dari sisi kiri kotak dengan kecepatan yang sama (Allen & Tildesley, 2017). Mekanisme ini memastikan bahwa jumlah partikel dan kerapatan di dalam sistem akan selalu konstan, memungkinkan mahasiswa kimia untuk mensimulasikan sifat pelarut makroskopis (seperti konstanta dielektrik larutan) dengan akurasi yang luar biasa tinggi tanpa harus menghitung miliaran molekul yang sesungguhnya.

Fenomena "pengenalan molekuler" (*molecular recognition*)—di mana molekul pelarut mengenali dan menempatkan posisinya secara akurat di sekeliling molekul terlarut melalui ikatan hidrogen dan komplementaritas bentuk—merupakan sebuah perumpamaan mikroskopis yang indah tentang

konsep interaksi dan pengenalan antarentitas yang telah digariskan oleh Sang Pencipta. Hal ini merefleksikan makna mendalam dari firman Allah SWT:

يَا أَيُّهَا النَّاسُ إِنَّا خَلَقْنَاكُمْ مِنْ ذَكَرٍ وَأُنْثَىٰ وَجَعَلْنَاكُمْ شُعُوبًا وَقَبَائِلَ لِتَعَارَفُوا ۗ إِنَّ أَكْرَمَكُمْ عِنْدَ اللَّهِ أَتَقَاكُمْ ۗ إِنَّ اللَّهَ عَلِيمٌ خَبِيرٌ

"Hai manusia, sesungguhnya Kami menciptakan kamu dari seorang laki-laki dan seorang perempuan dan menjadikan kamu berbangsa-bangsa dan bersuku-suku supaya kamu saling kenal-mengenal. Sesungguhnya orang yang paling mulia di antara kamu di sisi Allah ialah orang yang paling takwa di antara kamu. Sesungguhnya Allah Maha Mengetahui lagi Maha Mengenal." (QS. Al-Hujurat [49]: 13).

Kata *lita'arafu* (agar kalian saling mengenal) tidak hanya berlaku bagi peradaban dan interaksi sosial manusia yang makroskopis. Di tingkat submikroskopis, tatanan alam semesta juga dibangun atas dasar "saling mengenal" secara kimiawi. Sebuah enzim hanya akan bekerja jika ia "mengenal" substratnya (melalui orientasi spasial dan interaksi ikatan hidrogen yang telah dioptimasi). Melalui instrumen komputasi seperti HyperChem, ilmuwan tidak sekadar menghitung angka-angka energi, melainkan sedang menelaah mekanisme *ta'aruf* (pengenalan) antarmolekul yang diatur dengan penuh hikmah oleh Yang Maha Mengetahui (Al-'Alim).

5.5 Penyelidikan Keadaan Elektronik Tereksitasi

Catatan Penulis: Istilah "Keadaan Teruja" yang berasal dari serapan bahasa Melayu telah disesuaikan menjadi "Keadaan Tereksitasi" (Excited States) sesuai dengan pedoman ejaan dan istilah sains dalam Bahasa Indonesia yang baku.

Sebagian besar fenomena kimia yang dipelajari di tingkat sarjana berlangsung pada keadaan dasar (*ground state*), di mana molekul berada pada tingkat energi terendah yang paling stabil. Namun, ketika sebuah molekul berinteraksi dengan foton cahaya (radiasi elektromagnetik), elektronnya dapat menyerap energi dan melompat ke orbital yang lebih tinggi. Ranah fotokimia ini sangat krusial dalam mendesain material sel surya, layar OLED, hingga memahami mekanisme fotosintesis. Perangkat lunak HyperChem menyediakan modul komputasi kuantum tingkat lanjut untuk menyelidiki sifat termodinamika molekul yang sedang berada dalam keadaan tereksitasi ini.

5.5.1 Mekanisme Interaksi Konfigurasi (*Configuration Interaction*)

Metode mekanika kuantum standar, seperti Hartree-Fock (HF), dirancang untuk mencari energi minimum dari keadaan dasar. Metode ini mengasumsikan bahwa seluruh elektron menempati orbital-orbital terendah secara berurutan. Ketika elektron tereksitasi ke orbital kosong (LUMO), pendekatan fungsi gelombang determinan tunggal (seperti dalam HF) gagal mendeskripsikan sistem tersebut secara akurat.

Untuk mengatasi hal ini, HyperChem menggunakan metode *Configuration Interaction* (CI) atau Interaksi Konfigurasi. Secara konseptual, metode CI bekerja dengan cara mencampurkan (kombinasi linear) fungsi gelombang keadaan dasar dengan berbagai konfigurasi fungsi gelombang keadaan tereksitasi (di mana satu atau lebih elektron telah dipindahkan secara matematis dari orbital yang terisi ke orbital kosong). Dalam praktikum menggunakan HyperChem,

mahasiswa sering kali diarahkan untuk menggunakan metode *Single-Excitation Configuration Interaction* (CIS), di mana hanya transisi elektron tunggal yang diperhitungkan (Cramer, 2013).

Melalui menu pengaturan komputasi semi-empiris atau *ab initio* di HyperChem, mahasiswa dapat mengaktifkan modul CI dan menentukan seberapa banyak orbital batas (*frontier orbitals*) yang akan dilibatkan dalam matriks perhitungan eksitasi (misalnya, melibatkan 3 HOMO tertinggi dan 3 LUMO terendah). Interaksi antar-konfigurasi inilah yang menghasilkan kumpulan keadaan energi tereksitasi (seperti S_1 , S_2 , T_1) beserta fungsi gelombangnya yang akurat.

5.5.2 Perbedaan Energi Eksitasi Vertikal dan Adiabatik

Salah satu konsep fotokimia yang paling sering disalahpahami oleh mahasiswa adalah perbedaan antara eksitasi vertikal dan adiabatik. Melalui eksperimen laboratorium virtual dengan HyperChem, kerancuan konseptual ini dapat dipecahkan secara kuantitatif.

1. **Energi Eksitasi Vertikal:** Berdasarkan Prinsip Franck-Condon, perpindahan elektron akibat serapan foton terjadi jauh lebih cepat (dalam rentang femtodetik) dibandingkan dengan pergerakan inti atom yang masif. Oleh karena itu, ketika mahasiswa menghitung eksitasi elektron dari geometri keadaan dasar (tanpa mengubah panjang ikatan atau sudutnya), hasil yang didapat adalah Eksitasi Vertikal. Energi inilah yang berkorelasi langsung dengan panjang gelombang penyerapan maksimum (λ_{\max}) pada spektrofotometer UV-Vis (Lewars, 2016).
2. **Energi Eksitasi Adiabatik:** Setelah elektron berada di orbital yang lebih tinggi (keadaan tereksitasi), distribusi awan elektron berubah drastis. Perubahan ini menyebabkan inti atom merasakan tarikan/tolakan baru, sehingga molekul akan mengalami penataan ulang geometri (*geometry relaxation*) untuk mencari kestabilan baru di keadaan tereksitasi. Di HyperChem, mahasiswa dapat menginstruksikan program untuk melakukan Optimasi Geometri pada keadaan S_1 (Singlet pertama tereksitasi). Selisih energi antara energi geometri keadaan dasar dengan energi minimum dari keadaan tereksitasi inilah yang disebut Energi Eksitasi Adiabatik.

Energi adiabatik selalu lebih rendah daripada energi vertikal. Selisih energi yang dilepaskan selama relaksasi geometri ini dapat memancarkan cahaya kembali dalam bentuk **fluoresensi**. Simulasi ini mendidik mahasiswa untuk tidak sekadar membayangkan molekul sebagai entitas yang diam saat berinteraksi dengan cahaya.

5.5.3 Aplikasi Praktis dalam Sains Fotokimia

Penguasaan modul keadaan tereksitasi dalam HyperChem membekali mahasiswa dengan kemampuan untuk mendesain eksperimen fotokimia *in silico*. Salah satu praktikum tingkat lanjut yang dapat dilakukan adalah memprediksi pergeseran batokromik (*bathochromic shift*) atau pergeseran panjang gelombang ke arah spektrum merah muda pada senyawa pewarna (seperti *cyanine dyes*). Mahasiswa dapat memodelkan peningkatan jumlah ikatan rangkap terkonjugasi pada poliena, dan membuktikan melalui perhitungan CI bahwa semakin panjang konjugasinya, celah energi HOMO-LUMO semakin sempit, dan panjang gelombang eksitasi vertikalnya semakin besar (mendekati area cahaya tampak).

Dari perspektif ontologis dan religius, perpindahan energi elektron dari keadaan dasar yang stabil (namun pasif) menuju keadaan tereksitasi (yang aktif dan mampu memancarkan pendaran cahaya) memberikan refleksi filosofis yang mendalam tentang hakikat pencerahan. Transformasi entitas material oleh "cahaya" energi ini sangat selaras dengan konsep bagaimana petunjuk (nur) dari Sang Pencipta mengangkat derajat manusia dari kegelapan (kepasifan) menuju cahaya (aktivitas yang mencerahkan). Allah SWT berfirman:

اللَّهُ وَلِيُّ الَّذِينَ آمَنُوا يُخْرِجُهُم مِّنَ الظُّلُمَاتِ إِلَى النُّورِ

“Allah Pelindung orang-orang yang beriman; Dia mengeluarkan mereka dari kegelapan (kekafiran) kepada cahaya (iman)...” (QS. Al-Baqarah [2]: 257).

Secara metaforis dalam ilmu kimia, "kegelapan" dapat dianalogikan sebagai keadaan dasar materi di dasar lembah PES, sedangkan "cahaya" adalah interaksi foton yang mengeksitasi elektron, memungkinkannya bereaksi, berpendar, dan menghadirkan warna-warni kehidupan (seperti pada proses fotosintesis klorofil). Melalui perangkat lunak seperti HyperChem, ilmuwan diberikan anugerah rasio untuk mengkuantifikasi fenomena turunnya "cahaya" energi tersebut ke dalam bahasa matematika dan matriks komputasi, mengurai rahasia sunnatullah di ranah fotokimia yang luar biasa detail.

DAFTAR PUSTAKA BAB 5

Allen, M. P., & Tildesley, D. J. (2017). *Computer simulation of liquids* (2nd ed.). Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2013). *Essentials of computational chemistry: theories and models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Dewar, M. J., Zoebisch, E. G., Healy, E. F., & Stewart, J. J. (1985). Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model. *Journal of the American Chemical Society*, 107(13), 3902-3909.

Jeffrey, G. A. (1997). *An introduction to hydrogen bonding*. Oxford University Press.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., & Vecchi, M. P. (1983). Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598), 671-680.

Leach, A. R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications* (2nd ed.). Pearson Education.

Lewars, E. G. (2016). *Computational chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics* (3rd ed.). Springer.

Stewart, J. J. (1989). Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method. *Journal of Computational Chemistry*, 10(2), 209-220.

Young, D. C. (2001). *Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems*. John Wiley & Sons.

BAB 6: GAUSSIAN DAN GAUSSVIEW UNTUK ANALISIS KOMPREHENSIF

6.1 Struktur Interaksi Gaussian-GaussView

Dalam konstelasi perangkat lunak kimia komputasi, Gaussian menempati posisi historis yang sangat prestisius. Sejak pertama kali dirilis oleh John Pople (pemenang Hadiah Nobel Kimia 1998) pada tahun 1970, Gaussian telah berevolusi menjadi standar industri dan rujukan utama dalam publikasi ilmiah di bidang kimia teoretis. Namun, karena Gaussian pada intinya adalah mesin komputasi (*computational engine*) murni yang beroperasi berbasis teks, perangkat lunak ini didampingi oleh GaussView, sebuah Antarmuka Pengguna Grafis (GUI) yang dirancang secara eksklusif untuk menerjemahkan kompleksitas algoritma Gaussian menjadi visualisasi tiga dimensi yang interaktif. Penguasaan sinergi antara kedua perangkat lunak ini merupakan kompetensi esensial bagi peneliti kimia modern.

6.1.1 Model Eksekusi *Client-Server*

Berbeda dengan HyperChem yang menggabungkan antarmuka visual dan mesin komputasi dalam satu paket mandiri, ekosistem Gaussian-GaussView sering kali dioperasikan berdasarkan arsitektur *Client-Server* (Klien-Pelayan).

Dalam arsitektur ini, GaussView bertindak sebagai *Client* (klien). Di laboratorium maya, mahasiswa menggunakan komputer pribadi (*Personal Computer/Laptop*) mereka yang telah terinstal GaussView untuk menggambar molekul, mengatur orientasi spasial, dan menyusun parameter perhitungan tanpa membebani prosesor (CPU) komputer lokal. Setelah file input siap, GaussView tidak melakukan perhitungan mekanika kuantum secara mandiri. Perangkat lunak ini akan mengirimkan perintah eksekusi kepada Gaussian yang bertindak sebagai *Server* (pelayan/mesin belakang layar).

Gaussian dapat diinstal di komputer yang sama (eksekusi lokal) atau di superkomputer jarak jauh (*High-Performance Computing / HPC cluster*) yang memiliki kapasitas memori dan jumlah prosesor yang masif (Foresman & Frisch, 2015). Setelah Gaussian selesai menyelesaikan integrasi matriks fungsi gelombang, ia menghasilkan file keluaran (*output*) dan file titik pemeriksaan (*checkpoint/chk*) yang kemudian dikirim kembali untuk dibaca dan divisualisasikan oleh

GaussView. Pemisahan kerja ini secara pedagogis mengajarkan mahasiswa tentang efisiensi manajemen sumber daya komputasi berskala besar.

6.1.2 Anatomi Perintah File Input (.gjf / .com)

Sebelum mengandalkan GaussView untuk membuat parameter secara otomatis, mahasiswa yang literat secara komputasi wajib memahami struktur dasar file input Gaussian. Berbeda dengan file input ORCA yang berformat bebas (*free-format*), file input Gaussian memiliki anatomi dan hierarki baris yang sangat ketat. Kesalahan penempatan spasi kosong (baris kosong) dapat menyebabkan program gagal berjalan (*syntax error*).

File input Gaussian, yang umumnya memiliki ekstensi .gjf (GaussView Job File) atau .com (Command file), secara fundamental terdiri dari lima blok utama yang harus ditulis secara berurutan:

1. **Link 0 Commands:** Perintah alokasi perangkat keras komputasi (memori dan prosesor).
2. **Route Section:** Dimulai dengan tanda pagar (#), berisi perintah metodologi, basis set, dan jenis pekerjaan.
3. **Title Section:** Deskripsi singkat tentang pekerjaan (sebagai penanda bagi peneliti). Blok ini wajib diakhiri dengan satu baris kosong.
4. **Charge & Multiplicity:** Dua angka bulat yang dipisahkan oleh spasi, mewakili muatan total molekul dan multiplisitas spin (misal: 0 1 untuk molekul netral berpasangan).
5. **Molecule Specification:** Matriks koordinat (X, Y, Z) atau *Z-matrix* dari struktur molekul. Blok ini juga wajib ditutup dengan satu baris kosong sebagai tanda akhir file (Cramer, 2013).

Ketertiban dan disiplin tingkat tinggi dalam menyusun matriks file input ini tidak menoleransi ambiguitas sekecil apa pun. Sebuah mesin komputasi hanya akan mematuhi hukum logika yang pasti.

6.1.3 Peran Perintah Link 0 dan Bagian Rute (*Route Section*)

Untuk mengoptimalkan riset dan mencegah komputer dari kerusakan akibat beban berlebih (*overload*), mahasiswa harus diajarkan cara memodifikasi dua bagian pertama dari file input secara manual.

Bagian Link 0: Bagian ini mengatur infrastruktur sistem. Tiga perintah yang paling krusial di sini adalah:

- `%chk=namafile.chk`: Instruksi ini memerintahkan Gaussian untuk menyimpan seluruh matriks kerapatan elektron dan orbital ke dalam sebuah file biner khusus (*checkpoint file*). File ini sangat vital karena jika listrik padam di tengah simulasi yang memakan waktu berhari-hari, peneliti dapat merestart perhitungan dari titik terakhir tanpa harus mengulang dari awal (Foresman & Frisch, 2015).

- %mem=4GB: Membatasi jumlah *Random Access Memory* (RAM) yang boleh digunakan oleh algoritma. Mengisi nilai ini melampaui kapasitas fisik komputer akan menyebabkan simulasi *crash* (*memory allocation failure*).
- %nprocshared=4: Menginstruksikan Gaussian untuk menjalankan komputasi secara paralel (membagi tugas pemecahan matriks) menggunakan 4 inti prosesor (CPU *cores*).

Bagian Rute (*Route Section*): Bagian inilah yang mendefinisikan *kimiawi* dari komputasi tersebut. Setiap baris rute selalu diawali dengan tanda # (atau #p untuk *print*, yang meminta keluaran file log agar lebih detail). Sebagai contoh, sebuah instruksi #p B3LYP/6-31G(d) Opt Freq bermakna:

- B3LYP: Gunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT) dengan fungsional hibrida Becke, 3-parameter, Lee-Yang-Parr.
- 6-31G(d): Gunakan *basis set* split-valensi Pople yang ditambahkan satu fungsi polarisasi (*d*) pada atom berat untuk mengakomodasi asimetri awan elektron saat berikatan.
- Opt: Lakukan pencarian geometri paling stabil di dasar lembah energi potensial.
- Freq: Lanjutkan dengan menghitung frekuensi vibrasi harmonis untuk memastikan struktur tersebut benar-benar minimum global (tidak ada frekuensi imajiner), sekaligus mengekstrak energi bebas Gibbs termodinamik.

Sistematika yang sangat ketat, terstruktur, dan tidak menoleransi kekeliruan dalam penyusunan anatomi file *input* Gaussian ini secara filosofis merupakan cerminan nyata dari konsep kepastian dan keteraturan dalam penciptaan alam semesta. Setiap parameter—mulai dari muatan elektron, multiplisitas, hingga alokasi memori—harus diletakkan pada "tempat yang hak" agar menghasilkan kebenaran empiris. Hal ini beresonansi kuat dengan firman Allah SWT:

وَحَلَقَ كُلَّ شَيْءٍ فَقَدَرَهُ تَقْدِيرًا

"...dan Dia telah menciptakan segala sesuatu, dan Dia menetapkan ukuran-ukurannya dengan serapi-rapinya." (QS. Al-Furqan [25]: 2).

Demikian pula halnya dalam ilmu kimia komputasi, seorang peneliti dituntut untuk meneladani "ketelitian ukuran" (*taqdir*) tersebut dalam memerintahkan mesin. Kesalahan menaruh baris kosong (sebagai pemisah hirarki koordinat molekul) berarti merusak tatanan ukuran logika yang telah dibangun, sehingga "alam simulasi" (komputasi) tersebut akan menolak untuk beroperasi (ditandai dengan pesan *Error termination via Lnk1e*).

6.2 Taksonomi Set Basis (*Basis Sets*) Terperinci

Dalam ranah kimia komputasi, menyusun file input dengan metode tingkat tinggi seperti *Density Functional Theory* (DFT) atau *Coupled Cluster* tidak akan memiliki validitas saintifik jika tidak dipasangkan dengan Set Basis (*Basis Set*) yang tepat. Set basis adalah kumpulan fungsi matematika yang digunakan untuk menyusun persamaan orbital molekul secara linier. Dengan

kata lain, set basis adalah "kosakata matematika" yang diberikan kepada perangkat lunak Gaussian untuk mendeskripsikan bentuk, ukuran, dan fleksibilitas awan elektron di dalam ruang tiga dimensi. Memilih set basis yang salah sama dengan memaksakan seorang pelukis realis untuk melukis wajah menggunakan kuas cat tembok yang sangat kasar.

6.2.1 Fungsi Gaussian Tipe-Slater (STO-nG)

Secara historis dan mekanika kuantum murni, bentuk orbital atom yang paling akurat (mendekati solusi eksak atom hidrogen) dideskripsikan oleh *Slater-Type Orbitals* (STO). Fungsi STO memiliki bentuk eksponensial $e^{-\zeta r}$, yang memberikan deskripsi sangat baik di dekat inti atom (memiliki puncak/ *cusp* yang tajam) dan meluruh secara perlahan saat menjauhi inti. Namun, secara komputasional, menghitung integral interaksi tolakan antar-elektron menggunakan fungsi STO sangatlah rumit, lambat, dan memakan memori CPU yang masif (Jensen, 2017).

Untuk mengatasi kemacetan komputasi ini, algoritma Gaussian menggunakan terobosan matematis yang mengganti fungsi STO dengan *Gaussian-Type Orbitals* (GTO) yang berbentuk $e^{-\alpha r^2}$. Kelemahan utama GTO adalah bentuknya yang melengkung tumpul di dekat inti dan meluruh terlalu cepat di ujung awan elektron. Oleh karena itu, John Pople memperkenalkan konsep *Minimal Basis Set* seperti **STO-3G**.

Dalam set basis STO-3G, alih-alih menggunakan satu fungsi Gaussian yang tidak akurat, perangkat lunak menggabungkan tiga fungsi Gaussian primitif (3G) secara linier agar kurva gabungannya menyerupai satu fungsi Slater (STO) yang ideal (Hehre, Stewart, & Pople, 1969). Dalam aplikasi laboratorium kelas, STO-3G sangat berguna untuk mengajarkan konsep optimasi geometri dasar yang berjalan sangat cepat, namun mahasiswa harus diperingatkan bahwa set basis minimal ini sering kali gagal secara fatal jika digunakan untuk menghitung parameter termodinamika kuantitatif seperti entalpi reaksi.

6.2.2 Set Basis Valensi-Terbelah (*Split-Valence 6-31G* dan Variannya)

Molekul yang bereaksi tidak melibatkan elektron inti (*core electrons*); reaksi kimia sepenuhnya dikendalikan oleh dinamika elektron valensi di kulit terluar. Berdasarkan fakta fisik ini, para kimiawan komputasi mengembangkan Set Basis Valensi-Terbelah (*Split-Valence*). Dalam model ini, elektron inti dideskripsikan oleh fungsi matematika yang kaku, sementara elektron valensi diberikan dua atau lebih fungsi yang ukuran spasialnya berbeda, memungkinkan awan elektron valensi untuk mengembang atau menyusut saat berikatan dengan atom lain (Cramer, 2013).

Set basis yang paling populer dan menjadi standar universal dalam modul Gaussian adalah keluarga Pople, seperti **6-31G**. Mahasiswa wajib memahami dekonstruksi dari nomenklatur ini:

- **6**: Elektron inti (seperti kulit 1s pada karbon) direpresentasikan oleh 6 fungsi Gaussian primitif yang digabung menjadi satu.
- **31**: Elektron valensi (kulit 2s dan 2p pada karbon) "dibelah" menjadi dua fungsi terpisah. Fungsi pertama (untuk bagian dalam kulit valensi) menggunakan 3 fungsi primitif, dan

fungsi kedua (untuk bagian luar yang lebih difus) menggunakan 1 fungsi primitif (Ditchfield, Hehre, & Pople, 1971).

Variasi set basis ini dapat ditingkatkan menjadi *Triple-Zeta* (seperti 6-311G), di mana fungsi valensi dibelah menjadi tiga bagian yang memberikan fleksibilitas ekstrem bagi awan elektron untuk menyesuaikan diri dengan lingkungan molekulernya.

6.2.3 Fungsi Polarisasi dan Fungsi Difusi (*Diffuse Functions*)

Dalam realitas ikatan kimia, ketika atom karbon berikatan kovalen, awan elektronnya tidak lagi berbentuk bola sferis (orbital s) atau halter simetris (orbital p) yang sempurna. Tarikan dari atom tetangga akan membuat awan elektron berubah bentuk secara asimetris. Untuk mengakomodasi distorsi bentuk ini di dalam Gaussian, mahasiswa harus menambahkan **Fungsi Polarisasi** pada file *input*.

- Penambahan kutipan (d) atau * (misalnya 6-31G(d) atau 6-31G*): Menginstruksikan Gaussian untuk menambahkan fungsi matematika berbentuk orbital- d pada atom berat (non-hidrogen). Hal ini memungkinkan orbital- p membengkok ke arah atom yang berikatan.
- Penambahan kutipan (d,p) atau **: Menambahkan fungsi orbital- p pada atom hidrogen. Sangat krusial untuk simulasi ikatan hidrogen.

Selanjutnya, jika mahasiswa sedang memodelkan molekul yang memiliki kerapatan elektron sangat jauh dari inti—seperti anion (ion bermuatan negatif), keadaan tereksitasi (*excited states*), atau interaksi Van der Waals jarak jauh—mereka wajib menggunakan **Fungsi Difusi** (*Diffuse Functions*).

- Penambahan tanda + (misalnya 6-31+G(d)): Menambahkan fungsi Gaussian yang sangat lebar dan datar pada atom berat untuk menampung elektron yang meluber jauh dari inti atom.
- Tanda ++: Menambahkan fungsi difusi hingga ke atom hidrogen (Lewars, 2016).

Menggunakan set basis Pople dengan fungsi polarisasi dan difusi penuh, seperti 6-311++G(d,p), memberikan keakuratan yang luar biasa, namun menuntut kapasitas memori RAM dan waktu komputasi yang sangat signifikan.

Secara filosofis, evolusi penciptaan set basis—dari STO-3G yang sederhana hingga 6-311++G(d,p) yang sangat kompleks—merupakan cerminan dari kegigihan dan sekaligus keterbatasan akal manusia dalam memodelkan realitas kuantum ciptaan Tuhan. Ilmuwan terus menambahkan "fungsi matematika" baru untuk mengakali keterbatasan pemahaman mereka terhadap kesempurnaan alam semesta. Hal ini menggemakan pesan bahwa pengetahuan manusia selalu berada dalam proses mendekati kebenaran, namun kebenaran absolut dan ilmu yang meliputi segalanya hanyalah milik Allah SWT.

Allah SWT menegaskan betapa luasnya dimensi ilmu-Nya yang tidak akan pernah tuntas dituliskan atau dimodelkan oleh manusia:

قُلْ لَوْ كَانَ الْبَحْرُ مِدَادًا لِكَلِمَاتِ رَبِّي لَنَفِدَ الْبَحْرُ قَبْلَ أَنْ تَنفَدَ كَلِمَاتُ رَبِّي وَلَوْ جِئْنَا بِمِثْلِهِ مَدَدًا

"Katakanlah: Kalau sekiranya lautan menjadi tinta untuk (menulis) kalimat-kalimat Tuhanku, sungguh habislah lautan itu sebelum habis (ditulis) kalimat-kalimat Tuhanku, meskipun Kami datangkan tambahan sebanyak itu (pula)." (QS. Al-Kahfi [18]: 109).

Deretan matriks angka dari set basis di dalam perangkat lunak Gaussian hanyalah sekumpulan kecil "tinta" dari samudra ilmu Tuhan. Penyadaran epistemologis ini mendidik para peneliti dan mahasiswa kimia komputasi untuk tidak bersikap arogan terhadap hasil *output* mesin, melainkan senantiasa memvalidasinya secara empiris dan menyadari kedudukannya sebagai pembelajar di hadapan keluasan ilmu Sang Pencipta.

6.3 Eksplorasi Permukaan Energi Potensial (PES)

Permukaan Energi Potensial (*Potential Energy Surface* / PES) adalah konsep paling sentral dalam memahami reaktivitas kimia teoretis. PES pada dasarnya adalah topologi multidimensi (mirip dengan lanskap pegunungan dan lembah) yang memetakan hubungan antara energi total suatu molekul dengan seluruh koordinat geometri atom-atom penyusunnya. Melalui sinergi antara mesin komputasi Gaussian dan antarmuka GaussView, mahasiswa tidak lagi hanya membayangkan lanskap ini secara abstrak, melainkan dapat "menjelajahnya" secara matematis dan visual untuk menentukan mekanisme reaksi yang paling masuk akal.

6.3.1 Metodologi Pemindaian Koordinat (*Coordinate Scan*)

Langkah pertama dalam mengeksplorasi PES adalah melakukan pemindaian koordinat. Pemindaian ini bertujuan untuk melihat bagaimana profil energi berubah ketika satu parameter geometri (seperti panjang ikatan, sudut, atau sudut dihedral) diubah secara bertahap, sementara koordinat atom lainnya dibiarkan berelaksasi (mencari posisi paling stabil).

Dalam Gaussian, instruksi komputasi ini dikenal sebagai *Relaxed Potential Energy Surface Scan*. Pengaturannya di dalam GaussView sangatlah visual dan intuitif. Mahasiswa menggunakan alat *Redundant Coordinate Editor*. Melalui alat ini, mahasiswa dapat memilih, misalnya, empat atom berurutan pada molekul *n*-butana untuk mendefinisikan sudut dihedral (torsi). Mahasiswa kemudian menginstruksikan Gaussian untuk memutar sudut tersebut dari 0° hingga 360° dengan penambahan (*step size*) sebesar 10° . GaussView akan menerjemahkan tindakan visual ini menjadi baris perintah Gaussian: `Opt=ModRedundant` (Foresman & Frisch, 2015).

Setelah Gaussian selesai menghitung energi pada setiap 36 titik tersebut, GaussView akan merangkum *file output* dan menyajikannya dalam bentuk kurva profil energi dua dimensi. Mahasiswa dapat melihat secara langsung puncak energi (halangan sterik tertinggi pada konformasi eklips) dan lembah energi (konformasi anti dan *gauche*). Metodologi ini

menyingkirkan hafalan buta dari buku teks kimia organik, menggantinya dengan pembuktian termodinamika secara empiris-komputasional.

6.3.2 Identifikasi Puncak Titik Pelana (*Saddle Points*)

Jika *Coordinate Scan* memberikan gambaran kasar tentang bukit energi, tantangan sesungguhnya dalam penelitian mekanisme reaksi adalah menemukan titik puncak eksak dari bukit tersebut, yang dikenal sebagai Keadaan Transisi (*Transition State / TS*). Secara matematis pada lanskap PES, keadaan transisi bukanlah puncak gunung tertinggi, melainkan sebuah "titik pelana" orde pertama (*first-order saddle point*). Titik pelana adalah kondisi di mana energi berada pada tingkat maksimum di sepanjang satu jalur spesifik (jalur reaksi pemutusan ikatan), namun berada pada tingkat minimum di semua arah koordinat lainnya (Cramer, 2013).

Menemukan titik pelana ini di Gaussian jauh lebih sulit daripada mencari molekul stabil (lembah energi). Mahasiswa harus menggunakan kata kunci `Opt=(TS, CalcFC, NoEigenTest)`. Kata kunci `CalcFC` (*Calculate Force Constants*) memerintahkan Gaussian untuk menghitung matriks turunan kedua (Hessian) secara analitik pada langkah pertama, sebuah proses yang memakan waktu cukup lama namun sangat krusial untuk mengarahkan algoritma "mendaki" ke arah titik pelana, bukan "turun" ke lembah (Peng et al., 1996).

Validasi mutlak dari keberhasilan penemuan keadaan transisi ini dibuktikan melalui perhitungan Frekuensi Vibrasi (Freq). Keadaan transisi yang benar **wajib** memiliki tepat satu frekuensi imajiner (ditandai dengan nilai negatif pada spektrum frekuensi). GaussView memainkan peran visual yang sangat memukau di sini: ketika mahasiswa mengklik frekuensi imajiner tersebut dan menekan tombol *Start Animation*, layar akan menampilkan molekul yang sedang bergerak maju-mundur tepat pada vektor pemutusan ikatan (misalnya hidrogen yang berpindah dari satu atom karbon ke atom oksigen). Ini adalah visualisasi dari momen paling kritis dalam sebuah reaksi kimia yang berlangsung hanya dalam orde femtodetik di dunia nyata.

6.3.3 Pemetaan Jalur Reaksi Intrinsik (IRC)

Mendapatkan titik pelana dengan satu frekuensi imajiner belum cukup untuk menyimpulkan sebuah mekanisme reaksi. Peneliti harus membuktikan secara matematis bahwa "puncak bukit" tersebut benar-benar menghubungkan "lembah reaktan" dan "lembah produk" yang dituju, dan bukan mengarah ke molekul lain. Pembuktian ini dilakukan menggunakan perhitungan *Intrinsic Reaction Coordinate* (IRC).

Perhitungan IRC di dalam Gaussian (menggunakan kata kunci IRC) menelusuri secara perlahan jalur penurunan energi paling curam (*steepest descent path*) dari puncak keadaan transisi, baik ke arah maju (menuju produk) maupun ke arah mundur (menuju reaktan), menggunakan algoritma integrasi yang sangat presisi seperti yang dirumuskan oleh Gonzalez dan Schlegel (1989).

Secara pedagogis, memutar animasi hasil perhitungan IRC di GaussView sama halnya dengan memutar film gerak lambat (*slow-motion*) dari sebuah reaksi kimia. Mahasiswa dapat melihat tahap demi tahap ikatan lama memanjang, awan elektron bergeser, dan ikatan baru terbentuk hingga molekul akhirnya "jatuh" ke dasar PES menjadi produk yang stabil.

Kecenderungan materi (atom dan elektron) untuk secara konsisten mengikuti satu jalur spesifik dengan hambatan energi terendah—di antara jutaan probabilitas ruang tiga dimensi yang acak—merupakan perumpamaan fisika yang indah tentang konsep kepastian hukum alam dan "Jalan yang Lurus". Setiap reaksi di alam semesta telah memiliki jalur intrinsiknya masing-masing untuk mencapai keseimbangan termodinamika. Hal ini dapat direfleksikan dengan firman Allah SWT tentang kepatuhan seluruh entitas terhadap jalur/jalan yang telah digariskan-Nya:

وَأَنَّ هَذَا صِرَاطِي مُسْتَقِيمًا فَاتَّبِعُوهُ وَلَا تَتَّبِعُوا السُّبُلَ فَتَفَرَّقَ بِكُمْ عَن سَبِيلِهِ ۚ ذَٰلِكُمْ وَصَّاكُم بِهِ لَعَلَّكُمْ تَتَّقُونَ

"Dan bahwa (yang Kami perintahkan ini) adalah jalan-Ku yang lurus, maka ikutilah dia, dan janganlah kamu mengikuti jalan-jalan (yang lain), karena jalan-jalan itu mencerai-beraikan kamu dari jalan-Nya. Yang demikian itu diperintahkan Allah agar kamu bertakwa." (QS. Al-An'am [6]: 153).

Secara filosofis-saintifik, jalur reaksi intrinsik (IRC) adalah representasi mikroskopis dari *shirathal mustaqim* (jalan lurus/jalur optimal) bagi pergerakan elektron dan ikatan kimia. Mengikuti lintasan IRC berarti mematuhi energi aktivasi terendah yang telah ditetapkan oleh hukum ketetapan Tuhan (sunnatullah), sedangkan melenceng ke arah jalan-jalan lain (*subul*) pada permukaan energi potensial hanya akan menghasilkan keadaan transisi palsu atau membutuhkan energi tak terhingga yang tidak akan pernah mencapai kestabilan.

6.4 Pendekatan Orbital Ikatan Natural (Natural Bond Orbital / NBO)

Teori Orbital Molekul (MO) konvensional sering kali menghasilkan fungsi gelombang yang terdelokalisasi ke seluruh bagian molekul. Meskipun hal ini akurat secara matematis untuk memprediksi spektrum transisi elektronik, pendekatan ini sangat sulit dipahami secara intuitif oleh ahli kimia organik yang terbiasa berpikir dalam kerangka Struktur Lewis (ikatan dua elektron di antara dua atom, serta pasangan elektron bebas). Untuk menjembatani paradigma mekanika kuantum dengan intuisi kimia klasik ini, perangkat lunak Gaussian mengintegrasikan analisis *Natural Bond Orbital* (NBO) yang dikembangkan oleh kelompok riset Prof. Frank Weinhold.

6.4.1 Dinamika Donasi Elektron Kuantum

Analisis NBO secara esensial adalah proses transformasi matematis. Ia mengambil matriks kerapatan elektron yang terdelokalisasi dari hasil perhitungan *Self-Consistent Field* (SCF) dan melokalisasinya menjadi set orbital yang secara maksimal menempati wilayah ikatan (ikatan σ atau π), pasangan elektron bebas (*lone pairs*), dan orbital Rydberg (inti yang kosong).

Melalui penyisipan kata kunci `Pop=NBO` pada file *input* Gaussian, mahasiswa dapat menginstruksikan perangkat lunak untuk menjalankan program NBO secara otomatis pada akhir perhitungan energi. File *output* yang dihasilkan akan menyajikan persentase karakter *s* dan *p* dari setiap ikatan. Sebagai contoh, dalam molekul metana (CH_4), analisis NBO akan membuktikan secara kuantitatif bahwa ikatan C-H terbentuk dari hibridisasi sp^3 murni pada atom karbon (mengandung 25% karakter *s* dan 75% karakter *p*) (Weinhold & Landis, 2012). Hal ini memberikan bukti komputasi yang sangat solid terhadap teori hibridisasi Pauling yang selama ini hanya diterima secara dogmatis oleh mahasiswa di tingkat dasar.

6.4.2 Analisis Hiperkonjugasi terhadap Kestabilan Molekul

Aplikasi paling krusial dari analisis NBO dalam riset kimia tingkat lanjut adalah kemampuannya untuk mengkuantifikasi efek stabilisasi akibat delokalisasi elektron tingkat kedua, atau yang secara kimia organik dikenal sebagai **hiperkonjugasi**.

Ketika mahasiswa memodelkan konformasi molekul etana (C_2H_6), optimasi geometri membuktikan bahwa konformasi *staggered* (bersilang) lebih stabil sekitar 3 kkal/mol dibandingkan konformasi *eclipsed* (berhimpitan). Penjelasan buku teks klasik sering kali mengaitkan hal ini murni pada "tolakan sterik" antar atom hidrogen. Namun, analisis NBO mengungkap realitas kuantum yang jauh lebih mendalam. Melalui tabel *Second-Order Perturbation Theory* (Teori Perturbasi Orde Kedua) di dalam *output* NBO, Gaussian menghitung besarnya energi donasi ($E^{(2)}$) dari orbital ikatan (σ) ke orbital anti-ikatan yang kosong (σ^*) milik atom tetangganya.

Dalam konformasi *staggered*, posisi ikatan σ_{C-H} sejajar sempurna (paralel) dengan orbital σ^*_{C-H} di sebelahnya, memungkinkan terjadinya tumpang tindih (*overlap*) ruang dan donasi kerapatan elektron secara maksimal. "Kebocoran" elektron ke orbital kosong ini memberikan stabilisasi energi yang signifikan. Sebaliknya, pada konformasi *eclipsed*, ortogonalitas spasial mencegah terjadinya donasi ini. Analisis $E^{(2)}$ membuktikan bahwa hiperkonjugasi (donasi $\sigma \rightarrow \sigma^*$) adalah penyumbang utama terhadap penghalang rotasi etana, meruntuhkan mitos tolakan sterik klasik (Glendening, Landis, & Weinhold, 2013).

6.4.3 Visualisasi Interaksi Kerapatan Orbital (NBO/NRT)

Angka-angka matriks interaksi donasi-akseptor pada *output* teks Gaussian dapat divisualisasikan dengan sangat elegan menggunakan GaussView. Melalui menu *Orbital Surfaces*, mahasiswa dapat memplot secara serentak dua orbital NBO yang sedang berinteraksi: misalnya, memplot pasangan elektron bebas (dilambangkan sebagai orbital n) dari atom oksigen dengan warna merah/biru, bertumpang tindih dengan orbital anti-ikatan (π^*) dari gugus karbonil di dekatnya dengan warna kuning/hijau.

Visualisasi ini sangat vital dalam menjelaskan mekanisme efek anomerik pada karbohidrat, penentuan tapak aktif serangan nukleofilik, hingga kajian perpindahan muatan (*charge transfer*) pada material semikonduktor organik. Mahasiswa dapat melihat secara langsung bagaimana lobi-lobi awan elektron menyusup masuk ke dalam ruang kosong milik atom tetangganya, menciptakan jembatan komunikasi elektronik antar-molekul.

Secara filosofis, fenomena donasi (pemberian) elektron ke dalam ruang akseptor (penerima) yang kosong untuk mencapai tingkat stabilitas molekuler yang lebih tinggi ini merupakan cerminan submikroskopis dari prinsip keseimbangan hidup berpasangan-pasangan yang saling melengkapi. Kestabilan alam semesta tidak dibangun dari entitas yang egois dan terisolasi, melainkan dari interaksi saling memberi dan menerima yang harmoni. Prinsip berpasangan dalam penciptaan ini ditegaskan oleh Allah SWT:

سُبْحَانَ الَّذِي خَلَقَ الْأَزْوَاجَ كُلَّهَا مِمَّا تُنْبِتُ الْأَرْضُ وَمِنْ أَنْفُسِهِمْ وَمِمَّا لَا يَعْلَمُونَ

"Maha Suci Tuhan yang telah menciptakan pasangan-pasangan semuanya, baik dari apa yang ditumbuhkan oleh bumi dan dari diri mereka maupun dari apa yang tidak mereka ketahui." (QS. Ya Sin [36]: 36).

Frasa "apa yang tidak mereka ketahui" (*wa mimma la ya'lamun*) mencakup dimensi kuantum yang tak kasatmata. Interaksi berpasangan antara elektron donor (yang memberikan kerapatan elektron) dan orbital akseptor (yang menyediakan ruang kosong penerima) merupakan bentuk konkret dari pasangan-pasangan (*azwaj*) di ranah subatomik. Kestabilan molekul yang lahir dari tumpang tindih orbital NBO ini adalah bukti bahwa hukum kodrat (*sunnatullah*) tentang harmoni dan integrasi berpasangan berlaku mutlak hingga ke tingkat partikel terkecil.

6.5 Pedagogi Termodinamika Komputasi

Setelah menguasai optimasi geometri, pemindaian permukaan energi potensial (PES), dan analisis orbital (NBO), puncak dari aplikasi Gaussian dan GaussView di tingkat sarjana maupun pascasarjana adalah evaluasi termodinamika secara kuantitatif. Eksperimen di laboratorium kimia fisik tradisional untuk mengukur kalor reaksi (seperti menggunakan bom kalorimeter) sering kali memakan waktu, mahal, dan berbahaya jika melibatkan senyawa yang mudah meledak atau beracun. Melalui pedagogi termodinamika komputasi, mahasiswa diajarkan untuk memprediksi besaran makroskopis seperti Entalpi (\$H\$), Entropi (\$S\$), dan Energi Bebas Gibbs (\$G\$) sepenuhnya dari prinsip mekanika kuantum dasar.

6.5.1 Ketepatan Kalkulasi Entalpi Pembentukan

Tantangan konseptual terbesar bagi mahasiswa saat membaca file *output* Gaussian adalah memahami bahwa "Energi Total" (dalam satuan *Hartree*) yang dicetak pada akhir siklus *Self-Consistent Field* (SCF) bukanlah entalpi pembentukan (ΔH_f) yang biasa mereka temukan di buku teks termodinamika dasar. Energi SCF murni hanyalah energi elektronik pada dasar lembah potensial (0 Kelvin) tanpa memperhitungkan pergerakan atom.

Untuk mengekstraksi nilai termodinamika pada suhu ruang (misalnya 298,15 K), mahasiswa diwajibkan untuk menjalankan kalkulasi frekuensi vibrasi dengan menambahkan kata kunci *Freq* pada file input Gaussian. Dari output kalkulasi ini, Gaussian akan menerapkan prinsip mekanika statistik untuk menghitung Koreksi Energi Titik Nol (*Zero-Point Energy* / ZPE) serta fungsi partisi termal (translasi, rotasi, dan vibrasi).

Mahasiswa diajarkan untuk merumuskan perhitungan entalpi secara manual dari data mentah tersebut. Untuk mencari Entalpi Reaksi (ΔH_{rxn}), mereka memodelkan molekul reaktan dan produk secara terpisah, mencari jumlah Energi Elektronik + Koreksi Entalpi Termal (yang disediakan langsung di tabel *output* Gaussian), kemudian mengaplikasikan Hukum Hess:

$$\Delta H_{rxn} = \sum H_{\text{produk}} - \sum H_{\text{reaktan}}.$$

Proses ini memberikan kepuasan intelektual yang tinggi, karena mahasiswa tidak lagi sekadar menerima data dari tabel secara dogmatis, melainkan mampu menurunkannya secara mandiri melalui penyelesaian matriks fisika kuantum (Cramer, 2013).

6.5.2 Studi Kasus: Entalpi Turunan Alkil Tiofena

Agar pembelajaran termodinamika komputasi selaras dengan standar riset internasional, dosen dapat mengadopsi literatur primer sebagai modul praktikum. Salah satu studi kasus yang sangat relevan adalah penelitian tentang entalpi pembentukan senyawa turunan alkil tiofena pada fase gas, sebagaimana dipublikasikan oleh Nikoofard (2015).

Dalam kajian tersebut, mahasiswa dapat mereplikasi eksperimen menggunakan GaussView untuk membangun seri molekul tiofena yang disubstitusi oleh rantai alkil dengan panjang yang bervariasi pada posisi cincin β . Setelah mengoptimasi struktur, mahasiswa menghitung Entalpi Pembentukan Standar (ΔH_f°) menggunakan pendekatan energi atomisasi.

Berdasarkan jurnal tersebut, perhitungan dengan tingkat teori B3LYP/6-31G(d,p) terbukti menghasilkan korelasi linear yang sangat baik (sangat presisi) antara nilai entalpi pembentukan fasa gas dengan panjang rantai substituen (Nikoofard, 2015). Dengan melakukan simulasi ini sendiri, mahasiswa belajar secara langsung bagaimana gugus pendonor elektron (seperti alkil) mempengaruhi distribusi energi internal dan stabilitas termodinamika cincin aromatik heterosiklik. Ini merupakan bentuk integrasi riset tingkat tinggi ke dalam ruang kelas yang dapat diakses hanya dengan menggunakan komputer pribadi (laptop).

6.5.3 Analisis Perbandingan Pendekatan Hartree-Fock dan DFT

Tidak ada satu pun metode di dalam kimia komputasi yang memberikan kebenaran instan. Oleh karena itu, mahasiswa harus dilatih untuk melakukan analisis komparatif tingkat lanjut. Dalam studi kasus termodinamika alkil tiofena di atas, mahasiswa dapat diperintahkan untuk menghitung ulang molekul yang sama menggunakan pendekatan *Ab Initio* konvensional, yaitu Hartree-Fock (HF), dan membandingkannya dengan metode *Density Functional Theory* (DFT).

Hasil dari eksperimen komputasi ini akan menunjukkan fenomena yang mencolok: nilai kalkulasi entalpi termodinamika menggunakan metode HF secara konsisten meleset (memiliki galat yang besar) jika dibandingkan dengan data eksperimen (Nikoofard, 2015). Mahasiswa kemudian didorong untuk mencari tahu "mengapa". Secara teoretis, HF mengabaikan korelasi elektron (kecenderungan elektron untuk saling menghindari satu sama lain secara dinamis), sedangkan fungsional DFT seperti B3LYP memperhitungkan korelasi tersebut meskipun hanya melalui pendekatan kerapatan fungsi (Koch & Holthausen, 2001). Perbandingan ini mengajarkan mahasiswa untuk kritis dalam memilih level komputasi (kimia model) sebelum publikasi ilmiah.

Secara filosofis dan spiritual, perbedaan tingkat ketelitian antara algoritma manusia (seperti HF dan DFT) dalam meniru hukum alam ini menyadarkan kita pada ketidaksempurnaan akal budi, sekaligus mengagungkan ketelitian mutlak yang hanya dimiliki oleh Sang Pencipta. Berbeda

dengan pendekatan matematis manusia yang sering kali meleset dan membutuhkan faktor koreksi, perhitungan alam semesta yang dikelola oleh Allah SWT tidak pernah salah sedikit pun. Hal ini ditegaskan dalam firman-Nya:

وَكُلَّ شَيْءٍ أَحْصَيْنَاهُ كِتَابًا

"Dan segala sesuatu telah Kami catat dalam suatu kitab (buku catatan)." (QS. An-Naba' [78]: 29).

Lafaz *ahsainahu* memiliki akar kata yang sama dengan menghitung atau mengkalkulasi dengan sangat detail dan teliti hingga bagian terkecilnya (seperti kerikil/batu kecil). Dalam konteks termodinamika kimia, Allah telah mengkalkulasi energi setiap elektron, rotasi setiap ikatan, dan frekuensi setiap vibrasi dalam entalpi molekul dengan perhitungan absolut (*absolute exact*). Berbagai perangkat lunak komputasi seperti Gaussian hanyalah instrumen *ijtihad* saintifik manusia untuk mendekati (mengaproksimasi) catatan mahateliti tersebut, memantik rasa tunduk dan rendah hati di kalangan para ilmuwan.

DAFTAR PUSTAKA BAB 6

Cramer, C. J. (2013). *Essentials of computational chemistry: theories and models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Ditchfield, R., Hehre, W. J., & Pople, J. A. (1971). Self-consistent molecular-orbital methods. IX. An extended Gaussian-type basis for molecular-orbital studies of organic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 54(2), 724-728.

Foresman, J. B., & Frisch, A. (2015). *Exploring chemistry with electronic structure methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Glendening, E. D., Landis, C. R., & Weinhold, F. (2013). NBO 6.0: Natural bond orbital analysis program. *Journal of Computational Chemistry*, 34(16), 1429-1437.

Gonzalez, C., & Schlegel, H. B. (1989). An improved algorithm for reaction path following. *The Journal of Chemical Physics*, 90(4), 2154-2161.

Hehre, W. J., Stewart, R. F., & Pople, J. A. (1969). Self-consistent molecular-orbital methods. I. Use of Gaussian expansions of Slater-type atomic orbitals. *The Journal of Chemical Physics*, 51(6), 2657-2664.

Jensen, F. (2017). *Introduction to computational chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Koch, W., & Holthausen, M. C. (2001). *A chemist's guide to density functional theory* (2nd ed.). Wiley-VCH.

Lewars, E. G. (2016). *Computational chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics* (3rd ed.). Springer.

Nikoofard, H. (2015). Computational Thermo-chemical Study of Enthalpies of formation of Alkylthiophenes Using Ab Initio and DFT Calculations. *Acta Chimica Slovenica*, 62, 910-916.

Peng, C., Ayala, P. Y., Schlegel, H. B., & Frisch, M. J. (1996). Using redundant internal coordinates to optimize equilibrium geometries and transition states. *Journal of Computational Chemistry*, 17(1), 49-56.

Weinhold, F., & Landis, C. R. (2012). *Discovering chemistry with natural bond orbitals*. John Wiley & Sons.

BAB 7: PLATFORM WEB DAN AKSES LABORATORIUM AWAN (CHEMCOMPUTE & JMOL)

7.1 Paradigma Komputasi Awan dalam Kimia

Secara historis, penerapan kimia komputasi di institusi pendidikan selalu dibayangi oleh dua kendala utama: biaya lisensi perangkat lunak yang eksesif dan spesifikasi perangkat keras (komputer) yang sangat tinggi. Komputasi *ab initio* membutuhkan memori (RAM) dan kekuatan prosesor (CPU) yang masif. Namun, pergeseran teknologi menuju Komputasi Awan (*Cloud Computing*) telah menciptakan revolusi epistemologis dan infrastruktur. Dengan memindahkan beban komputasi dari komputer lokal ke pelayan (server) superkomputer jarak jauh yang dapat diakses murni melalui peramban web (*web browser*), pintu eksplorasi molekuler kini terbuka lebar bagi setiap mahasiswa tanpa batasan perangkat keras.

7.1.1 Demokratisasi Akses melalui ChemCompute dan NWChem

Salah satu manifestasi paling nyata dari revolusi awan dalam pendidikan kimia adalah platform *ChemCompute* (chemcompute.org). Platform ini dikembangkan secara khusus oleh kelompok riset Mark Perri dengan dukungan dari *National Science Foundation* (NSF) dan infrastruktur XSEDE (*Extreme Science and Engineering Discovery Environment*) di Amerika Serikat (Perri & Weber, 2014).

Tujuan fundamental ChemCompute adalah mendemokratisasi akses terhadap perangkat lunak kimia kuantum tingkat tinggi. Melalui antarmuka web yang sangat intuitif, mahasiswa sarjana dapat menjalankan eksperimen menggunakan paket komputasi tangguh seperti GAMESS (untuk perhitungan struktur elektronik molekuler) dan NWChem (untuk perhitungan kimia kuantum berskala besar dan molekul periodik) tanpa perlu melakukan instalasi sistem operasi Linux yang rumit di komputer mereka. Mahasiswa cukup menggambar molekul di kanvas web yang disediakan (berbasis JSME atau JSmol), memilih metode komputasi (seperti B3LYP/6-31G*), dan menekan tombol *Submit*. Perintah ini dikirim melintasi awan menuju superkomputer nyata, dihitung secara cepat, dan hasil visualisasinya dikembalikan langsung ke peramban web mahasiswa.

Proses ini secara efektif menghancurkan hambatan finansial dan teknis, memungkinkan institusi pendidikan dengan anggaran terbatas di negara berkembang untuk tetap menyelenggarakan praktikum kimia fisik berstandar internasional.

7.1.2 Pengurangan Ketergantungan Perangkat Keras Lokal

Ketergantungan pada fasilitas Komputasi Kinerja Tinggi (*High-Performance Computing* / HPC) lokal sering kali menjadi penghambat utama inovasi kurikulum. Pemeliharaan klaster server di

laboratorium universitas menuntut biaya listrik, pendingin udara, dan teknisi TI yang bekerja penuh waktu.

Paradigma komputasi awan mengalihkan seluruh beban pemeliharaan ini kepada penyedia layanan terpusat. Dalam model ini, perangkat keras yang digunakan oleh mahasiswa di ruang kelas bertindak sekadar sebagai *Thin Client* (klien tipis). Ini berarti, sebuah simulasi termodinamika atau optimasi keadaan transisi yang memakan waktu sehari-hari dapat dijalankan hanya menggunakan komputer jinjing (*laptop*) dasar atau bahkan sebuah komputer tablet (seperti Chromebook), asalkan memiliki koneksi internet yang stabil (Balu et al., 2015). Pergeseran dari modal fisik (pembelian komputer mahal) menjadi aksesibilitas digital murni ini memungkinkan dosen untuk memberikan tugas pekerjaan rumah (PR) berbasis komputasi, di mana mahasiswa dapat menjalankan perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) dari kamar kos mereka masing-masing.

7.1.3 Keamanan dan Manajemen Data Daring

Tantangan dari pelaksanaan komputasi di lingkungan berbasis web adalah manajemen hasil (data *output*). Dalam perangkat lunak desktop (seperti Gaussian), file log komputasi tersimpan aman di cakram keras (*hard drive*) lokal. Di platform awan seperti ChemCompute, keamanan dan manajemen data diatur melalui sistem akun terenkripsi.

Mahasiswa mendaftarkan akun di platform tersebut, dan seluruh pekerjaan komputasi (*jobs*) yang mereka jalankan akan tersimpan secara otomatis di dalam rekam jejak awan. Model ini menawarkan keunggulan pedagogis yang luar biasa:

- **Kolaborasi Tanpa Batas:** Mahasiswa dapat membagikan tautan pekerjaan (*job link*) mereka kepada dosen pembimbing. Dosen tidak perlu meminta *flashdisk* untuk menyalin file *output*; mereka cukup mengklik tautan tersebut untuk melihat langsung di mana letak kesalahan (galat) parameter input yang dibuat oleh mahasiswa.
- **Reproduksibilitas:** Data termodinamika atau file koordinat XYZ dapat diunduh kapan saja dan dipanggil kembali ke dalam platform interaktif seperti Jupyter Notebooks untuk analisis data (Python) yang lebih mendalam di kemudian hari (Gómez-Bombarelli et al., 2016).

Secara filosofis, konsep "komputasi awan" yang mendistribusikan sumber daya (komputasi dan data) secara merata ke berbagai tempat yang membutuhkan, memberikan paralelisme makna dengan fungsi awan di alam semesta. Awan diciptakan Tuhan bukan sekadar sebagai uap air, melainkan sebagai infrastruktur pembawa "sumber kehidupan" (hujan) yang mendistribusikan air dari lautan ke daratan yang tandus agar kehidupan dapat tumbuh merata tanpa dimonopoli oleh satu wilayah saja. Allah SWT berfirman:

وَاللَّهُ الَّذِي أَرْسَلَ الرِّيَّاحَ فَتُثِيرُ سَحَابًا فَيَسْقِيهِمْ مِنْهُم مَّاءَ بَلَدٍ مَّيِّتٍ فَأَحْيَيْنَا بِهِ الْأَرْضَ بَعْدَ مَوْتِهَا ۗ كَذَلِكَ النُّشُورُ

"Dan Allah-lah yang mengirimkan angin; lalu angin itu menggerakkan awan, maka Kami halau awan itu ke suatu negeri yang mati lalu Kami hidupkan bumi setelah matinya dengan hujan itu. Demikianlah kebangkitan itu." (QS. Fathir [35]: 9).

Sebagaimana *sahaban* (awan) dihalau untuk menghidupkan negeri yang mati, infrastruktur "awan komputasi" (cloud computing) bekerja menggerakkan dan mendistribusikan ilmu pengetahuan (daya komputasi superkomputer) melintasi benua. Ia menghidupkan iklim riset di institusi atau wilayah-wilayah yang sebelumnya "mati" karena keterbatasan biaya dan infrastruktur, membuktikan bahwa teknologi dapat digunakan untuk pemerataan keadilan akses pendidikan yang rahmatan lil 'alamin.

7.2 Visualisasi Interaktif Lanjutan dengan Jmol dan JSmol

Keberhasilan komputasi awan (*cloud computing*) dalam bidang kimia komputasi tidak akan bermakna tanpa adanya instrumen visualisasi yang mampu beroperasi langsung di dalam antarmuka peramban web (*web browser*). Di sinilah perangkat lunak sumber terbuka (*open-source*) Jmol, beserta evolusi modernnya yaitu JSmol, memainkan peran historis dan teknis yang sangat revolusioner. Keduanya menjembatani celah antara tumpukan data numerik di pelayan (*server*) jarak jauh dengan mata mahasiswa di ruang kelas.

7.2.1 Transisi Arsitektur dari Java ke HTML5 (JSmol)

Pada awal dekade 2000-an, integrasi visualisasi molekul tiga dimensi di dalam halaman web sangat bergantung pada teknologi *Java Applet*. Jmol versi awal dibangun menggunakan bahasa pemrograman Java. Namun, seiring berjalannya waktu, berbagai celah keamanan (*security vulnerabilities*) pada modul Java membuat perusahaan pengembang peramban web utama (seperti Google Chrome dan Mozilla Firefox) secara serentak memblokir eksekusi *Java Applet* di dalam peramban mereka. Hal ini sempat memicu krisis pedagogis, di mana ratusan situs pendidikan kimia di seluruh dunia mendadak tidak dapat berfungsi (Hanson, 2010).

Untuk menyelamatkan ekosistem pendidikan kimia virtual ini, para pengembang Jmol (dipimpin oleh Robert M. Hanson) memelopori sebuah proyek penerjemahan kode berskala masif. Mereka mentranskripsikan seluruh pustaka Java dari Jmol ke dalam bahasa JavaScript murni dan HTML5, melahirkan **JSmol** (Hanson et al., 2013). Terobosan ini luar biasa penting karena JSmol bersifat *plugin-free* (tidak memerlukan instalasi perangkat lunak tambahan apa pun). Mulai dari komputer meja berspesifikasi tinggi, tablet, hingga telepon pintar, mahasiswa kini dapat memutar, memperbesar, dan memanipulasi molekul protein raksasa langsung di layar gawai mereka secara instan.

7.2.2 Manipulasi Biomolekuler dari Pangkalan Data Publik

Keunggulan pedagogis utama JSmol terletak pada integrasi aslinya (*native integration*) dengan basis data kimia global, seperti *Protein Data Bank* (PDB) dan *PubChem*. Dosen tidak perlu lagi mengunduh fail berukuran besar dan mendistribusikannya melalui disk lepas (*flashdisk*).

Dalam sebuah sesi laboratorium virtual, mahasiswa dapat mengetikkan kode unik empat karakter (misalnya 1CRN untuk protein Crambin) ke dalam antarmuka JSmol. Secara otomatis, perangkat lunak ini akan menarik koordinat dari peladen PDB dan menyusun ulang struktur kristalografi sinar-X protein tersebut di layar. Mahasiswa dapat merender protein ini menggunakan representasi visual standar biokimia, seperti "Pita" (*Ribbons*) atau "Kartun" (*Cartoons*), yang menyederhanakan kerumitan ribuan atom menjadi bentuk heliks alfa (α -helices) dan lembaran beta (β -sheets) yang elegan (Herráez, 2006). Kemampuan untuk mengisolasi tampilan hanya pada ligan spesifik atau residu asam amino di sekitar tapak aktif (*active site*) enzim sangat krusial dalam mempelajari mekanisme pengenalan obat (*drug-receptor recognition*).

7.2.3 Literasi Logika melalui Bahasa Skrip (*Scripting*) Jmol

Meskipun JSmol menyediakan menu klik kanan yang kaya fitur, perangkat lunak ini sejatinya digerakkan oleh bahasa skrip (*scripting language*) yang sangat komprehensif. Mahasiswa dapat membuka jendela *Jmol Console* dan mengetikkan baris perintah untuk memanipulasi molekul dengan presisi matematis.

Sebagai contoh, alih-alih mengklik satu per satu, mahasiswa dapat mengetik perintah:

```
select hydrophobic; color red; select polar; color blue;
```

Perintah singkat ini akan secara instan mewarnai seluruh asam amino hidrofobik menjadi merah dan yang polar menjadi biru, memberikan visualisasi langsung mengenai pelipatan protein (*protein folding*) di mana bagian hidrofobik bersembunyi di inti protein untuk menjauhi molekul air.

Lebih jauh, bahasa skrip Jmol memungkinkan mahasiswa untuk mengukur jarak (*measure*), mendefinisikan bidang kristalografi (Bidang Miller), menggerakkan molekul berdasarkan vektor vibrasi imajiner hasil perhitungan frekuensi, hingga menampakkan elemen simetri grup titik (*point group*). Mengajarkan mahasiswa menggunakan bahasa skrip ini tidak hanya meningkatkan intuisi kimia mereka, tetapi juga membangun fondasi literasi logika pemrograman komputasional, sebuah keterampilan mutlak di era Sains Data.

Secara filosofis, membedah struktur heliks DNA dan lipatan protein raksasa menggunakan kode HTML dan JavaScript di dalam JSmol—sebuah struktur nano yang bekerja dengan efisiensi dan spesifisitas yang mustahil diciptakan oleh kebetulan buta—menuntun akal budi pada pengakuan akan desain agung Sang Pencipta. DNA dan protein di dalam tubuh kita ibarat bahasa skrip biologis yang maha kompleks. Allah SWT telah merancang cetak biru arsitektur manusia dengan bentuk, simetri, dan fungsi yang paling sempurna:

لَقَدْ خَلَقْنَا الْإِنْسَانَ فِي أَحْسَن تَقْوِيمٍ

"*Sesungguhnya Kami telah menciptakan manusia dalam bentuk yang sebaik-baiknya.*" (QS. At-Tin [95]: 4).

Lafaz *ahsani taqwim* (bentuk fisik dan proporsi yang sebaik-baiknya) tidak hanya terlihat dari estetika makroskopis wajah dan tubuh manusia, tetapi juga menembus hingga ke tingkat nanometer. Lipatan asam amino yang membentuk tapak aktif enzim—yang kini divisualisasikan oleh mahasiswa menggunakan representasi kartun JSmol—merupakan manifestasi tersembunyi dari keindahan dan kesempurnaan ciptaan-Nya. JSmol berfungsi sebagai "mikroskop virtual" yang menyingkap keagungan rancang bangun mikroskopis tersebut agar dapat ditadabburi oleh umat manusia di seluruh dunia.

7.3 Integrasi Basis Data Kimia Publik (PubChem dan PDB)

Laboratorium awan (*cloud laboratory*) dan platform visualisasi seperti JSmol tidak akan beroperasi secara maksimal jika berdiri dalam ruang hampa. Keberhasilan komputasi molekuler modern sangat bergantung pada ketersediaan data awal yang akurat. Membangun molekul kompleks—seperti obat antikanker atau enzim protease—atom demi atom secara manual di layar komputer tidak hanya memakan waktu, tetapi juga sangat rentan terhadap galat (kesalahan) topologi dan sterik. Untuk memitigasi hal ini, infrastruktur kimia komputasi mengintegrasikan dirinya secara langsung dengan basis data kimia publik raksasa yang menjadi fondasi bagi paradigma Sains Terbuka (*Open Science*).

7.3.1 PubChem dan Arsitektur Senyawa Berbobot Molekul Rendah

Untuk molekul berukuran kecil hingga sedang (seperti ligan obat, pelarut organik, dan metabolit sekunder), basis data yang menjadi rujukan absolut di tingkat global adalah **PubChem**. Dikelola oleh Pusat Nasional untuk Informasi Bioteknologi Amerika Serikat (NCBI) di bawah naungan *National Institutes of Health* (NIH), PubChem menyimpan ratusan juta struktur senyawa kimia beserta data aktivitas biologis dan termodinamikanya (Kim et al., 2016).

Dalam konteks pedagogi dan riset komputasi, integrasi PubChem membebaskan mahasiswa dari kewajiban menghafal matriks konektivitas. Mahasiswa dapat memanfaatkan format teks linear seperti SMILES (*Simplified Molecular-Input Line-Entry System*) yang secara universal digunakan di PubChem. Misalnya, mahasiswa cukup menyalin *string* SMILES dari molekul Aspirin (CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O) dan menempelkannya ke dalam perangkat lunak pembangun input komputasi (seperti Avogadro atau platform web ChemCompute). Algoritma akan seketika menerjemahkan teks linear tersebut menjadi struktur tiga dimensi penuh. Selain itu, PubChem juga menyediakan file berekstensi *.sdf* (*Structure-Data File*) yang menyimpan koordinat 3D teroptimasi, sehingga dapat langsung digunakan sebagai geometri awal (*initial guess*) untuk perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) di ORCA atau Gaussian, menghemat waktu optimasi yang berharga (Wang et al., 2009).

7.3.2 Protein Data Bank (PDB) sebagai Pustaka Makromolekul Struktural

Jika PubChem mendominasi ranah molekul kecil, maka untuk makromolekul biologis—seperti protein, DNA, dan kompleks molekuler virus—otoritas tertingginya adalah **Protein Data Bank (PDB)**. Didirikan pada tahun 1971, PDB adalah arsip global yang menyimpan data koordinat struktur tiga dimensi dari makromolekul biologis yang dipecahkan (dielusidasi) secara

eksperimental melalui teknik Kristalografi Sinar-X, Spektroskopi Resonansi Magnetik Inti (NMR), dan Mikroskopi Krio-Elektron (*Cryo-EM*) (Berman et al., 2000).

Ekstraksi data dari PDB (dalam format file .pdb) merupakan langkah pertama yang paling fundamental dalam riset Penambatan Molekuler (*Molecular Docking*) dan Dinamika Molekuler (*Molecular Dynamics*). Mahasiswa yang meneliti inhibitor enzim, misalnya, harus mengunduh struktur kristal enzim target dari PDB. Namun, modul komputasi tingkat lanjut akan mengajarkan mahasiswa bahwa file .pdb langsung dari server tidak dapat serta-merta dihitung oleh mesin mekanika kuantum.

File PDB eksperimental sering kali memiliki "kecacatan" bawaan: atom hidrogen biasanya tidak terdeteksi oleh kristalografi sinar-X (sehingga hilang dari struktur), terdapat molekul air kristalografi yang harus dibersihkan, dan terkadang ada residu asam amino yang rantainya tidak lengkap. Oleh karena itu, mahasiswa dilatih menggunakan alat persiapan protein (*protein preparation tools*) untuk memprotonasi residu (menambahkan atom hidrogen sesuai pH fisiologis) dan memperbaiki struktur sebelum simulasi dijalankan (Leach, 2001). Proses ini mendidik mahasiswa agar memiliki sikap kehati-hatian (*prudence*) yang tinggi dalam mengolah data sekunder.

7.3.3 Filosofi Akses Terbuka (*Open Access*) dan Demokratisasi Pengetahuan

Keberadaan basis data raksasa seperti PubChem dan PDB—yang dapat diakses secara gratis oleh mahasiswa dari negara berkembang hingga peneliti di institusi bergengsi—menandai sebuah era keemasan dalam sejarah demokratisasi ilmu pengetahuan. Data koordinat atom yang memakan biaya miliaran rupiah untuk disintesis dan dielusidasi di laboratorium canggih, kini dibagikan secara cuma-cuma sebagai *Open Data* demi kemajuan umat manusia.

Filosofi penyebaran ilmu tanpa batas dan kolaborasi global ini sangat beresonansi dengan nilai-nilai fundamental dalam tradisi keilmuan Islam. Ilmu pengetahuan (*Sains*) tidak dipandang sebagai komoditas yang harus dimonopoli untuk kepentingan pribadi atau kelompok, melainkan sebagai sebuah amanah yang wajib disebarluaskan agar memberikan manfaat (*maslahah*) yang seluas-luasnya. Konsep penyebaran instrumen pengetahuan ini terekam jelas dalam wahyu pertama yang diturunkan kepada Nabi Muhammad SAW:

﴿اقْرَأْ بِاسْمِ رَبِّكَ الَّذِي خَلَقَ ﴿١﴾ خَلَقَ الْإِنْسَانَ مِنْ عَلَقٍ ﴿٢﴾ اقْرَأْ وَرَبُّكَ الْأَكْرَمُ ﴿٣﴾ الَّذِي عَلَّمَ بِالْقَلَمِ ﴿٤﴾ عَلَّمَ الْإِنْسَانَ مَا لَمْ يَعْلَمْ ﴿٥﴾

"Bacalah dengan (menyebut) nama Tuhanmu Yang menciptakan. Dia telah menciptakan manusia dari segumpal darah. Bacalah, dan Tuhanmulah Yang Maha Mulia. Yang mengajar (manusia) dengan pena. Dia mengajarkan manusia apa yang tidak diketahuinya." (QS. Al-'Alaq [96]: 1-5).

Di era digital modern, tafsir kontemporer dari *al-qalam* (pena) telah bertransformasi dari sekadar alat tulis fisik menjadi untaian kode, peladen awan (*cloud server*), dan basis data publik seperti PDB dan PubChem. Basis data ini adalah "pena digital" yang Allah SWT ilhamkan kepada umat manusia untuk mencatat, menyimpan, dan mengajarkan arsitektur molekuler yang sebelumnya "tidak diketahui" (*ma lam ya'lam*). Mengakses, menganalisis, dan membagikan data struktural ini

untuk mencari obat bagi penyakit manusia pada hakikatnya adalah bentuk pengamalan langsung dari ayat suci tersebut dalam ranah sains komputasi.

7.4 Aplikasi Penambatan Molekuler (*Molecular Docking*) Berbasis Web

Setelah mahasiswa mampu mengekstraksi data struktur tiga dimensi dari basis data publik (seperti PubChem untuk ligan dan PDB untuk protein reseptor), tahapan logis berikutnya dalam desain obat berbantuan komputer (*Computer-Aided Drug Design / CADD*) adalah menyimulasikan interaksi antara kedua entitas tersebut. Proses ini dikenal sebagai Penambatan Molekuler (*Molecular Docking*). Secara tradisional, penambatan molekuler mengharuskan penguasaan baris perintah (*command-line interface*) di sistem operasi Linux menggunakan perangkat lunak seperti AutoDock atau AutoDock Vina. Namun, seiring dengan evolusi komputasi awan, saat ini telah bermunculan berbagai peladen web (*web servers*) yang mengeksekusi algoritma penambatan rumit ini secara langsung melalui peramban.

7.4.1 Transisi Algoritma ke Peladen Web (Studi Kasus: SwissDock)

Salah satu pelopor antarmuka web untuk penambatan molekuler yang paling dihormati secara akademis adalah **SwissDock**, yang dikembangkan oleh *Swiss Institute of Bioinformatics* (SIB). Platform ini menyembunyikan arsitektur sistem yang sangat kompleks di balik antarmuka grafis (GUI) berbasis web yang ramah pengguna.

Ketika seorang mahasiswa mengunggah file struktur protein target dan molekul kandidat obat (ligan) ke situs web SwissDock, perintah tersebut tidak diproses oleh komputer jinjing mahasiswa. Data tersebut dikirim ke kluster superkomputer di Swiss yang menjalankan mesin penambatan EADock DSS. Algoritma ini akan menyebarkan ribuan konformasi ligan secara acak ke seluruh permukaan protein (*blind docking*) atau ke area rongga spesifik (*targeted docking*), mengevaluasi interaksi elektrostatik dan Van der Waals pada setiap pose menggunakan *force field* (medan gaya) CHARMM, dan kemudian mengelompokkan (klasterisasi) hasilnya berdasarkan tingkat energi (Grosdidier, Zoete, & Michielin, 2011).

Keberadaan platform berbasis web seperti SwissDock (dan platform lain seperti Webina yang merupakan porting dari AutoDock Vina ke dalam format WebAssembly) meruntuhkan "tembok tinggi" literasi komputasi. Mahasiswa yang tidak memiliki latar belakang pemrograman (*coding*) kini dapat fokus sepenuhnya pada analisis biokimia—seperti mengevaluasi apakah ikatan hidrogen terbentuk antara ligan dengan residu asam amino vital di tapak aktif enzim—daripada harus menghabiskan waktu berhari-hari untuk memecahkan *error* instalasi perangkat lunak (Trott & Olson, 2010).

7.4.2 Penentuan Ruang Pencarian (*Grid Box*) dan Algoritma Pencarian

Dalam praktikum penambatan molekuler, mahasiswa harus menguasai konsep penentuan "Ruang Pencarian" atau *Grid Box*. Jika sebuah protein diasumsikan sebagai sebuah rumah besar, dan ligan adalah kunci, maka mencari di seluruh sudut rumah (*blind docking*) akan memakan waktu

komputasi yang sangat lama dan sering kali menghasilkan tebakan yang salah (seperti kunci yang menempel di dinding, bukan di lubang pintu).

Oleh karena itu, mahasiswa diajarkan untuk menentukan *Grid Box* (sebuah kubus tiga dimensi imajiner berukuran koordinat X, Y, Z tertentu) yang difokuskan secara presisi hanya pada "lubang kunci", yaitu tapak aktif (*active site*) atau tapak alosterik dari protein. Di dalam kotak batas inilah algoritma pencarian (seperti *Lamarckian Genetic Algorithm* yang sangat populer di ekosistem AutoDock) akan bekerja secara iteratif. Algoritma genetik ini secara matematis meniru proses evolusi biologi: "pose" (posisi dan rotasi) ligan yang memiliki energi buruk akan dibuang, sedangkan pose yang memiliki energi interaksi baik akan dipertahankan, "dikawinsilangkan" (mutasi konformasi), dan diwariskan ke generasi iterasi berikutnya hingga mencapai pose pengikatan yang paling optimal (Morris et al., 2009).

7.4.3 Fungsi Penilaian (*Scoring Function*) dan Afinitas Termodinamika

Hasil akhir dari sebuah simulasi *molecular docking* bukanlah sekadar gambar tiga dimensi yang estetik, melainkan data termodinamika kuantitatif yang dihasilkan oleh Fungsi Penilaian (*Scoring Function*). Fungsi ini adalah persamaan matematika empiris yang secara cepat memperkirakan nilai Energi Bebas Gibbs Pengikatan (ΔG_{bind}), biasanya dinyatakan dalam satuan kilokalori per mol (kcal/mol).

Mahasiswa diajarkan untuk membaca tabel keluaran (*output*) dari server web. Sebuah nilai ΔG_{bind} yang semakin negatif (misalnya -9,5 kcal/mol) menunjukkan tingkat afinitas pengikatan yang sangat kuat; reaksi bersifat spontan, dan ligan mengunci protein dengan sangat erat. Sebaliknya, nilai yang positif atau mendekati nol mengindikasikan bahwa molekul obat tersebut akan tertolak oleh reseptor target. Dari nilai energi bebas ini, mahasiswa dapat lebih jauh menghitung Konstanta Inhibisi (K_i), sebuah parameter farmakologi di dunia nyata yang menentukan seberapa besar konsentrasi obat yang dibutuhkan untuk menghambat separuh dari aktivitas enzim.

Secara filosofis, mekanisme "kunci dan anak kunci" (*Lock and Key*) atau kesesuaian induksi (*Induced Fit*) antara sebuah molekul ligan (obat) dengan rongga protein (reseptor) menyajikan salah satu bukti paling empiris tentang prinsip kesesuaian dan keberpasangan di alam semesta. Bentuk geometris ligan dan protein yang saling melengkapi (komplementer) baik secara bentuk tiga dimensi maupun muatan elektrostatisnya, merupakan manifestasi dari hukum penciptaan yang berpasang-pasangan. Allah SWT berfirman:

وَمِنْ كُلِّ شَيْءٍ خَلَقْنَا زَوْجَيْنِ لَعَلَّكُمْ تَذَكَّرُونَ

"Dan segala sesuatu Kami ciptakan berpasang-pasangan supaya kamu mengingat kebesaran Allah." (QS. Az-Zariyat [51]: 49).

Konsep "berpasang-pasangan" (*zawjain*) dalam ayat ini tidak hanya terbatas pada skala makroskopis (seperti laki-laki dan perempuan, siang dan malam), tetapi juga berlaku mutlak di ranah submikroskopis. Asam amino penyusun tapak aktif enzim adalah pasangan kodrati bagi ligan spesifiknya. Proses *molecular docking* melalui platform web pada hakikatnya adalah ikhtiar

saintifik manusia untuk "mencocokkan" pasangan-pasangan biokimia yang tak kasatmata tersebut. Ketika mahasiswa menemukan ligan dengan afinitas (energi) negatif yang sangat kuat, mereka sejatinya sedang menyaksikan bagaimana hukum *sunnatullah* berkerja mengikat sepasang molekul dengan tingkat kesesuaian struktural yang maha presisi, sebuah proses yang seharusnya mengantarkan mereka pada kesadaran (*tadzakkur*) akan kebesaran Sang Perancang Agung.

7.5 Sinergi Masa Depan: Pembelajaran Mesin (AI) di Awan

Evolusi kimia komputasi tidak berhenti pada pemindahan mesin perhitungan dari komputer lokal ke peladen awan (*cloud server*). Revolusi terbesar yang sedang mendisrupsi laboratorium maya saat ini adalah konvergensi antara komputasi awan dan Kecerdasan Buatan (*Artificial Intelligence / AI*), khususnya Pembelajaran Mesin (*Machine Learning*). Jika metode mekanika kuantum tradisional (seperti Hartree-Fock atau DFT) menggunakan persamaan fisika untuk memecahkan masalah langkah demi langkah, pembelajaran mesin menggunakan pendekatan probabilistik yang dilatih menggunakan jutaan data struktur molekul yang telah dihitung sebelumnya.

7.5.1 Jaringan Saraf Tiruan untuk Prediksi Termodinamika

Salah satu hambatan utama dalam penemuan obat adalah waktu komputasi. Melakukan perhitungan energi menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) pada molekul berukuran sedang dapat memakan waktu berjam-jam hingga berhari-hari. Melalui integrasi AI di komputasi awan, para ilmuwan mengembangkan algoritma Jaringan Saraf Tiruan (*Artificial Neural Networks / ANN*) yang mampu memprediksi energi potensial molekul dengan akurasi setingkat DFT, tetapi dengan kecepatan jutaan kali lebih cepat.

Sebagai contoh, model potensial ANI-1 (sebuah jaringan saraf tiruan yang dilatih pada 22 juta konformasi molekul menggunakan superkomputer awan) dapat mengevaluasi entalpi, gaya antar-atom, dan momen dipol dalam hitungan milidetik (Smith, Isayev, & Roitberg, 2017). Dalam modul praktikum masa depan, mahasiswa tidak lagi hanya memerintahkan Gaussian atau ORCA untuk menghitung energi dari awal (*ab initio*); mereka akan memanggil *Application Programming Interface* (API) dari model AI yang diinangi (*hosted*) di awan untuk menyaring jutaan kandidat senyawa (penapisan virtual / *virtual screening*) dalam satu sesi kelas. Pergeseran ini mengubah paradigma riset dari "kalkulasi murni" menjadi "pengenalan pola" (*pattern recognition*).

7.5.2 Desain Obat Generatif dan Revolusi AlphaFold

Di samping memprediksi energi, AI komputasi awan telah memasuki ranah generatif. Mahasiswa secara tradisional mencari struktur obat di dalam basis data (seperti PubChem) yang berisi molekul yang sudah ada atau sudah pernah disintesis. Namun, model AI generatif—seperti *Variational Autoencoders* (VAE) dan *Generative Adversarial Networks* (GAN)—mampu "berimajinasi" dan mendesain struktur kimia baru yang belum pernah eksis di alam semesta, namun diprediksi memiliki afinitas tinggi terhadap reseptor penyakit tertentu (Popova, Isayev, & Tropsha, 2018).

Puncak pencapaian AI di awan yang paling monumental dalam biologi struktural adalah rilisnya **AlphaFold2** oleh DeepMind. Selama lebih dari 50 tahun, memprediksi struktur tiga dimensi protein dari rantai asam amino murni (*protein folding problem*) adalah salah satu tantangan tersulit dalam sains, yang sering kali menemui jalan buntu meskipun menggunakan superkomputer. Pada tahun 2021, algoritma pembelajaran mendalam (*deep learning*) AlphaFold berhasil memecahkan masalah ini dengan tingkat akurasi yang setara dengan eksperimen kristalografi sinar-X laboratorium basah (Jumper et al., 2021). Kini, basis data struktur protein tidak hanya bergantung pada eksperimen manual, tetapi telah diperluas secara eksponensial oleh prediksi AI yang dapat diakses secara instan melalui peramban web mahasiswa.

7.5.3 Ruang Kimia Kosong dan Keterbatasan Ilmu Pengetahuan Manusia

Meskipun AI dan superkomputer awan tampak maha kuasa, mahasiswa harus diedukasi mengenai realitas skala kosmik dari kimia. Para ahli farmakokimia mengestimasi bahwa ukuran "Ruang Kimia" (*Chemical Space*)—yaitu jumlah semua kemungkinan molekul organik kecil yang memenuhi syarat sebagai obat (di bawah 500 Dalton)—berada pada kisaran 10^{60} molekul (Gómez-Bombarelli et al., 2016). Jumlah ini melebihi perkiraan jumlah seluruh atom yang ada di tata surya.

Ratusan juta senyawa yang ada di PubChem saat ini, bahkan yang ditambah dengan hasil "imajinasi" algoritma desain obat generatif paling mutakhir, tidak lebih dari setetes air dibandingkan dengan samudra probabilitas molekul yang belum ditemukan. Hamparan ruang kimia yang luas dan belum terpetakan ini merupakan realitas yang sangat tak terhingga, yang hanya bisa dijangkau oleh Ilmu Sang Pencipta. Hal ini membawa kita pada refleksi filosofis yang mendalam terhadap firman Allah SWT:

وَعِنْدَهُ مَفَاتِيحُ الْغَيْبِ لَا يَعْلَمُهَا إِلَّا هُوَ ۚ وَيَعْلَمُ مَا فِي الْبَرِّ وَالْبَحْرِ ۚ وَمَا تَسْقُطُ مِنْ وَرَقَةٍ إِلَّا يَعْلَمُهَا وَلَا حَبَّةٍ فِي ظِلْمَاتِ الْأَرْضِ وَلَا رَطْبٍ وَلَا يَابِسٍ إِلَّا فِي كِتَابٍ مُبِينٍ

"Dan pada sisi Allah-lah kunci-kunci semua yang ghaib; tidak ada yang mengetahuinya kecuali Dia sendiri, dan Dia mengetahui apa yang di daratan dan di lautan, dan tiada sehelai daun pun yang gugur melainkan Dia mengetahuinya (pula), dan tidak jatuh sebutir biji pun dalam kegelapan bumi, dan tidak sesuatu yang basah atau yang kering, melainkan tertulis dalam kitab yang nyata (Lauh Mahfuzh)." (QS. Al-An'am [6]: 59).

Seluruh molekul hipotetis di dalam ruang kimia yang bernilai 10^{60} tersebut pada dasarnya adalah hal yang "ghaib" (belum mawujud dan belum diketahui manusia). Kecerdasan buatan, algoritma heuristik, dan komputasi awan hanyalah instrumen akal manusia untuk mencoba menemukan "biji dalam kegelapan bumi" atau mencari molekul penyembuh di lautan kemungkinan tersebut. Kesadaran epistemologis ini harus ditanamkan dalam pendidikan kimia komputasi agar para ilmuwan masa depan menyadari bahwa algoritma terancang sekalipun hanyalah ikhtiar kecil untuk meraba catatan takdir (kitab yang nyata) yang telah digariskan oleh Sang Maha Mengetahui atas seluruh tatanan materi di alam semesta.

DAFTAR PUSTAKA BAB 7

Balu, A., Nayak, A., Sharma, R., & Vohra, A. (2015). Cloud computing for computational chemistry: A review. *Journal of Cloud Computing: Advances, Systems and Applications*, 4(1), 1-14.

Berman, H. M., Westbrook, J., Feng, Z., Gilliland, G., Bhat, T. N., Weissig, H., Shindyalov, I. N., & Bourne, P. E. (2000). The Protein Data Bank. *Nucleic Acids Research*, 28(1), 235-242.

Gómez-Bombarelli, R., Wei, J. N., Duvenaud, D., Hernández-Lobato, J. M., Sánchez-Lengeling, B., Sheberla, D., ... & Aspuru-Guzik, A. (2016). Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules. *ACS Central Science*, 4(2), 268-276.

Grosdidier, A., Zoete, V., & Michielin, O. (2011). SwissDock, a protein-small molecule docking web service based on EADock DSS. *Nucleic Acids Research*, 39(Web Server issue), W270-W277.

Hanson, R. M. (2010). Jmol—a paradigm shift in crystallographic visualization. *Journal of Applied Crystallography*, 43(5), 1250-1260.

Hanson, R. M., Prilusky, J., Renjian, Z., Nakane, T., & Sussman, J. L. (2013). JSmol and the Next-Generation Web-Based Representation of 3D Molecular Structure as Applied to Proteopedia. *Israel Journal of Chemistry*, 53(3-4), 207-216.

Herráez, A. (2006). Biomolecules in the computer: Jmol to the rescue. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, 34(4), 255-261.

Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A., Green, T., Figurnov, M., Ronneberger, O., ... & Hassabis, D. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596(7873), 583-589.

Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., ... & Bryant, S. H. (2016). PubChem substance and compound databases. *Nucleic Acids Research*, 44(D1), D1202-D1213.

Leach, A. R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications* (2nd ed.). Pearson Education.

Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S., & Olson, A. J. (2009). AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. *Journal of Computational Chemistry*, 30(16), 2785-2791.

Perri, M. J., & Weber, S. H. (2014). Web-based job submission interface for the GAMESS computational chemistry program. *Journal of Chemical Education*, 91(12), 2206-2208.

Popova, M., Isayev, O., & Tropsha, A. (2018). Deep reinforcement learning for de novo drug design. *Science Advances*, 4(7), eaap7885.

Smith, J. S., Isayev, O., & Roitberg, A. E. (2017). ANI-1: an extensible neural network potential with DFT accuracy at force field computational cost. *Chemical Science*, 8(4), 3192-3203.

Trott, O., & Olson, A. J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, 31(2), 455-461.

Wang, Y., Xiao, J., Suzek, T. O., Zhang, J., Wang, J., & Bryant, S. H. (2009). PubChem: a public information system for analyzing bioactivities of small molecules. *Nucleic Acids Research*, 37(Web Server issue), W623-W633.

BAB 8: OTOMATISASI DAN PEMROGRAMAN PYTHON DALAM KIMIA KOMPUTASI

8.1 Ekosistem Python sebagai Penggerak Otomatisasi (*Automation Engine*)

Evolusi kimia komputasi pada abad ke-21 tidak lagi hanya berfokus pada seberapa akurat metode mekanika kuantum yang digunakan, tetapi juga pada seberapa efisien jutaan kalkulasi tersebut dapat dikelola. Melakukan pemodelan untuk satu atau dua molekul secara manual menggunakan antarmuka grafis (seperti GaussView atau Avogadro) sangatlah relevan untuk tujuan pedagogis. Namun, ketika seorang peneliti atau mahasiswa tingkat lanjut dihadapkan pada proyek Penapisan Virtual (*High-Throughput Virtual Screening* / HTVS) yang melibatkan ribuan kandidat obat atau turunan polimer, pendekatan manual satu per satu (*point-and-click*) menjadi sangat tidak rasional, rentan terhadap galat (kesalahan) manusia, dan menghabiskan waktu secara sia-sia. Di sinilah bahasa pemrograman Python hadir sebagai standar emas (*lingua franca*) untuk otomatisasi sains komputasi.

8.1.1 Arsitektur Otomatisasi Alur Kerja (*Workflow Pipeline*)

Python, dengan sintaksisnya yang intuitif dan tingkat keterbacaan yang tinggi, memungkinkan mahasiswa kimia untuk berubah peran dari sekadar "operator perangkat lunak" menjadi "arsitek sistem". Melalui skrip Python sederhana, seluruh alur kerja (*workflow*) kimia komputasi dapat diotomatisasi.

Sebuah alur kerja komputasi tingkat tinggi biasanya mencakup tiga fase yang dapat dieksekusi oleh Python secara mandiri:

1. **Prapemrosesan (*Pre-processing*):** Skrip Python dapat membaca basis data struktur senyawa (misalnya dari format CSV yang berisi kodifikasi SMILES), lalu secara iteratif membangun struktur tiga dimensi dan menghasilkan ribuan *file input* (.gjf untuk Gaussian atau .inp untuk ORCA) dengan instruksi fungsional kerapatan (DFT) yang seragam.
2. **Eksekusi (*Execution*):** Menggunakan modul sistem bawaan (os atau subprocess), Python dapat secara otomatis mengirimkan (*submit*) antrian perhitungan tersebut ke peladen superkomputer (HPC) tanpa campur tangan manusia.
3. **Pascapemrosesan (*Post-processing*):** Ini adalah fase paling krusial. Alih-alih membuka ribuan *file output* berakhiran .out atau .log secara manual untuk mencari nilai Entalpi atau Energi Bebas Gibbs, skrip Python ditugaskan untuk melakukan *parsing* (ekstraksi teks cerdas) dan merangkum seluruh data termodinamika tersebut ke dalam satu lembar kerja *Excel* atau *DataFrame* secara instan.

8.1.2 Pustaka (*Libraries*) Fundamental: **cclib** dan **RDKit**

Kekuatan absolut Python tidak terletak pada bahasa dasarnya semata, melainkan pada ekosistem pustaka (*libraries*) sumber terbuka yang dikembangkan oleh komunitas kimiawan dunia. Dua pustaka yang paling esensial dalam laboratorium komputasi modern adalah **cclib** dan **RDKit**.

- **cclib**: Pustaka ini dikembangkan secara khusus untuk mengurai (*parsing*) dan mengekstraksi data dari *file output* berbagai mesin komputasi kuantum (Gaussian, ORCA, GAMESS, NWChem, dll.). Secara historis, setiap program komputasi mencetak nilai energi atau muatan atom dengan format teks yang berbeda-beda. **cclib** menstandarisasi semua keluaran tersebut. Hanya dengan tiga baris kode Python, mahasiswa dapat mengekstrak koordinat molekul teroptimasi, frekuensi vibrasi harmonis, hingga matriks orbital molekul tanpa harus berhadapan dengan kerumitan teks log yang panjang (O'Boyle, Tenderholt, & Langner, 2008).
- **RDKit**: Dikenal sebagai pisau Swiss Army untuk kemoinformatika (*cheminformatics*), RDKit mendominasi ranah manipulasi topologi molekul. Pustaka ini memungkinkan skrip Python untuk menghitung sifat fisikokimia makroskopis (seperti berat molekul, koefisien partisi LogP, dan jumlah donor/akseptor ikatan hidrogen untuk memvalidasi Aturan Lipinski lima) murni dari rangkaian teks SMILES. RDKit juga sangat tangguh dalam menghasilkan konformer tiga dimensi awal sebelum dikirim ke mesin Gaussian (Landrum, 2013).

8.1.3 Kesadaran Algoritmik dan Keteraturan Sunnatullah

Memasukkan kurikulum pemrograman Python ke dalam pendidikan kimia komputasi mengajarkan mahasiswa tentang konsep "Pemikiran Algoritmik" (*Algorithmic Thinking*)—yaitu kemampuan memecahkan masalah besar dan kompleks menjadi serangkaian langkah logis, berurutan, dan terukur yang dapat dieksekusi oleh mesin.

Sikap mental yang menghargai keteraturan logika, efisiensi langkah, dan kepresisian ini sejatinya merupakan manifestasi dari apresiasi manusia terhadap arsitektur alam semesta. Allah SWT tidak menciptakan alam semesta ini secara acak, melainkan melalui sebuah "algoritma" kosmik atau ukuran (*kadar*) yang maha presisi. Hal ini secara tegas dinyatakan dalam Al-Qur'an:

إِنَّا كُلَّ شَيْءٍ خَلَقْنَاهُ بِقَدَرٍ

"*Sesungguhnya Kami menciptakan segala sesuatu menurut ukuran (takdir/ketentuan yang pasti).*" (QS. Al-Qamar [54]: 49).

Kata *biqadar* (dengan ukuran/ketetapan) dalam konteks sains modern dapat diartikan sebagai sistem hukum yang deterministik dan terprogram dengan sempurna. Pemrograman Python di laboratorium kimia pada dasarnya adalah upaya manusia untuk meniru skala kecil dari keteraturan tersebut. Skrip otomatisasi yang dibuat oleh mahasiswa—di mana *loop* (perulangan) dieksekusi ribuan kali tanpa kesalahan, dan kondisi bersyarat (*if-else*) memisahkan data reaksi eksotermis dari endotermis secara akurat—merupakan refleksi intelektual yang menumbuhkan kesadaran bahwa

kebenaran ilmu (sains) selalu bertumpu pada hukum (kadar) yang sistematis, terukur, dan tidak pernah menyalahi ketetapan penciptanya.

8.2 Analisis Data Spektroskopi dan Termodinamika dengan Python

Setelah skrip otomatisasi berhasil mengeksekusi perhitungan molekuler di peladen superkomputer (sebagaimana dibahas pada sub-bab sebelumnya), tantangan terbesar berikutnya bagi seorang ahli kimia komputasi adalah menghadapi ledakan data (*data explosion*). *File output* dari perangkat lunak seperti Gaussian atau ORCA berisi jutaan baris matriks angka yang sulit dicerna oleh mata manusia. Di sinilah Python bertransformasi dari sekadar alat otomatisasi menjadi instrumen analitik dan visualisasi tingkat tinggi yang menjembatani data mentah kuantum dengan pemahaman kimia makroskopis.

8.2.1 Ekstraksi dan Visualisasi Spektrum (UV-Vis dan IR)

Keluaran asli (*raw output*) dari prediksi spektroskopi perangkat lunak kuantum—seperti frekuensi vibrasi Inframerah (IR) atau transisi elektronik UV-Vis—hanyalah berupa daftar panjang gelombang dan intensitas osilatornya. Jika diplot secara langsung, data ini hanya akan menghasilkan grafik berupa garis-garis lurus tajam (*stick spectra*), yang sama sekali tidak menyerupai puncak-puncak lebar dan melengkung yang dihasilkan oleh spektrofotometer di laboratorium nyata.

Untuk mereplikasi kondisi eksperimental, mahasiswa menggunakan Python melalui kolaborasi dua pustaka esensial: **Matplotlib** (untuk penggambaran grafik dua dimensi) dan **SciPy** (untuk komputasi saintifik). Melalui skrip Python, mahasiswa mengimpor data *stick spectra*, lalu menerapkan Fungsi Pelebaran Garis (*Line Broadening Functions*), seperti fungsi distribusi Gaussian atau Lorentzian. Fungsi matematika ini menyimulasikan efek pelebaran spektrum yang terjadi di alam nyata akibat efek Doppler dan tumbukan antarmolekul di dalam pelarut cair (Hunter, 2007).

Dengan mengotomatisasi proses ini, mahasiswa dapat merender ratusan spektrum UV-Vis dari berbagai turunan molekul (misalnya pada riset pewarna sel surya) dalam hitungan detik, menumpuknya (*overlay*) dalam satu grafik, dan membandingkannya secara langsung dengan data empiris untuk mencari korelasi struktur-sifat (*Structure-Property Relationship*).

8.2.2 Pemrosesan Massal Termodinamika Molekuler (Pandas DataFrames)

Dalam riset penemuan obat atau katalisis, peneliti sering kali harus membandingkan stabilitas termodinamika dari ratusan konformasi atau jalur reaksi. Menghitung Entalpi Reaksi (ΔH_{rxn}) dan Energi Bebas Gibbs (ΔG_{rxn}) secara manual menggunakan kalkulator untuk setiap varian adalah hal yang usang.

Pustaka **Pandas** di Python memberikan solusi absolut untuk masalah ini. Pandas memungkinkan mahasiswa untuk memuat seluruh hasil ekstraksi data komputasi (menggunakan `cclib`) ke dalam struktur data dua dimensi yang disebut *DataFrame* (mirip dengan tabel *Excel* namun dengan

kapasitas analitik yang jauh lebih superior) (McKinney, 2010). Di dalam struktur *DataFrame* ini, mahasiswa dapat menuliskan operasi vektor matematika satu baris untuk menerapkan Hukum Hess pada seluruh basis data:

$$\Delta G_{\text{rxn}} = \sum G_{\text{produk}} - \sum G_{\text{reaktan}}$$

Lebih jauh, dengan menggunakan pustaka tambahan seperti *NumPy*, mahasiswa dapat secara otomatis mengonversi nilai ΔG tersebut menjadi parameter makroskopis yang sangat berguna di dunia farmasi, seperti Konstanta Kesetimbangan (K_{eq}), menggunakan persamaan eksponensial Boltzmann. Otomatisasi termodinamika ini mempercepat laju penemuan dari hitungan bulan menjadi hitungan jam.

8.2.3 Jupyter Notebook sebagai Jurnal Laboratorium Interaktif

Perkembangan paling revolusioner dalam pedagogi sains data dan kimia komputasi adalah penggunaan **Jupyter Notebook**. Di masa lalu, mahasiswa memisahkan kode pemrograman mereka (di *teks editor*), hasil gambar grafik (di *viewer* gambar), dan catatan narasi eksperimen mereka (di *Microsoft Word*).

Jupyter Notebook menyatukan ketiganya dalam satu dokumen interaktif yang berjalan di peramban web (Kluyver et al., 2016). Dalam satu halaman interaktif, mahasiswa dapat:

1. Menulis teori mekanisme reaksi menggunakan teks berformat *Markdown*.
2. Menyisipkan rumus persamaan termodinamika.
3. Menulis dan mengeksekusi sel kode Python untuk membaca *file output* Gaussian.
4. Menampilkan grafik spektrum IR tiga dimensi yang dapat diputar secara langsung di bawah sel kode tersebut.

Format ini menjadi standar global untuk **Penelitian yang Dapat Direproduksi** (*Reproducible Research*). Ketika sebuah jurnal internasional menuntut transparansi, peneliti dapat membagikan *file* Jupyter Notebook mereka. Peneliti lain di belahan dunia mana pun dapat mengklik "Run All", dan melihat langkah demi langkah bagaimana data fungsi gelombang kuantum diolah hingga menjadi kesimpulan grafik entalpi, memastikan tidak ada manipulasi data dalam sains.

Secara filosofis, kemampuan Python untuk membaca miliaran angka acak dari matriks fungsi gelombang dan memvisualisasikannya menjadi pola spektrum yang indah dan bermakna adalah sebetulnya latihan *Tafakkur* (perenungan). Alam semesta pada tingkat subatomik tampak sangat acak dan tidak teratur (*chaotic*), namun melalui ilmu dan alat bantu analitik, manusia dapat menemukan tatanan hukum yang maha rapi di baliknya. Allah SWT menyifati orang-orang yang berilmu (Ulul Albab) sebagai mereka yang senantiasa meneliti dan merenungkan keteraturan ciptaan-Nya:

الَّذِينَ يَذْكُرُونَ اللَّهَ قِيَامًا وَقُعُودًا وَعَلَىٰ جُنُوبِهِمْ وَيَتَفَكَّرُونَ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ رَبَّنَا مَا خَلَقْتَ هَذَا بَطِيلًا سُبْحَانَكَ قَبِيْنَا
عَذَابِ النَّارِ

"(yaitu) orang-orang yang mengingat Allah sambil berdiri atau duduk atau dalam keadan berbaring dan mereka memikirkan (tafakkur) tentang penciptaan langit dan bumi (seraya berkata): 'Ya Tuhan kami, tiadalah Engkau menciptakan ini dengan sia-sia, Maha Suci Engkau, maka peliharalah kami dari siksa neraka'." (QS. Ali 'Imran [3]: 191).

Analisis data dalam kimia komputasi pada hakikatnya adalah proses *tafakkur* kuantitatif. Mengurai sekumpulan angka *output* komputasi hingga menemukan pola interaksi obat atau mekanisme reaksi kimia adalah bukti empiris bahwa materi sekecil elektron pun tidak diciptakan secara sia-sia (*bathila*), melainkan terikat oleh hukum termodinamika yang sangat presisi dan penuh tujuan.

8.3 Pembelajaran Mesin dan Kecerdasan Buatan untuk Kimia Prediktif

Integrasi Python dalam kimia komputasi mencapai puncaknya melalui penerapan Pembelajaran Mesin (*Machine Learning* / ML) dan Kecerdasan Buatan (*Artificial Intelligence* / AI). Jika simulasi mekanika kuantum (seperti DFT) bersifat deterministik dan mengandalkan penyelesaian persamaan fisika fundamental, pendekatan ML bersifat probabilistik dan digerakkan oleh data (*data-driven*). Python merupakan bahasa pemrograman yang memonopoli ekosistem kecerdasan buatan global, sehingga penguasaan Python memberikan kunci bagi mahasiswa untuk memprediksi sifat kimia, toksisitas, hingga aktivitas biologis suatu molekul dalam hitungan detik tanpa harus melakukan perhitungan kuantum yang memakan waktu berhari-hari.

8.3.1 Representasi Molekuler: Transformasi Struktur menjadi Vektor Angka

Tantangan fundamental pertama dalam mengajarkan ML di kelas kimia adalah kenyataan bahwa algoritma komputer tidak memiliki mata untuk "melihat" struktur molekul heksagonal dari cincin benzena. Algoritma ML, seperti regresi linear atau jaringan saraf tiruan, hanya dapat memproses matriks angka. Oleh karena itu, tugas pertama skrip Python adalah mengonversi struktur molekul menjadi representasi matematis yang disebut **Deskriptor** atau **Sidik Jari Molekuler** (*Molecular Fingerprints*).

Di sinilah pustaka *RDKit* di dalam Python memainkan peran krusial. Mahasiswa diajarkan untuk mengubah untaian teks SMILES menjadi *Extended-Connectivity Fingerprints* (ECFP), atau yang lebih dikenal sebagai *Morgan Fingerprints* (Rogers & Hahn, 2010). Algoritma *RDKit* akan memindai topologi molekul dengan radius tertentu, mendata setiap fragmen (seperti gugus hidroksil, cincin aromatik, atau ikatan amida), lalu mengubahnya menjadi sebuah vektor biner (deretan angka 0 dan 1) dengan panjang tetap, misalnya 2048 bit.

Angka 1 berarti fragmen tertentu hadir dalam molekul, dan 0 berarti tidak ada. Vektor biner sepanjang 2048 angka inilah yang kemudian dipahami oleh mesin sebagai "identitas" utuh dari sebuah molekul. Pengenalan konsep transformasi ini memperluas paradigma mahasiswa: bahwa sifat materi dapat direduksi dan direkonstruksi menjadi barisan bit informasi murni.

8.3.2 Pemodelan QSAR Tradisional dengan Pustaka *Scikit-Learn*

Setelah molekul berhasil diubah menjadi vektor angka, langkah selanjutnya adalah melatih algoritma untuk mengenali pola antara struktur tersebut dengan sifat yang ingin diprediksi.

Pendekatan ini dikenal dalam industri farmasi sebagai Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (*Quantitative Structure-Activity Relationship* / QSAR).

Dalam laboratorium virtual, mahasiswa menggunakan pustaka Python yang sangat tangguh bernama **Scikit-Learn** (Pedregosa et al., 2011). Dosen dapat memberikan kumpulan data (*dataset*) berisi 1.000 molekul yang telah diketahui nilai aktivitas inhibisinya terhadap enzim tertentu (misalnya IC_{50}) dari data eksperimen masa lalu). Mahasiswa kemudian menulis skrip Python untuk membagi data tersebut menjadi "Data Latih" (*Training Set*) dan "Data Uji" (*Test Set*).

Melalui Scikit-Learn, mahasiswa memanggil algoritma pembelajaran mesin populer seperti *Random Forest* (Hutan Acak) atau *Support Vector Machines* (SVM). Mesin akan "belajar" mencari korelasi matematis yang tersembunyi: misalnya, mesin menemukan bahwa setiap kali bit angka ke-450 (yang merepresentasikan gugus fluorin) bernilai 1, maka aktivitas obat meningkat secara drastis. Setelah model ini terlatih, mahasiswa dapat memberikannya struktur molekul baru yang belum pernah disintesis di alam semesta, dan mesin akan memprediksi efektivitas obat tersebut dalam hitungan milidetik.

8.3.3 Pembelajaran Mendalam (*Deep Learning*) dan Jaringan Graf

Keterbatasan QSAR tradisional dengan sidik jari ECFP adalah hilangnya informasi spasial (tiga dimensi) dari molekul. Untuk memecahkan kebuntuan ini, riset kimia komputasi modern mengadopsi Pembelajaran Mendalam (*Deep Learning*) menggunakan pustaka ekosistem Python yang lebih canggih, seperti **TensorFlow** atau **PyTorch**.

Inovasi termutakhir yang diajarkan pada tingkat pascasarjana adalah penggunaan Jaringan Saraf Graf (*Graph Neural Networks* / GNN) (Wu et al., 2018). Dalam pendekatan ini, molekul tidak lagi dipotong-potong menjadi deretan biner. Molekul diperlakukan persis seperti jaringan sosial: atom adalah "titik" (*nodes*) dan ikatan kimia adalah "garis penghubung" (*edges*). GNN memungkinkan komputer untuk mempelajari fitur molekul secara holistik dan mengekstraksi deskriptornya sendiri secara dinamis. Integrasi GNN menggunakan pustaka *PyTorch Geometric* telah terbukti mampu memprediksi energi keadaan dasar, momen dipol, hingga toksisitas molekul dengan akurasi yang mendekati metode mekanika kuantum tingkat tinggi.

8.3.4 Refleksi Filosofis: "Nama-Nama" (Sifat) di Balik Struktur Materi

Kemampuan skrip Python dan algoritma kecerdasan buatan untuk mengekstraksi deskriptor (sifat/fitur) yang tersembunyi dari sebuah struktur molekul memberikan resonansi filosofis yang sangat kuat terhadap kisah penciptaan manusia pertama, Nabi Adam AS. Keunggulan manusia dibandingkan malaikat tidak terletak pada kekuatan fisiknya, melainkan pada kemampuan kognitifnya untuk mengenali, mengkategorikan, dan memahami "sifat" atau "nama-nama" dari seluruh entitas di alam semesta. Hal ini diabadikan dalam firman Allah SWT:

وَعَلَّمَ آدَمَ الْأَسْمَاءَ كُلَّهَا ثُمَّ عَرَضَهُمْ عَلَى الْمَلَائِكَةِ فَقَالَ أَنْبِئُونِي بِأَسْمَاءِ هَؤُلَاءِ إِنْ كُنْتُمْ صَادِقِينَ

"Dan Dia mengajarkan kepada Adam nama-nama (benda-benda) seluruhnya, kemudian mengemukakannya kepada para Malaikat lalu berfirman: 'Sebutkanlah kepada-Ku nama benda-benda itu jika kamu memang benar orang-orang yang benar!'" (QS. Al-Baqarah [2]: 31).

Para ahli tafsir modern menjelaskan bahwa *al-asma'* (nama-nama) bukan sekadar label kosakata, melainkan meliputi karakteristik, sifat fisika, fungsi, dan potensi dari materi tersebut. Di era digital ini, para ilmuwan yang merancang algoritma Pembelajaran Mesin pada dasarnya sedang meneladani kodrat "pengajaran" tersebut. Mereka mengajarkan kepada komputer (*machine teaching*) untuk mengidentifikasi "nama-nama" atau sifat intrinsik (deskriptor kimia) dari suatu molekul, agar mesin dapat memprediksi mana yang berfungsi sebagai obat penyembuh dan mana yang merupakan racun. Proses pemodelan prediktif ini merupakan manifestasi dari ikhtiar manusia untuk menggunakan karunia akal dalam memetakan rahasia sunnatullah yang tersembunyi di dalam struktur materi.

8.4 Membangun Antarmuka Grafis (GUI) Mandiri dengan Python

Menguasai penulisan skrip Python (*scripting*) untuk mengotomatisasi perhitungan komputasi adalah sebuah pencapaian teknis yang luar biasa. Namun, skrip yang dijalankan melalui baris perintah (*command line*) atau Jupyter Notebook sering kali tidak ramah bagi pengguna awam atau peneliti biologi molekuler yang tidak memiliki latar belakang pemrograman. Untuk menjembatani kesenjangan ini, seorang ahli kimia komputasi dituntut tidak hanya menjadi seorang analis data, tetapi juga pengembang perangkat lunak (*software developer*). Melalui Python, mahasiswa dapat merancang dan membangun Antarmuka Pengguna Grafis (*Graphical User Interface / GUI*) mereka sendiri, menciptakan perangkat lunak kimia komputasi yang disesuaikan secara spesifik dengan kebutuhan riset laboratorium mereka.

8.4.1 Kerangka Kerja GUI: Dari Tkinter hingga PyQt

Dalam ekosistem Python, terdapat beberapa pustaka (*libraries*) utama yang digunakan untuk merancang jendela antarmuka, tombol, dan menu tarik-turun (*dropdown*).

Untuk aplikasi sederhana dan purwarupa (*prototyping*) cepat, mahasiswa diperkenalkan dengan pustaka bawaan Python, yaitu **Tkinter**. Meskipun tampilannya cenderung klasik dan kaku, Tkinter sangat memadai untuk membangun alat utilitas sederhana, misalnya kalkulator termodinamika instan yang mengubah nilai Entalpi dari satuan *Hartree* ke *kcal/mol* dengan satu klik tombol.

Namun, untuk mengembangkan perangkat lunak analisis berskala profesional—seperti antarmuka khusus untuk mengekstraksi parameter fungsi gelombang dari *output* Gaussian—mahasiswa akan diarahkan untuk menguasai **PyQt** atau **PySide** (binding Python untuk kerangka kerja C++ Qt). Pustaka ini menyediakan arsitektur berorientasi objek yang sangat tangguh. Mahasiswa diajarkan untuk memisahkan logika komputasi (*backend*) dari logika tampilan (*frontend*). Melalui alat desain visual *Qt Designer*, mahasiswa dapat menyusun tata letak antarmuka dengan metode seret dan lepas (*drag-and-drop*), lalu menghubungkan (*wiring*) tombol-tombol tersebut ke fungsi Python yang mengeksekusi ekstraksi data (Summerfield, 2015).

8.4.2 Integrasi Visualisasi Molekuler Tiga Dimensi (*py3Dmol*)

Sebuah perangkat lunak kimia tidak akan lengkap tanpa fitur visualisasi molekul tiga dimensi. Mengembangkan mesin perender grafis (*rendering engine*) 3D dari awal menggunakan OpenGL adalah tugas yang terlampau rumit dan tidak efisien. Solusi elegan yang tersedia di ekosistem Python adalah dengan menyematkan (*embedding*) penampil molekul berbasis web langsung ke dalam aplikasi GUI *desktop* tersebut.

Mahasiswa diajarkan untuk menggunakan pustaka **py3Dmol**, yang merupakan antarmuka Python untuk perpustakaan JavaScript *3Dmol.js* yang dioptimalkan untuk grafis WebGL berkinerja tinggi (Rego & Koes, 2015). Dengan menggunakan komponen penjelajah web internal di dalam PyQt (yaitu *QWebEngineView*), mahasiswa dapat merender struktur kristal protein atau lintasan (*trajectory*) dinamika molekul di dalam aplikasi buatan mereka sendiri.

Bayangkan sebuah aplikasi di mana peneliti dapat memuat file *.pdb* ke dalam program, dan program tersebut secara otomatis tidak hanya menghitung muatan parsial atom menggunakan pustaka *Open Babel* (O'Boyle et al., 2011), tetapi juga langsung menyorot (*highlight*) area aktif enzim dengan warna merah secara interaktif di layar. Mahasiswa yang merancang aplikasi semacam ini pada dasarnya sedang membangun "mini-GaussView" atau "mini-Avogadro" yang disesuaikan secara eksklusif dengan topik tesis atau disertasinya.

8.4.3 Distribusi Perangkat Lunak dan Demokratisasi Akses

Tahap akhir dari pengembangan GUI adalah distribusi. Kode Python asli (*.py*) membutuhkan instalasi *interpreter* (penerjemah) Python dan berbagai pustaka eksternal yang rumit di komputer pengguna akhir. Untuk mengatasi rintangan ini, mahasiswa menggunakan utilitas kompilasi seperti **PyInstaller**.

Perangkat ini akan membungkus (*package*) seluruh skrip Python, pustaka pihak ketiga (seperti RDKit, Pandas, dan PyQt), serta pengaturan lingkungannya ke dalam satu *file* eksekusi mandiri (misalnya *.exe* untuk sistem operasi Windows). Hasilnya, perangkat lunak buatan mahasiswa tersebut dapat disalin ke *flashdisk*, dibagikan kepada rekan peneliti di laboratorium lain, dan dijalankan dengan cukup mengklik ganda (*double-click*) tanpa perlu menginstal Python sama sekali.

Secara filosofis dan etis, tindakan merancang antarmuka grafis yang ramah pengguna untuk menyembunyikan kerumitan matriks komputasi adalah sebetulnya amal jariah intelektual. Ini adalah upaya nyata untuk "memudahkan" jalan ilmu pengetahuan bagi orang lain. Dalam tradisi keilmuan Islam, memudahkan urusan atau kesulitan orang lain (termasuk kesulitan teknis dalam meneliti alam semesta) memiliki kedudukan spiritual yang sangat tinggi, sebagaimana disabdakan oleh Rasulullah SAW:

وَمَنْ يَسِّرْ عَلَى مُعْسِرٍ يَسِّرَ اللَّهُ عَلَيْهِ فِي الدُّنْيَا وَالْآخِرَةِ

"Barangsiapa yang memudahkan urusan (atau meringankan beban) orang yang sedang kesulitan, maka Allah akan memudahkannya di dunia dan di akhirat." (HR. Muslim No. 2699).

Membangun GUI dalam kimia komputasi bukanlah sekadar aktivitas teknis penyusunan kode. Ia adalah proses empati—seorang pemrogram membayangkan kesulitan yang dihadapi oleh pengguna akhir (seorang biolog atau kimiawan organik murni) saat harus membaca barisan teks log mesin, lalu merancang "tombol" dan "layar visual" untuk meringankan beban kognitif mereka. Menghasilkan perangkat lunak yang dapat diakses, dipahami, dan digunakan dengan mudah oleh komunitas sains global merupakan implementasi modern dari semangat memudahkan langkah manusia dalam merengkuh kebaikan ilmu.

8.5 Masa Depan Kimia Komputasi dan Etika Pemodelan

Sebagai sub-bab penutup dalam eksplorasi arsitektur komputasi modern ini, mahasiswa dan peneliti harus disadarkan bahwa teknologi perangkat keras dan perangkat lunak akan terus berevolusi secara eksponensial. Skrip Python dan algoritma pembelajaran mesin yang dipelajari hari ini mungkin akan menjadi usang dalam satu dekade ke depan. Namun, ada dua hal yang akan tetap abadi dan menjadi fondasi bagi kemajuan sains: terobosan perangkat keras generasi baru (seperti komputasi kuantum) dan integritas etika dari ilmuwan yang mengoperasikannya.

8.5.1 Fajar Komputasi Kuantum (*Quantum Computing*)

Batasan fundamental dari seluruh perangkat lunak yang telah dibahas—mulai dari Gaussian, ORCA, hingga algoritma kecerdasan buatan berbasis Python—adalah ketergantungannya pada arsitektur komputer klasik. Komputer klasik memproses informasi dalam bentuk *bit* biner yang secara kaku hanya bernilai 0 atau 1. Pendekatan ini sangat tidak efisien untuk memecahkan Persamaan Schrödinger dari molekul raksasa, karena elektron pada hakikatnya adalah entitas kuantum yang dapat berada dalam kondisi superposisi (berbagai keadaan sekaligus).

Masa depan absolut dari kimia komputasi terletak pada **Komputasi Kuantum**. Alih-alih menggunakan *bit*, komputer kuantum beroperasi menggunakan *qubit* (kuantum bit) yang mematuhi hukum superposisi dan keterkaitan kuantum (*quantum entanglement*). Pada tahun 2017, para peneliti di IBM berhasil mensimulasikan energi keadaan dasar dari molekul berilium hidrida (BeH_2) menggunakan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) yang dijalankan pada prosesor kuantum nyata (Kandala et al., 2017).

Di masa depan, mensimulasikan mekanisme fiksasi nitrogen oleh enzim nitrogenase—yang memakan waktu jutaan tahun jika dihitung menggunakan superkomputer klasik terbaik saat ini—akan dapat diselesaikan dalam hitungan jam oleh komputer kuantum. Peralihan ini akan mengubah kimia dari disiplin ilmu yang bersifat observasional eksperimental menjadi sains yang sepenuhnya dapat didesain dan diprediksi secara presisi secara komputasional.

8.5.2 Sindrom "Kotak Hitam" dan Prinsip GIGO

Tantangan terbesar yang dibawa oleh otomatisasi tingkat tinggi dan kecerdasan buatan bukanlah keterbatasan teknologi, melainkan bahaya kemunduran intelektual. Perangkat lunak dengan antarmuka grafis (GUI) yang sangat ramah pengguna sering kali memicu fenomena **Sindrom Kotak Hitam** (*Black Box Syndrome*). Dalam sindrom ini, mahasiswa memasukkan struktur

molekul (ke dalam "kotak hitam"), menekan tombol, dan secara dogmatis mempercayai angka keluaran (*output*) yang muncul di layar tanpa memahami hukum fisika dasar atau matematika yang dioperasikan oleh mesin tersebut.

Roald Hoffmann (pemenang Hadiah Nobel Kimia 1981) dengan tegas memperingatkan para kimiawan komputasi agar tidak mempublikasikan prediksi molekuler yang hanya bersandar pada hasil *output* mesin tanpa ada rasionalisasi ikatan kimiawi yang masuk akal (Hoffmann, Schleyer, & Schaefer, 2008). Mesin tidak memiliki intuisi kimia; mereka hanya mengunyah angka.

Prinsip abadi yang harus dipegang teguh oleh setiap ahli kimia komputasi adalah **GIGO** (*Garbage In, Garbage Out* / Sampah Masuk, Sampah Keluar). Jika mahasiswa memasukkan tebakan geometri yang buruk, memilih set basis (*basis set*) yang tidak sesuai, atau mendefinisikan multiplisitas spin yang salah, Gaussian atau algoritma Python akan tetap memprosesnya dan memberikan hasil tanpa hambatan. Namun, angka tersebut tidak memiliki makna fisik (hanyalah "sampah"). Tugas manusia bukanlah menjadi operator tombol, melainkan menjadi penjamin mutu intelektual.

8.5.3 Etika Pemodelan dan Pertanggungjawaban Ilmu

Sains komputasi memegang kendali yang sangat besar. Memprediksi efektivitas sebuah kandidat obat antikanker melalui penapisan virtual (*virtual screening*) dapat menentukan ke arah mana investasi miliaran rupiah akan dihabiskan dalam uji klinis. Memanipulasi data hasil komputasi—seperti menyembunyikan frekuensi imajiner yang membuktikan struktur tidak stabil, atau secara sengaja memilih metode *Density Functional Theory* (DFT) tertentu hanya karena hasilnya kebetulan cocok dengan hipotesis peneliti—merupakan sebuah pelanggaran etika akademik tingkat berat.

Integritas saintifik ini harus dilandasi oleh kesadaran bahwa setiap klaim ilmu pengetahuan adalah sebuah kesaksian atas realitas ciptaan Tuhan. Memanipulasi data komputasi berarti berdusta atas nama kebenaran hukum alam (*sunnatullah*). Prinsip kejujuran dan sikap kritis dalam menyikapi informasi (termasuk hasil *output* mesin) telah diamanatkan secara tegas oleh Allah SWT:

وَلَا تَقْفُ مَا لَيْسَ لَكَ بِهِ عِلْمٌ إِنَّ السَّمْعَ وَالْبَصَرَ وَالْفُؤَادَ كُلُّ أُولَٰئِكَ كَانَ عَنْهُ مَسْئُولًا

"Dan janganlah kamu mengikuti apa yang kamu tidak mempunyai pengetahuan tentangnya. Sesungguhnya pendengaran, penglihatan dan hati, semuanya itu akan diminta pertanggungjawabannya." (QS. Al-Isra' [17]: 36).

Ayat ini merupakan fondasi filosofis bagi metode ilmiah dan etika saintifik. Frasa "*janganlah kamu mengikuti apa yang kamu tidak mempunyai pengetahuan tentangnya*" melarang mahasiswa dan peneliti untuk mengklaim sebuah hasil komputasi (Sindrom Kotak Hitam) jika mereka tidak memahami landasan teori (ilmu) di baliknya. Semua instrumen yang digunakan—baik "penglihatan" pada visualisasi spektrum, "pendengaran" pada literatur, dan "hati/akal" dalam menganalisis data Python—akan dimintai pertanggungjawaban di hadapan Sang Pemilik Ilmu

Mutlak. Menjadi ahli kimia komputasi yang berintegritas berarti menjadi penyampai pesan alam semesta dengan kejujuran, presisi, dan kerendahan hati.

DAFTAR PUSTAKA BAB 8

Hoffmann, R., Schleyer, P. V. R., & Schaefer III, H. F. (2008). Predicting molecules—More realism, please!. *Angewandte Chemie International Edition*, 47(38), 7164-7167.

Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, 9(3), 90-95.

Kandala, A., Mezzacapo, A., Temme, K., Takita, M., Brink, M., Chow, J. M., & Gambetta, J. M. (2017). Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 549(7671), 242-246.

Kluyver, T., Ragan-Kelley, B., Pérez, F., Granger, B. E., Bussonnier, M., Frederic, J., ... & Jupyter Development Team. (2016). Jupyter Notebooks—a publishing format for reproducible computational workflows. In *Positioning and Power in Academic Publishing: Players, Agents and Agendas* (pp. 87-90).

Landrum, G. (2013). RDKit: Open-source cheminformatics. URL: <http://www.rdkit.org>.

McKinney, W. (2010). Data structures for statistical computing in python. In *Proceedings of the 9th Python in Science Conference* (Vol. 445, pp. 51-56).

O'Boyle, N. M., Banck, M., James, C. A., Morley, C., Vandermeersch, T., & Hutchison, G. R. (2011). Open Babel: An open chemical toolbox. *Journal of Cheminformatics*, 3(1), 1-14.

O'Boyle, N. M., Tenderholt, A. L., & Langner, K. M. (2008). cclib: A library for package-independent computational chemistry algorithms. *Journal of Computational Chemistry*, 29(5), 839-845.

Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., ... & Duchesnay, É. (2011). Scikit-learn: Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 12, 2825-2830.

Rego, N., & Koes, D. (2015). 3Dmol.js: molecular visualization with WebGL. *Bioinformatics*, 31(8), 1322-1324.

Rogers, D., & Hahn, M. (2010). Extended-connectivity fingerprints. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 50(5), 742-754.

Summerfield, M. (2015). *Rapid GUI programming with Python and Qt: the definitive guide to PyQt programming*. Pearson Education.

Wu, Z., Ramsundar, B., Feinberg, E. N., Gomes, J., Geniesse, C., Pappu, A. S., ... & Pande, V. (2018). MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning. *Chemical Science*, 9(2), 513-530.

GLOSARIUM

Glosarium ini disusun untuk membantu pembaca memahami istilah-istilah kunci yang digunakan dalam buku Software Kimia Komputasi untuk Pembelajaran Kimia. Entri dipilih agar mewakili konsep perangkat lunak, pemodelan molekul, kimia kuantum, pembelajaran berbasis makmal maya, basis data kimia, otomatisasi Python, pembelajaran mesin, serta etika pemodelan ilmiah.

A

Ab initio: Metode komputasi kuantum yang menghitung sifat molekul dari prinsip dasar mekanika kuantum tanpa parameter empiris utama; lazim digunakan untuk mempelajari struktur elektronik, energi, dan reaktivitas.

Afinitas elektron: Kecenderungan atom atau molekul menerima elektron; dalam kimia komputasi dapat diperkirakan melalui perbedaan energi spesies netral dan anion.

Algoritma: Urutan langkah logis dan matematis yang dijalankan komputer untuk menyelesaikan perhitungan, optimasi geometri, pencarian konformer, atau analisis data kimia.

AMBER: Medan gaya yang banyak digunakan dalam mekanika molekular dan dinamika molekular, terutama untuk biomolekul seperti protein, DNA, dan sistem pelarut.

Avogadro: Perangkat lunak pembangun dan visualisasi molekul tiga dimensi yang sering dipakai untuk menggambar struktur, optimasi awal, dan menyiapkan berkas input komputasi.

B

Basis set: Kumpulan fungsi matematis yang digunakan untuk merepresentasikan orbital atom atau molekul dalam perhitungan kuantum.

Benchmarking: Proses menguji metode komputasi dengan membandingkan hasilnya terhadap data eksperimen atau dataset acuan yang telah tervalidasi.

Blended learning: Model pembelajaran yang memadukan tatap muka, praktikum fisik, simulasi digital, dan aktivitas mandiri berbasis teknologi.

Born-Oppenheimer: Aproksimasi yang memisahkan gerak inti atom dan elektron karena inti jauh lebih masif daripada elektron; menjadi fondasi banyak perhitungan struktur elektronik.

BYOD: Bring Your Own Device; pendekatan pembelajaran ketika mahasiswa menggunakan laptop atau perangkat sendiri untuk menjalankan software kimia komputasi.

C

cclib: Pustaka Python untuk membaca dan mengekstraksi data dari berbagai keluaran perangkat lunak kimia komputasi, seperti Gaussian, ORCA, dan program sejenis.

CHARMM: Medan gaya dan ekosistem perangkat lunak yang banyak digunakan untuk simulasi biomolekul dan dinamika molekular.

Chemical intuition: Intuisi kimiawi yang membantu peneliti menafsirkan geometri, energi, reaktivitas, dan pola interaksi molekul secara bermakna.

ChemCompute: Platform berbasis web yang memungkinkan pengguna menjalankan perhitungan kimia komputasi tanpa instalasi perangkat lunak lokal yang kompleks.

Cloud computing: Pemanfaatan peladen awan untuk menyimpan, menjalankan, dan membagikan pekerjaan komputasi sehingga akses tidak bergantung sepenuhnya pada komputer lokal.

D

DataFrame: Struktur data tabular dalam pustaka Pandas yang digunakan untuk mengolah, menyaring, dan menganalisis data hasil komputasi kimia.

Deep learning: Cabang pembelajaran mesin yang menggunakan jaringan saraf berlapis untuk mengenali pola kompleks, termasuk prediksi sifat molekul dan struktur protein.

Density Functional Theory: Teori Fungsional Kerapatan atau DFT; metode struktur elektronik yang menggunakan kerapatan elektron sebagai variabel utama untuk menghitung energi dan sifat molekul.

Dinamika molekuler: Simulasi perubahan posisi atom terhadap waktu berdasarkan gaya antaratom, sering digunakan untuk mempelajari fleksibilitas protein, pelarut, dan material.

Docking molekuler: Metode komputasi untuk memprediksi posisi dan afinitas ikatan antara ligan dan reseptor, terutama dalam penemuan obat berbasis struktur.

E

ECFP: Extended-Connectivity Fingerprints; representasi molekul berbasis fragmen lokal yang mengubah struktur kimia menjadi vektor angka untuk pembelajaran mesin.

Energi bebas Gibbs: Besaran termodinamika yang menunjukkan spontanitas proses; dalam komputasi sering digunakan untuk menilai kestabilan, reaksi, atau afinitas ikatan.

Energi potensial: Energi yang berkaitan dengan konfigurasi atom dalam molekul; permukaannya digunakan untuk memahami optimasi geometri dan jalur reaksi.

Enjin komputasi: Program backend yang menjalankan perhitungan inti, seperti ORCA, Gaussian, GAMESS, atau NWChem.

Etika pemodelan: Prinsip integritas ilmiah dalam memilih metode, melaporkan parameter, menyatakan keterbatasan, dan tidak memanipulasi data komputasi.

F

Fail input: Berkas yang berisi koordinat molekul, metode, basis set, muatan, multiplisitas, dan instruksi perhitungan untuk enjin komputasi.

Force field: Medan gaya; sekumpulan parameter matematis untuk menghitung energi dalam mekanika molekular, meliputi ikatan, sudut, torsi, van der Waals, dan elektrostatik.

Frekuensi vibrasi: Frekuensi gerak getar molekul yang dihitung untuk memprediksi spektrum IR, menguji titik minimum, dan mengidentifikasi keadaan transisi.

Fungsional kerapatan: Komponen dalam DFT yang mengaproksimasi energi pertukaran dan korelasi elektron berdasarkan kerapatan elektron.

Fungsi gelombang: Representasi matematis keadaan kuantum sistem yang memuat informasi probabilistik tentang posisi, energi, dan sifat elektron.

G

Gabedit: Antarmuka grafis universal yang dapat membantu menyiapkan input, menjalankan, dan memvisualisasikan hasil dari berbagai program kimia komputasi.

GAMESS: Program kimia komputasi yang digunakan untuk perhitungan struktur elektronik dan tersedia luas dalam lingkungan akademik.

Gaussian: Perangkat lunak komersial populer untuk perhitungan kimia kuantum, termasuk optimasi geometri, frekuensi, termokimia, dan analisis orbital.

GaussView: Perangkat lunak visualisasi dan pembangun molekul yang lazim digunakan sebagai antarmuka pendukung Gaussian.

GIGO: Garbage In, Garbage Out; prinsip bahwa input yang keliru atau tidak tervalidasi akan menghasilkan keluaran komputasi yang keliru pula.

H

Hartree-Fock: Metode ab initio dasar yang mengaproksimasi interaksi elektron melalui medan rata-rata dan menjadi pijakan bagi banyak metode korelasi elektron.

HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital; orbital molekul berenergi tertinggi yang masih terisi elektron dan penting untuk menilai kecenderungan donor elektron.

HOMO-LUMO gap: Selisih energi antara HOMO dan LUMO yang sering dikaitkan dengan kestabilan, reaktivitas, dan sifat optoelektronik molekul.

HPC: High-Performance Computing; infrastruktur komputasi kinerja tinggi untuk menjalankan simulasi besar atau perhitungan kuantum yang memerlukan banyak prosesor.

HyperChem: Perangkat lunak komersial yang digunakan untuk pemodelan molekul, mekanika molekular, dan pembelajaran kimia komputasi.

I

In silico: Eksperimen atau prediksi yang dilakukan melalui simulasi komputer, bukan melalui percobaan fisik langsung di laboratorium basah.

Induced fit: Model interaksi ligan-reseptor ketika situs ikatan menyesuaikan bentuknya saat ligan berikatan.

Inkuiri saintifik: Pendekatan pembelajaran yang menempatkan mahasiswa sebagai penanya, perancang eksperimen, penguji data, dan penafsir temuan.

Interoperabilitas: Kemampuan berbagai perangkat lunak, format berkas, dan mesin komputasi untuk saling bertukar data secara efektif.

IRC: Intrinsic Reaction Coordinate; analisis jalur reaksi yang menelusuri hubungan antara keadaan transisi dan reaktan serta produk.

J

Java Applet: Teknologi lama untuk menjalankan aplikasi kecil dalam browser; dahulu dipakai Jmol sebelum banyak digantikan pendekatan HTML5.

Jmol: Perangkat lunak visualisasi molekul tiga dimensi yang banyak digunakan untuk pembelajaran dan eksplorasi struktur kimia.

JSmol: Versi Jmol berbasis JavaScript dan HTML5 yang dapat berjalan di browser modern tanpa memerlukan Java Applet.

Jupyter Notebook: Lingkungan kerja interaktif untuk menulis kode, teks, persamaan, grafik, dan catatan eksperimen komputasi dalam satu dokumen digital.

Jaringan saraf tiruan: Model komputasi yang meniru pola pemrosesan neuron untuk mempelajari hubungan kompleks antara struktur molekul dan sifat kimia.

K

Kerapatan elektron: Distribusi probabilitas elektron dalam ruang yang menjadi variabel utama dalam DFT dan dasar interpretasi banyak sifat molekul.

Kimia hijau: Kerangka etis dan praktis untuk mengurangi limbah, bahaya, dan konsumsi sumber daya dalam aktivitas kimia.

Kimia komputasi: Cabang kimia yang menggunakan model matematis, algoritma, dan perangkat lunak untuk mempelajari struktur, sifat, dan reaktivitas materi.

Kognitif spasial: Kemampuan memahami dan memanipulasi objek tiga dimensi dalam pikiran; penting dalam visualisasi molekul.

Komputasi kuantum: Paradigma komputasi yang memakai qubit dan prinsip superposisi kuantum untuk menyelesaikan masalah tertentu secara berbeda dari komputer klasik.

L

Laboratorium basah: Laboratorium fisik tempat eksperimen kimia dilakukan menggunakan reagen, instrumen, dan prosedur empiris.

Laboratorium silikon: Metafora untuk lingkungan kerja komputasi tempat eksperimen kimia dijalankan melalui simulasi digital.

Learning analytics: Analisis data aktivitas belajar untuk memahami proses, kemajuan, dan kebutuhan pembelajar dalam lingkungan digital.

Ligan: Molekul atau ion yang berikatan dengan reseptor, protein, logam, atau pusat aktif tertentu dalam sistem kimia dan biokimia.

LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital; orbital kosong berenergi terendah yang penting untuk menilai kecenderungan akseptor elektron.

M

Makmal maya: Virtual laboratory; lingkungan simulasi interaktif untuk melakukan eksperimen kimia secara digital tanpa reagen fisik.

Mekanika molekular: Pendekatan klasik yang memodelkan atom sebagai bola dan ikatan sebagai pegas untuk menghitung energi dan geometri molekul.

Mekanika kuantum: Teori fisika yang menjelaskan perilaku partikel pada skala atomik dan subatomik; menjadi fondasi kimia komputasi modern.

MEP: Molecular Electrostatic Potential; peta potensial elektrostatik molekul yang membantu memprediksi daerah kaya dan miskin elektron.

MMFF94: Merck Molecular Force Field 94; medan gaya yang sering digunakan untuk optimasi awal struktur organik dalam perangkat lunak pemodelan molekul.

N

Natural Bond Orbital: NBO; metode analisis orbital yang menafsirkan struktur elektronik melalui konsep ikatan, pasangan bebas, donasi elektron, dan hiperkonjugasi.

NMR: Nuclear Magnetic Resonance; teknik spektroskopi yang dapat dibandingkan dengan prediksi komputasi untuk identifikasi struktur molekul.

Node orbital: Daerah atau bidang dalam orbital tempat probabilitas menemukan elektron bernilai nol.

NWChem: Perangkat lunak kimia komputasi sumber terbuka untuk perhitungan struktur elektronik, dinamika molekuler, dan simulasi berskala besar.

Neural network potential: Model potensial energi berbasis jaringan saraf yang dilatih dari data komputasi untuk mempercepat estimasi energi dan gaya molekuler.

O

Open access: Prinsip keterbukaan akses terhadap data, artikel, basis data, dan sumber belajar agar ilmu dapat dimanfaatkan lebih luas.

Open Babel: Perangkat lunak dan pustaka untuk konversi format berkas kimia, manipulasi struktur, dan interoperabilitas data molekuler.

Open source: Model pengembangan perangkat lunak yang membuka kode sumber agar dapat digunakan, dipelajari, dimodifikasi, dan didistribusikan sesuai lisensi.

Optimasi geometri: Proses mencari susunan atom dengan energi minimum atau keadaan tertentu pada permukaan energi potensial.

ORCA: Perangkat lunak kimia kuantum yang banyak digunakan untuk perhitungan DFT, ab initio, spektrum, dan sifat elektronik dalam lingkungan akademik.

P

Pandas: Pustaka Python untuk mengolah data tabular, membaca berkas, membersihkan data, dan melakukan analisis hasil komputasi.

PDB: Protein Data Bank; basis data global struktur tiga dimensi biomolekul seperti protein, DNA, RNA, dan kompleks makromolekul.

Pembelajaran mesin: Machine learning; pendekatan komputasi yang membuat model belajar dari data untuk memprediksi sifat, aktivitas, atau pola molekuler.

Permukaan energi potensial: PES; gambaran multidimensi hubungan antara geometri molekul dan energi, digunakan untuk memahami optimasi dan jalur reaksi.

PubChem: Basis data kimia publik yang menyediakan struktur, identitas, sifat, dan informasi senyawa kecil untuk pembelajaran dan riset.

Python: Bahasa pemrograman yang digunakan untuk otomatisasi, analisis data, visualisasi, pembelajaran mesin, dan pengembangan GUI dalam kimia komputasi.

Q

QM/MM: Metode hibrida yang menggabungkan mekanika kuantum pada wilayah reaktif dengan mekanika molekular pada lingkungan besar di sekitarnya.

QSAR: Quantitative Structure-Activity Relationship; pendekatan untuk menghubungkan deskriptor struktur molekul dengan aktivitas biologis atau sifat tertentu secara kuantitatif.

Qubit: Unit informasi dasar dalam komputasi kuantum yang dapat berada dalam superposisi keadaan, berbeda dari bit klasik 0 atau 1.

Quantum mechanics: Mekanika kuantum; kerangka teoritis utama untuk menjelaskan struktur elektronik, orbital, spektrum, dan ikatan kimia.

R

Random Forest: Algoritma pembelajaran mesin berbasis banyak pohon keputusan yang sering digunakan untuk klasifikasi dan regresi sifat kimia.

RDKit: Pustaka cheminformatics sumber terbuka dalam Python untuk membaca struktur, membuat fingerprint, menghitung deskriptor, dan memanipulasi molekul.

Reaktivitas: Kecenderungan suatu molekul mengalami reaksi; dalam komputasi dapat ditafsirkan melalui orbital, muatan, MEP, energi, dan keadaan transisi.

Reseptor: Makromolekul target, biasanya protein, yang berinteraksi dengan ligan dalam kajian docking dan desain obat.

Ruang kimia: Himpunan sangat besar dari semua molekul yang mungkin ada atau dapat dirancang secara teoritis.

S

Scikit-Learn: Pustaka Python untuk pembelajaran mesin yang menyediakan algoritma klasifikasi, regresi, validasi model, dan pemrosesan data.

Scoring function: Fungsi penilaian dalam docking yang memperkirakan kekuatan atau kualitas ikatan ligan terhadap reseptor.

Semi-empiris: Metode komputasi kuantum yang menyederhanakan perhitungan dengan parameter empiris agar lebih cepat daripada ab initio murni.

SMILES: Simplified Molecular Input Line Entry System; notasi teks linear untuk merepresentasikan struktur molekul.

SVM: Support Vector Machine; algoritma pembelajaran mesin yang dapat digunakan untuk klasifikasi atau regresi data kimia.

T

Tafakkur saintifik: Aktivitas merenungi keteraturan ciptaan melalui pengamatan, pemodelan, dan analisis ilmiah yang bertanggung jawab.

Termodinamika komputasi: Kajian besaran energi, entalpi, entropi, dan energi bebas melalui perhitungan kimia komputasi.

TPACK: Technological Pedagogical Content Knowledge; kerangka integrasi pengetahuan teknologi, pedagogi, dan konten dalam pembelajaran.

Transition state: Keadaan transisi; konfigurasi energi tinggi pada jalur reaksi yang menghubungkan reaktan dan produk.

Troubleshooting: Proses mengidentifikasi dan memperbaiki kesalahan input, konvergensi, format berkas, atau interpretasi keluaran komputasi.

U

UFF: Universal Force Field; medan gaya umum yang dapat digunakan untuk optimasi awal banyak jenis atom dan struktur molekul.

Undergraduate: Jenjang sarjana; dalam buku ini terkait dengan penerapan kimia komputasi sebagai kompetensi dasar mahasiswa kimia.

Unsupervised learning: Pembelajaran mesin tanpa label target yang digunakan untuk menemukan pengelompokan, pola, atau struktur tersembunyi dalam data.

UV-Vis: Spektroskopi ultraviolet-tampak yang mengukur transisi elektronik dan dapat dibandingkan dengan prediksi komputasi.

V

Validasi model: Proses memastikan bahwa model komputasi layak dipercaya melalui perbandingan dengan data eksperimen, teori mapan, atau dataset acuan.

Van der Waals: Interaksi non-kovalen lemah yang berperan dalam kestabilan konformasi, pelipatan biomolekul, dan interaksi ligan-reseptor.

Virtual laboratory: Laboratorium maya; lingkungan pembelajaran berbasis simulasi yang memungkinkan eksperimen digital, visualisasi, dan analisis tanpa bahaya bahan kimia.

Virtual screening: Penyaringan kandidat molekul secara komputasi untuk memilih senyawa yang berpotensi aktif sebelum diuji secara eksperimen.

Visualisasi molekul: Penyajian struktur dan sifat molekul dalam bentuk grafis dua atau tiga dimensi agar konsep submikroskopik lebih mudah dipahami.

W

WebAssembly: Teknologi web yang memungkinkan program komputasi berjalan lebih cepat di browser, termasuk porting beberapa alat kimia komputasi berbasis web.

WebGL: Teknologi grafis web untuk merender visualisasi tiga dimensi secara interaktif di browser.

Wet lab: Laboratorium basah; tempat eksperimen kimia fisik dilakukan secara langsung dengan bahan, instrumen, dan prosedur empiris.

Workflow pipeline: Rangkaian otomatis alur kerja, mulai dari persiapan struktur, menjalankan perhitungan, mengekstraksi output, hingga menganalisis data.

Working memory: Memori kerja; kapasitas kognitif sementara yang digunakan pembelajar saat memahami representasi molekul, persamaan, dan data sekaligus.

X

X-axis: Sumbu X dalam koordinat tiga dimensi yang digunakan untuk menggambarkan posisi atom, orientasi molekul, dan manipulasi struktur.

X-ray crystallography: Kristalografi sinar-X; teknik eksperimen untuk menentukan struktur tiga dimensi molekul atau biomolekul yang sering menjadi sumber data PDB.

XML: Extensible Markup Language; format data terstruktur yang berperan dalam berbagai dokumen digital dan pertukaran data.

XYZ file: Format berkas sederhana yang menyimpan simbol atom dan koordinat X, Y, Z untuk merepresentasikan struktur molekul.

Y

Y-axis: Sumbu Y dalam sistem koordinat tiga dimensi yang membantu menentukan orientasi spasial atom dan molekul.

Yield: Hasil reaksi; dalam konteks riset kimia, prediksi komputasi dapat membantu memilih jalur reaksi yang secara teoritis lebih menguntungkan sebelum eksperimen.

YAML: Format teks terstruktur yang kadang digunakan untuk konfigurasi alur kerja komputasi, penyimpanan parameter, atau dokumentasi pipeline.

Yoked representation: Keterpaduan representasi makroskopik, submikroskopik, simbolik, dan matematis dalam pembelajaran kimia agar pemahaman tidak terpisah-pisah.

Z

Z-axis: Sumbu Z dalam koordinat tiga dimensi yang melengkapi X dan Y untuk menyatakan posisi atom dalam ruang.

Z-matrix: Format koordinat internal yang merepresentasikan struktur molekul melalui panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut dihedral.

Zero-point energy: Energi titik nol; energi vibrasi minimum yang tetap dimiliki molekul bahkan pada keadaan dasar kuantum.

Zwitterion: Spesies kimia yang memiliki muatan positif dan negatif sekaligus dalam satu molekul, penting dalam kajian asam amino dan biomolekul.

LAMPIRAN 1 CHEMCOMPUTE.ORG

Informasi yang tersedia untuk memperkaya konteks penggunaan ChemCompute.org.

Berikut adalah item praktikum yang telah diperbarui:

Topik Praktikum/Mini Riset Potensial: Analisis Konformasi dan Stabilitas Relatif Isomer Molekul Sederhana menggunakan Aplikasi Komputasi Online ChemCompute.org

Tujuan Instruksional: Setelah menyelesaikan praktikum ini, mahasiswa diharapkan dapat:

- Membangun berbagai konformer atau isomer dari molekul sederhana menggunakan aplikasi komputasi online.
- Melakukan optimasi geometri untuk setiap struktur yang dibuat guna mencapai konfigurasi energi minimum .
- Melakukan perhitungan energi *single point* (jika diperlukan oleh alur kerja aplikasi) .
- Mengumpulkan dan menganalisis data energi total serta sifat-sifat dasar molekuler dari *file output* .
- Membandingkan stabilitas relatif konformer atau isomer berdasarkan energi total yang diperoleh.
- Mengidentifikasi konformer atau isomer paling stabil dan menjelaskan faktor-faktor yang mempengaruhinya .

Konsep Kunci yang Relevan (dari sumber):

- **Optimasi Geometri:** Proses perhitungan di mana struktur dimodifikasi untuk membuat lebih konsisten dengan informasi parameter yang ada dalam program, bertujuan untuk mendapatkan struktur dengan energi terendah (minimum global atau lokal) .
- **Energi *Single Point* (SP):** Perhitungan energi elektronik total pada satu geometri molekul tertentu di mana posisi inti dianggap tetap .
- **Energi Mutlak:** Seringkali dihitung dalam satuan Hartrees dan merupakan dasar untuk mendapatkan besaran lain seperti energi relatif .
- **Kajian Konformasi dan Struktur Molekul:** Penting karena **struktur molekuler adalah penentu sifat fisik dan kimia suatu molekul** .

Metode Komputasi dan Basis Set yang Direkomendasikan (berdasarkan sumber): ChemCompute.org adalah perangkat lunak komputasi kimia online yang menggunakan

GAMESS. Pilihlah metode yang sesuai dengan kapabilitas GAMESS dan pertimbangkan keseimbangan antara akurasi dan biaya komputasi .

- **Ab Initio:** Seperti Hartree-Fock (HF) atau Density Functional Theory (DFT) . Untuk basis set, **STO-3G** (minimal basis set yang sederhana dan cepat) atau **3-21G** (split valence basis set untuk akurasi lebih baik) adalah pilihan awal yang baik. **6-31G(d)** adalah basis set terkecil yang memberikan hasil baik untuk perhitungan frekuensi dan akurasi geometri .
- **Semi-Empiris:** Jika **akurasi adalah hasil kedua** dan fokus pada **efisiensi komputasi** untuk sistem besar , metode seperti AM1 atau PM3 dapat digunakan . Namun, akurasi semi-empiris umumnya **lebih rendah dibandingkan perhitungan *ab initio*** .

Prosedur Pelaksanaan (menggunakan ChemCompute.org):

1. Pemilihan Molekul Target:

- Pilih molekul sederhana yang memiliki lebih dari satu konformer atau isomer stabil (misalnya, n-butana untuk kajian konformasi rotasi, atau 1,2-dikloroetana untuk melihat pengaruh sterik dan polaritas pada konformasi).
- **Catatan:** Untuk contoh n-butana, konformer utamanya adalah *anti* (s-trans), *gauche*, dan *eclipsed* (s-cis) .

2. Membangun Struktur Molekul (di ChemCompute.org):

- **Buka aplikasi ChemCompute.org di browser Anda.** [Informasi ini di luar sumber yang diberikan].
- **Pastikan Anda telah *login* atau *register*** untuk mendapatkan akses penuh ke sistem.
- **Gambarkan setiap konformer atau isomer molekul target Anda secara terpisah.** Untuk n-butana, gambarkan struktur *anti*, *gauche*, dan *eclipsed* sebagai entitas terpisah. Anda akan menggunakan antarmuka untuk menggambar, kemungkinan melalui bagian "**Submit Input**" atau "**Advanced Options 3D Panel**" yang ditunjukkan dalam tangkapan layar. Atur sudut torsi yang relevan untuk setiap konformer.
- **Simpan setiap struktur sebagai *job* atau *file input* yang berbeda** agar dapat diolah secara terpisah.

3. Melakukan Optimasi Geometri:

- Untuk setiap konformer/isomer yang telah Anda gambar, **jalankan proses optimasi geometri** .

- Pilih metode komputasi dan basis set yang Anda tentukan sebelumnya (misalnya, **HF/6-31G(d)** atau **B3LYP/6-31G(d)**, jika tersedia) melalui opsi pengaturan perhitungan di ChemCompute.org.
- **Tujuan dari optimasi ini adalah untuk menemukan geometri dengan energi terendah** untuk setiap konformer/isomer .
- ChemCompute.org memiliki fitur "**ANIMATE MINIMIZATION**", yang dapat membantu memvisualisasikan proses optimasi geometri secara langsung.
- **Catat energi total (dalam Hartrees)** yang dihasilkan setelah optimasi untuk setiap struktur . Ini akan menjadi salah satu *output* utama .

4. Mengumpulkan dan Menganalisis Data:

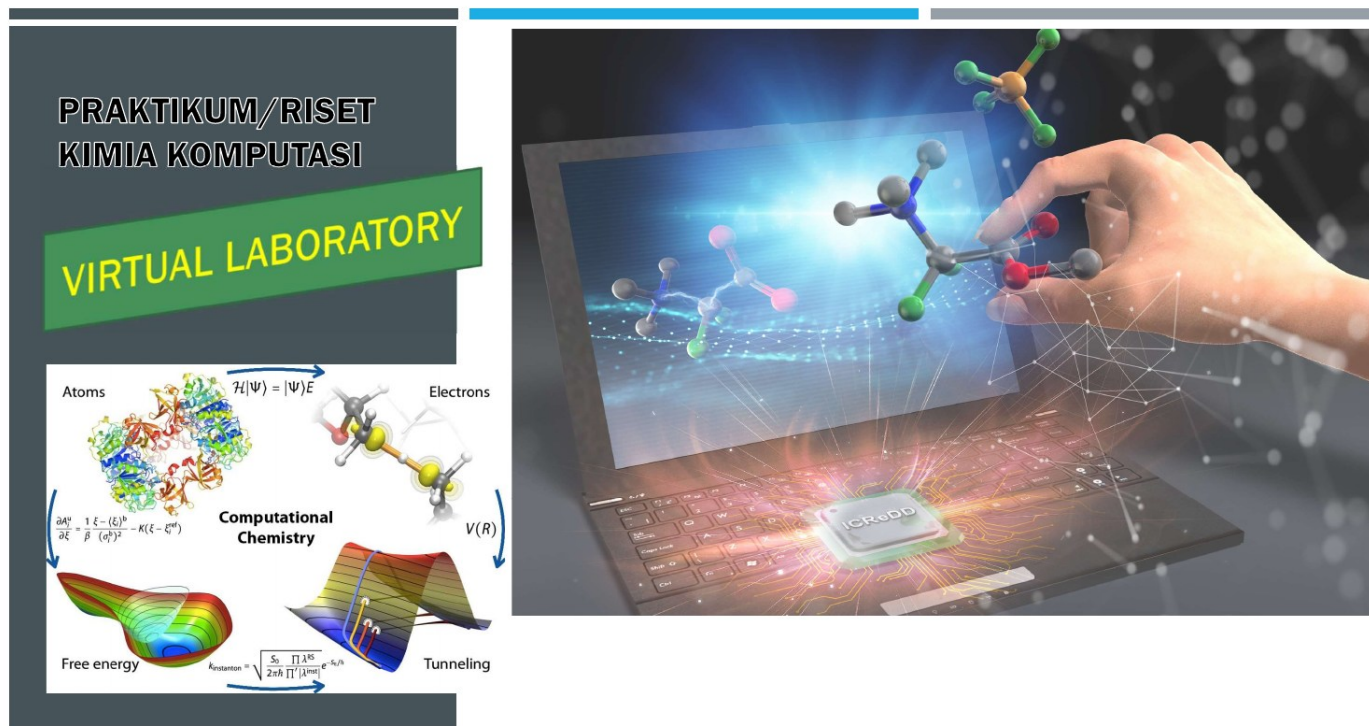
- Setelah semua perhitungan optimasi selesai, **kumpulkan energi total (dalam Hartrees)** dari *output file* untuk setiap konformer/isomer .
- **Hitung energi relatif** dari setiap konformer/isomer. Caranya adalah dengan mengurangkan energi total konformer/isomer yang memiliki energi paling rendah (paling stabil) dari energi total konformer/isomer lainnya. Ini akan memberikan nilai ΔE relatif.
- Jika memungkinkan, **catat juga parameter geometri kunci** seperti panjang ikatan dan sudut ikatan atau sudut torsi untuk setiap konformer yang teroptimasi .
- **Visualisasikan struktur teroptimasi** dari setiap konformer/isomer menggunakan fitur visualisasi di ChemCompute.org. Perhatikan bahwa ChemCompute.org memungkinkan visualisasi seperti "**ORBITAL HOMO**" dan "**VISUALISASI SPEKTRA IR**", yang mungkin relevan untuk analisis sifat molekuler tambahan.

5. Interpretasi Hasil:

- **Identifikasi konformer/isomer yang paling stabil** berdasarkan energi total relatif terkecil (atau paling negatif).
- **Diskusikan alasan di balik stabilitas relatif** dari konformer/isomer yang Anda kaji, mengacu pada konsep-konsep seperti tolakan sterik, tegangan cincin, interaksi van der Waals, atau efek elektronik jika relevan.
- Jika ada, **bandingkan hasil Anda dengan data eksperimen atau hasil dari literatur** untuk mengevaluasi akurasi metode komputasi yang digunakan . Diskusikan potensi deviasi dan penyebabnya (misalnya, keterbatasan metode komputasi atau basis set) .

Penting untuk Diperhatikan:

- **ChemCompute.org** adalah perangkat lunak komputasi kimia yang dirancang untuk pengajaran dan penelitian tingkat sarjana, yang memudahkan akses tanpa perlu kompilasi, instalasi, dan pemeliharaan perangkat lunak atau *hardware*.
 - Untuk mendapatkan akses penuh ke sistem, Anda mungkin perlu *login* atau mendaftar.
 - **ChemCompute.org** menggunakan **GAMESS** sebagai *engine* komputasinya, yang berarti metode dan basis set yang tersedia akan sesuai dengan kapabilitas GAMESS.
 - Langkah-langkah spesifik untuk navigasi dan penggunaan fitur di **ChemCompute.org** (misalnya, cara persis menggambar molekul atau menemukan *output*) tidak dijelaskan secara rinci dalam sumber yang diberikan. Anda perlu menjelajahi antarmuka platform tersebut untuk mengidentifikasi bagaimana cara memanfaatkan fitur "Submit Input", "Advanced Options 3D Panel", dan melihat hasil seperti "ORBITAL HOMO" atau "VISUALISASI SPEKTRA IR". Fitur unik seperti "WRITE STL (3D PRINTING)" juga tersedia.
 - **Kualitas hasil perhitungan bergantung pada pemilihan metode komputasi dan basis set.** Metode yang lebih akurat dan basis set yang lebih besar akan menghasilkan perhitungan yang lebih lama dan memerlukan lebih banyak sumber daya komputasi . Penting untuk menyeimbangkan akurasi yang memadai untuk masalah yang dikaji dengan ketersediaan sumber daya komputasi .
 - **Selalu lakukan tinjauan pustaka** sebelum memulai perhitungan untuk memperkirakan kesalahan dan memahami asumsi serta keterbatasan metode .
-



04/05/2021

1

Gambar 1. Sampul materi Virtual Laboratory untuk praktikum/riset kimia komputasi.

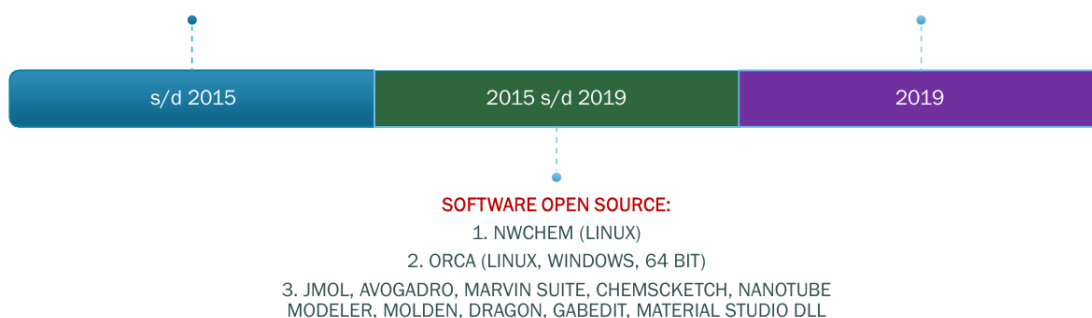
SOFTWARE PRAKTIKUM DAN RISET KIMIA KOMPUTASI

1. GAUSSIAN + GAUSSVIEW (KOMERSIAL, WINDOWS/LINUX)
2. HYPERCHEM STUDENT VERSION (KOMERSIAL, WINDOWS)
3. CHEMOFFICE/CHEMDRAW 3D (KOMERSIAL, WINDOWS)
3. SOFTWARE OPEN SOURCE: JMOL, AVOGADRO, MARVIN SUITE, CHEMSCKETCH, NANOTUBE MODELER, MOLDEN, DRAGON, GABEDIT, MATERIAL STUDIO DLL

ONLINE SOFTWARE:

1. CHEMCOMPUTE (GAMESS)
2. NWCHEM ONLINE / EMSL
3. JMOL ONLINE

4. OFFLINE SOFTWARE: JMOL, AVOGADRO, MARVIN SUITE, CHEMSCKETCH, NANOTUBE MODELER, MOLDEN, DRAGON, GABEDIT, MATERIAL STUDIO DLL



SOFTWARE OPEN SOURCE:

1. NWCHEM (LINUX)
2. ORCA (LINUX, WINDOWS, 64 BIT)
3. JMOL, AVOGADRO, MARVIN SUITE, CHEMSCKETCH, NANOTUBE MODELER, MOLDEN, DRAGON, GABEDIT, MATERIAL STUDIO DLL

<https://sites.google.com/mail.unnes.ac.id/kimiakomputasi/> = <https://s.id/kimiakomputasi>

04/05/2021

2

Gambar 2. Ringkasan perkembangan software praktikum dan riset kimia komputasi dari Gaussian, HyperChem, ChemOffice, software open source, hingga ChemCompute dan NWChem Online.

HTTPS://CHEMCOMPUTE.ORG/

Computational chemistry software for undergraduate teaching and research.

All without the hassle of compiling, installing, and maintaining software and hardware. Login or register at the top right to get full access to the system, or learn more about using ChemCompute in your class teaching.

Chem Compute is maintained by Mark Perri at Sonoma State University and hosted on Jetstream at Indiana University. The Chem Compute URL is <https://chemcompute.org/>. We will use Chem Compute as the frontend for running electronic structure calculations with *The General Atomic and Molecular Electronic Structure System*, GAMESS (<http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>). Chem Compute also provides access to other computational chemistry resources including PSI4 and the molecular dynamics packages TINKER and NAMD, though we will not be using those resource at this time.

Equalizing STEM education with supercomptuers: <https://youtu.be/jaXuG2QGd1o>

04/05/2021

3

Gambar 3. Halaman pengantar ChemCompute.org sebagai software kimia komputasi untuk pembelajaran dan riset sarjana tanpa instalasi software dan perangkat keras lokal.

Frontpage ChemCompute

The screenshot displays the ChemCompute website interface for the GAMESS section. At the top, a navigation bar includes links for ChemCompute, GAMESS, TINKER, NAMD, Psi4/Jupyter, Datasets (beta), Simulations, and Help. A red circle highlights the 'Login / Register' link in the top right corner. Below the navigation bar, there is a search bar and a dropdown menu for 'GAMESS' with options for 'Information & Experiments', 'Submit a job', and 'Get Job Results'. The main content area features a 'GAMESS Experiments (11)' section with a list of categories: Physical Chemistry, General Education Chemistry, General Chemistry, Organic Chemistry, and General Instructions. A text box on the left explains that GAMESS is a quantum chemistry package maintained by the Gordon research group at Iowa State University. Below this, a section titled 'How does GAMESS work?' provides a four-step process: 1. Pick an experiment below or skip straight to submitting a job; 2. Read the Background Theory; 3. Complete the Prelab; 4. Start the lab experiment or select Submit (Guided. Instructions appear). The footer includes the Perri Group (Sonoma State University) logo, 'Policies, Credits and Acknowledgements', and logos for SENTRY and XSEDE (Extreme Science and Engineering Discovery Environment).

04/05/2021

4

Gambar 4. Tampilan frontpage ChemCompute pada menu GAMESS, termasuk pilihan login/register dan daftar eksperimen GAMESS.

Submit Input

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help Login / Register

HOME / GAMESS / SUBMIT Hide Instructions

Instructions Download Background Info **Submit (Guided)** Submit Your Own Files Results

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this survey to help us improve (and help out future students)!

Instructions on how to build a molecule, submit a job, and view the results.

1. Make sure you are logged in. Registered users are allocated more computational power.
2. Click the next button to begin!

Survey Next

Choose your Molecule

You can draw your molecule in 2D or use the following options:

Search for a molecule:
ethanol
Search

Read Geometry From a Previous Job:
0
Load From Input Load From Output

Paste in atomic coordinates:
Open

clear ? help
NEW X R Z Q F
C N O S F Cl Br I P X
JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait

04/05/2021 5

Gambar 5. Tampilan Submit Input untuk memilih molekul, memasukkan nama molekul, dan memulai proses pengajuan perhitungan.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help Login / Register

HOME / GAMESS / SUBMIT Hide Instructions

Instructions

Download

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this survey to help us improve (and help out future students)!

Instructions on how to build a molecule, submit a job, and view the results.

1. Make sure you are logged in. Registered users are allocated more computational power.
2. Click the next button to begin!

Survey Next

3D Panel

- Advanced Options
- Label Atoms
- Use Symmetry C1

On the 3D model:

- enantiomer
- diastereomer in a C
- Manually alter coordinates
- Move atoms by dragging
- optimize geometry automatically
- delete atoms by clicking on them

Load from a database:

NCI PubChem PDB

name of the molecule or PDB ID:

ethanol

Retrieve

Recalculate Hydrogens

Done Symmetrizing

ethanol

JSmol

04/05/2021 6

Gambar 6. Tampilan Advanced Options 3D Panel pada ChemCompute untuk pengaturan struktur molekul tiga dimensi.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help Login / R

HOME / GAMESS / SUBMIT Hide Instructions

Instructions

Download

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this [survey](#) to help us improve (and help out future students)!

Instructions on how to build a molecule, submit a job, and view the results.

1. Make sure you are logged in. Registered users are allocated more computational power.
2. Click the next button to begin!

Survey Next

3D Panel

Advanced Options

Label Atoms

Use Symmetry C1

Resymmetrize

Draw Point Group Elements

Optimize structure in 3D

(Several times may be needed)

Delete All hydrogens

Report Wrong Search Result

Done Symmetrizing

ethanol

JSmol

Next

04/05/2021 7

Gambar 7. Tampilan 3D Panel setelah struktur etanol disiapkan dan tombol Next tersedia untuk melanjutkan tahap pengaturan perhitungan.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help

HOME / GAMESS / SUBMIT [Hide Instructions](#) **BAGIAN ATAS**

Instructions [Download](#)

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this [survey](#) to help us improve (and help out future students)!

Instructions on how to build a molecule, submit a job, and view the results.

1. Make sure you are logged in. Registered users are allocated more computational power.
2. Click the next button to begin!

[Survey](#) [Next](#)

Set Parameters for Quantum Mechanical Calculation

[Reset Settings to Default](#)

Name for input file: ethanol

Comment: Optimasi geometri struktur ethanol

Charge: 0

Multiplicity: 1

Type: Single-Point Energy Geometry Optimization Saddle Point Search

Add-Ons: IR UV-Vis NMR Thermodynamics ΔH_f (g3mp2) NBO None

Basis Set: AM1 PM3 PM6 STO-3G 3-21G 6-31G* 6-311G** 6-311G**+ aug-cc-pVDZ SPK-DZP

Molecular Orbital Method: RHF ROHF UHF

DFT Functional: None B3LYP PBE0 M06 wB97X-D

04/05/2021

8

Gambar 8. Bagian atas halaman Set Parameters for Quantum Mechanical Calculation, meliputi jenis perhitungan, add-ons, basis set, metode orbital molekul, dan fungsi DFT.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help **Login / Register**

HOME / GAMESS / SUBMIT **Hide Instructions**

Instructions [Download](#)

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this survey to help us improve (and help out future students)!

Instructions on how to build a molecule, submit a job, and view the results.

1. Make sure you are logged in. Registered users are allocated more computational power.
2. Click the next button to begin!

[Survey](#) [Next](#)

Add-Ons: IR UV-Vis NMR Thermodynamics ΔH_f (g3mp2) NBO None

Basis Set: AM1 PM3 PM6 STO-3G 3-21G 6-31G* 6-311G** 6-311G**+ aug-cc-pVDZ SPK-DZP

Molecular Orbital Method: RHF ROHF UHF

DFT Functional: None B3LYP PBE0 M06 wB97X-D

PCM Solvent: None Water Methanol Ethanol Acetone THF

Computer Cluster: auto jetstream

Processor Cores: 1

Time Limit: 1 hour

Optional: [Edit input file](#)

[Submit Job](#)

You may edit the data in the box below. Do not make changes to the atoms in any way if using symmetry. Use Manually alter coordinates instead.

BAGIAN BAWAH

TANPA REGISTRASI DAN LOGIN

04/05/2021

9

Gambar 9. Bagian bawah halaman parameter perhitungan pada kondisi tanpa registrasi dan login, dengan pilihan klaster, jumlah prosesor, batas waktu, dan tombol Submit Job.

The screenshot displays the ChemCompute web interface. At the top, a navigation bar includes links for ChemCompute, GAMESS, TINKER, NAMD, Psi4/Jupyter, Datasets (beta), Simulations, Help, and labkim's Dashboard (circled in red). Below the navigation bar, the page title is 'HOME / GAMESS / SUBMIT' with a 'Hide Instructions' button. The main content area is divided into two sections: 'Instructions' on the left and a parameter configuration form on the right. The 'Instructions' section contains a 'Download' button and a 'Survey' button. The parameter configuration form includes various options such as 'Type', 'Add-Ons', 'Basis Set', 'Molecular Orbital Method', 'DFT Functional', 'PCM Solvent', 'Computer Cluster', 'Processor Cores', and 'Time Limit'. A red box highlights the 'Computer Cluster' and 'Processor Cores' options, with a dark red box containing the text 'REGISTRASI DAN LOGIN' overlaid on it. A red arrow points from this box to the 'labkim's Dashboard' link. At the bottom right of the form, a 'Submit Job' button is circled in red. The footer of the page shows the date '04/05/2021' and the page number '10'.

Gambar 10. Bagian bawah halaman parameter perhitungan pada kondisi registrasi dan login, dengan akses komputasi yang lebih besar dan tombol Submit Job.

The screenshot displays the ChemCompute web interface. At the top, a navigation bar includes links for ChemCompute, GAMESS, TINKER, NAMD, Psi4/Jupyter, Datasets (beta), Simulations, and Help, along with a user profile 'labkim's Dashboard'. Below this, a breadcrumb trail shows 'HOME / GAMESS / STATUS' and a 'Hide Instructions' button. The main content area is divided into several sections:

- Instructions:** A sidebar on the left with a 'Download' button and a list of instructions for using the interface.
- Background Info:** A section containing a 'Job Number: 278338' field, which is circled in red. Below it are 'Download Input File' and 'Download Output File' buttons.
- Submit (Guided):** A tab that is currently selected.
- Submit Your Own Files:** A tab.
- Results:** A tab that is circled in red.
- Real Time Output:** A section with a 'Summary' button and a 'Real Time Output' button, both circled in red. To the right of these buttons is the text 'in progress...' and an illustration of two interlocking gears.
- Job Status:** A box displaying 'Job 278338 (Bridges2) ACTIVE' and the command line: 'ethanol OPTIMIZE + HESSIAN 6-311G** B3LYP neutral singlet'. Below this, it states: 'GAMESS supplementary output files will be written to /ocean/projects/cda170005p/ccompute/prod/2' and 'Copying input file 278338.inp to your run's scratch directory...'.

At the bottom right of the interface, the date '04/05/2021' and the page number '11' are visible.

Gambar 11. Tampilan proses job ChemCompute yang sedang berjalan, termasuk nomor job, tab Results, Real Time Output, dan status ACTIVE.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help labkim's Dashboard

HOME / GAMESS / STATUS Hide Instructions

Instructions Download Background Info Submit (Guided) Submit Your Own Files Results

Job Number: 278338 Download Input File Download Output File

Summary Real Time Output

Job 278338 (Bridges2) Success

ethanol OPTIMIZE + HESSIAN 6-311G** B3LYP neutral singlet

```
EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY Mon May 3 19:34:48 2021
TOTAL CPU TIME=      25.6 (      0.4 MIN)
Wait for the gears to stop spinning at the bottom. Please save
your output file instead of opening it
```

04/05/2021 12

Gambar 12. Tampilan hasil job ChemCompute yang berhasil, ditandai status Success dan ringkasan output perhitungan GAMESS.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help labkim's Dashboard

HOME / GAMESS / STATUS Hide Instructions

Instructions [Download](#)

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this survey to help us improve (and help out future students)!

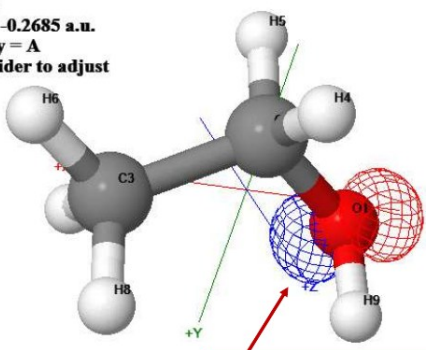
Visualize Your Results

- Write down your job number (6 digit number at the left). Wait for the job to finish.
- Under visualizations choose to view orbitals or vibrations (if calculated in the previous step)
- Measurements can be made by double clicking on an atom to start and stop a measurement. Single click on intermediate atoms to measure angles
- To perform additional calculations using this molecule click "Do More

Energy Units: kJ/mol

Electronic Energy = -406938.71 kJ / mol

MO 13/23
Energy = -0.2685 a.u.
Symmetry = A
Use the slider to adjust



ORBITAL HOMO JSmol

Visualizations

Orbitals kJ / mol	Vibrations cm ⁻¹
15) 188.25 (A)	0.1
14) 97.41 (A)	0.07
13) -704.95 (A)	0.01
12) -849.09 (A)	7.32
11) -970.65 (A)	9.89
10) -1000.05 (A)	15.56
9) -1127.39 (A)	271.39
8) -1182.26 (A)	319.92
7) -1311.17 (A)	421.9
6) -1633.32 (A)	811.08

MO Cutoff 0.19

04/05/2021 13

Gambar 13. Visualisasi orbital HOMO molekul pada ChemCompute, termasuk energi orbital, model molekul, dan daftar orbital.

ChemCompute GAMESS TINKER NAMD Psi4/Jupyter Datasets (beta) Simulations Help labkim's Dashboard

HOME / GAMESS / STATUS [Hide Instructions](#)

Instructions [Download](#)

(1) General Instructions

Before you begin please fill out this survey to help us improve (and help out future students)!

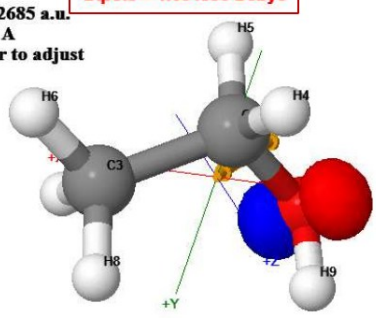
Visualize Your Results

- Write down your job number (6 digit number at the left). Wait for the job to finish.
- Under visualizations choose to view orbitals or vibrations (if calculated in the previous step)
- Measurements can be made by double clicking on an atom to start and stop a measurement. Single click on intermediate atoms to measure angles
- To perform additional calculations usino this molecule click "Do More

Electronic Energy = -406938.71 kJ / mol

MO 13/23
Energy = -0.2685 a.u.
Symmetry = A
Use the slider to adjust

Dipole = 1.654996 Debye



Label Atoms

Visualizations

Orbitals kJ / mol	Vibrations cm ⁻¹
15) 188.25 (A)	0.1
14) 97.41 (A)	0.07
13) -704.95 (A)	0.01
12) -849.09 (A)	7.32
11) -970.65 (A)	9.89
10) -1000.05 (A)	15.56
9) -1127.39 (A)	271.39
8) -1182.26 (A)	319.92
7) -1311.17 (A)	421.9
6) -1633.32 (A)	811.08

MO Cutoff

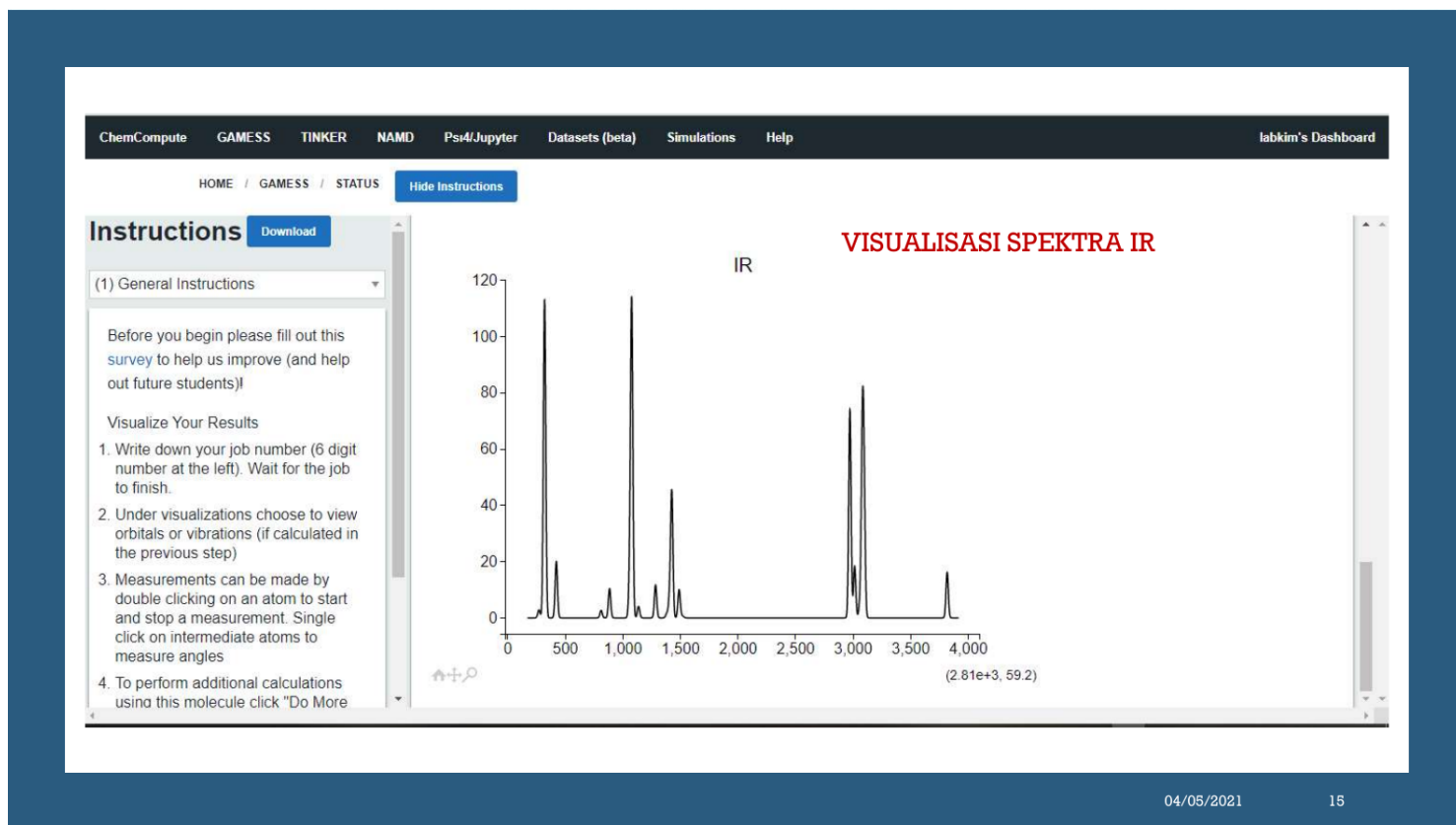
[Solid](#) [Mesh](#)

[Do More Calculations](#)

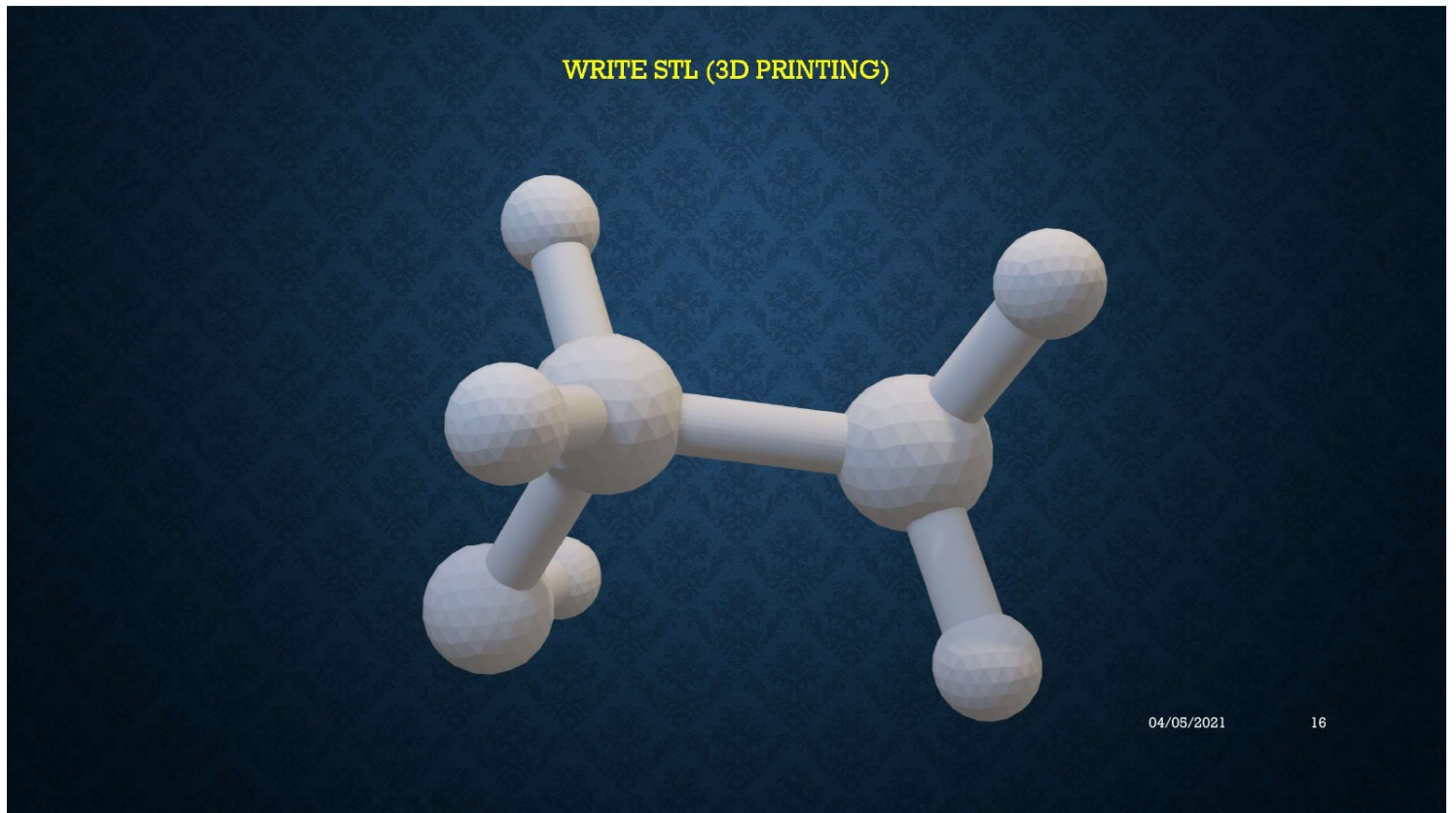
[Dipole Moment](#) [Bond Dipoles](#)

04/05/2021 14

Gambar 14. Visualisasi momen dipol molekul pada ChemCompute, termasuk nilai dipol dan menu Dipole Moment.



Gambar 15. Visualisasi spektra IR hasil perhitungan pada ChemCompute.



Gambar 16. Tampilan fitur Write STL (3D Printing) untuk menghasilkan model molekul tiga dimensi.

ANIMATE MINIMIZATION

Electronic Energy = -406938.71 kJ / mol

10 fps
Frame 1.32

Visualizations

Orbitals	Vibrations
kJ / mol	cm ⁻¹
15) 188.25 (A)	15.56
14) 97.41 (A)	271.39
13) -704.95 (A)	319.92
12) -849.09 (A)	421.9
11) -870.65 (A)	811.08
10) -1080.10 (A)	884.74
9) -1127.39 (A)	1059.85
8) -1182.26 (A)	1076.64
7) -1311.17 (A)	1135.95
6) -1453.39 (A)	1195.95

MO Cutoff: 0.10

Do More Calculations

- Dipole Moment
- Bond Dipoles
- Electrostatic Potential
- IR Vibs
- THERMO
- IR
- Animate Minimization
- Write STL (3D Printing)
- Reset Display

04/05/2021

17

Gambar 17. Tampilan Animate Minimization untuk animasi proses minimisasi struktur molekul.



The author profile for Kasmui is presented on a dark blue background with a golden circuit board pattern. At the top, the word "PENULIS" is written in golden capital letters. Below it is a square portrait of a man wearing a white cap and a blue batik shirt. Underneath the portrait, the name "KASMUI" is written in golden capital letters. To the left of the portrait are icons of a brain and a compass. To the right are icons of an open book and a closed book. Below the name, a list of bullet points describes the author's background and interests. A small golden star icon is located at the bottom right of the profile area.

PENULIS



KASMUI

- Dosen Kimia, Komputasi, IT, dan AI UNNES, serta Praktisi Ilmu Falak;
- Anggota Majelis Tabligh PDM Kota Semarang dan PWM Jawa Tengah;
- Anggota Tim Pengembang Software KHGT MTT PP Muhammadiyah;
- Website pribadi: <https://hisabmu.com/>, <https://kasmui.cloud/>;
- Minat & Hobi: Computer programming.

Software Kimia Komputasi untuk Pembelajaran Kimia

Buku ini adalah panduan komprehensif yang menjembatani dunia kimia dan komputasi untuk pembelajaran yang inovatif. Menjelajahi konsep fundamental dan aplikasi perangkat lunak kimia komputasi terkini, buku ini membekali mahasiswa dan pendidik dengan alat visualisasi molekul yang kuat. Dari simulasi docking obat hingga desain material energi terbarukan, pembaca akan mempelajari cara AI dan pembelajaran mesin merevolusi sains. Dengan fokus pada praktik dan studi kasus, buku ini menginspirasi cara baru untuk memahami struktur dan reaktivitas kimia, serta etika dalam riset digital. Temukan bagaimana komputasi membuka cakrawala baru dalam pendidikan kimia.

