

TUTORIAL SINGKAT

PENGUNAAN GABEDIT, AVOGADRO DAN ORCA

Instalasi Gabedit:

1. Download Gabedit melalui link <https://s.id/softwarekomputasi>
2. Install seperti aplikasi Windows lainnya
3. Jalankan Gabedit

Instalasi dan Penggunaan Avogadro:

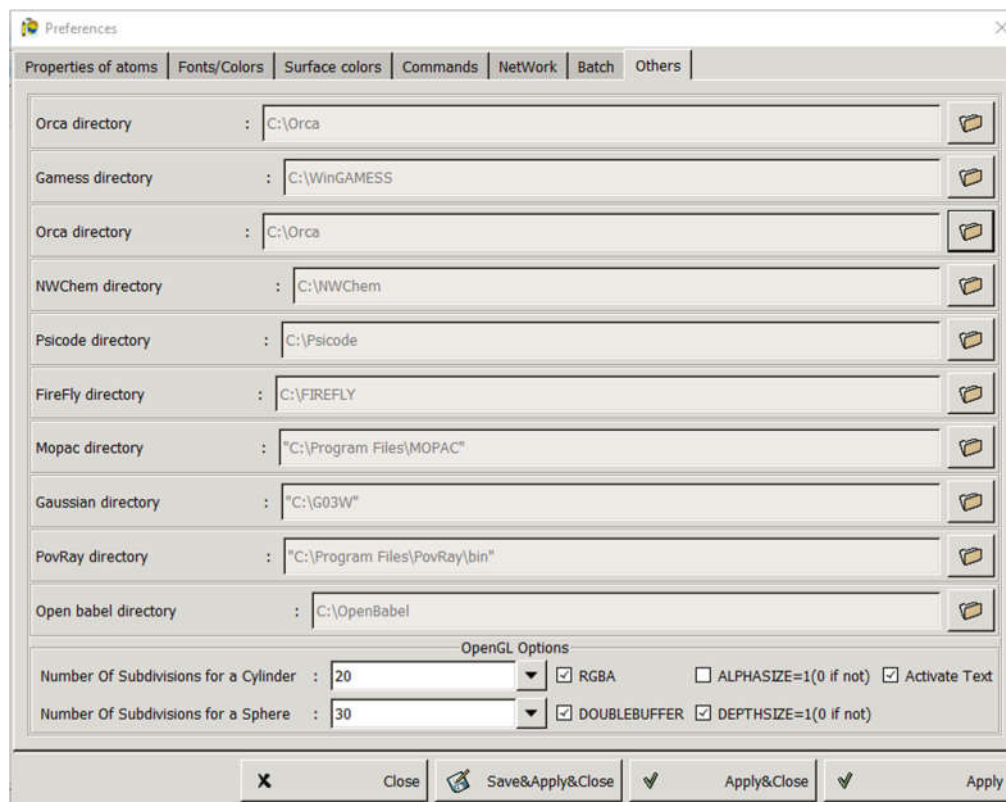
1. Download Avogadro melalui link <https://s.id/softwarekomputasi>
2. Install seperti aplikasi Windows lainnya
3. Jalankan Avogadro, bacalah tutorial Avogadro pada file lain di link <https://s.id/unduh>
4. Buatlah model molekul tertentu dan susunlah file input ORCA yang berekstensi ORCA yaitu berakhiran .inp (misal h2.inp) dengan pilih menu Extensions > Orca > Generate Orca Input, sehingga diperoleh file input seperti berikut sebagai contoh,

```
## Avogadro generated ORCA input file
# Advanced Mode
# File h2.inp
#
! B3LYP OPT FREQ 6-31G(d)

* xyz 0 1
H -1.41867 -0.18873 0.00000
H 0.29311 0.09436 0.00000
*
```

Instalasi dan Penggunaan ORCA:

1. Download ORCA melalui link <https://s.id/softwarekomputasi>
2. Ekstrak file zip ORCA dan tempatkan di C:\ sehingga beralamat di C:\Orca
3. Buka Gabedit yang tadi sudah dijalankan,
4. Pilih menu **Settings > Preferences > Others**,
5. Pada “Orca directory” klik ikon “Open folder” dan masuklah ke alamat folder ORCA, yaitu C:\Orca,
6. Lakukan langkah yang sama untuk “Orca directory di bawahnya seperti gambar di bawah ini,



7. Klik button **Save&Apply&Close**
8. Pengaturan sudah selesai, masuk ke halaman Gabedit utama lagi,
9. Pilih dengan klik menu ORCA di kiri,
10. Pilih menu **File > Open > button Yes**
11. Cari file input ORCA yang sebelumnya sudah dibuat dengan menggunakan Avogadro, jika ketemu lalu klik button **Open**, sehingga isi file-nya masuk ke layar input file, akan muncul nama file h2.inp dan h2.out, awalnya file h2.out masih kosong, akan berisi setelah running ORCA benar,

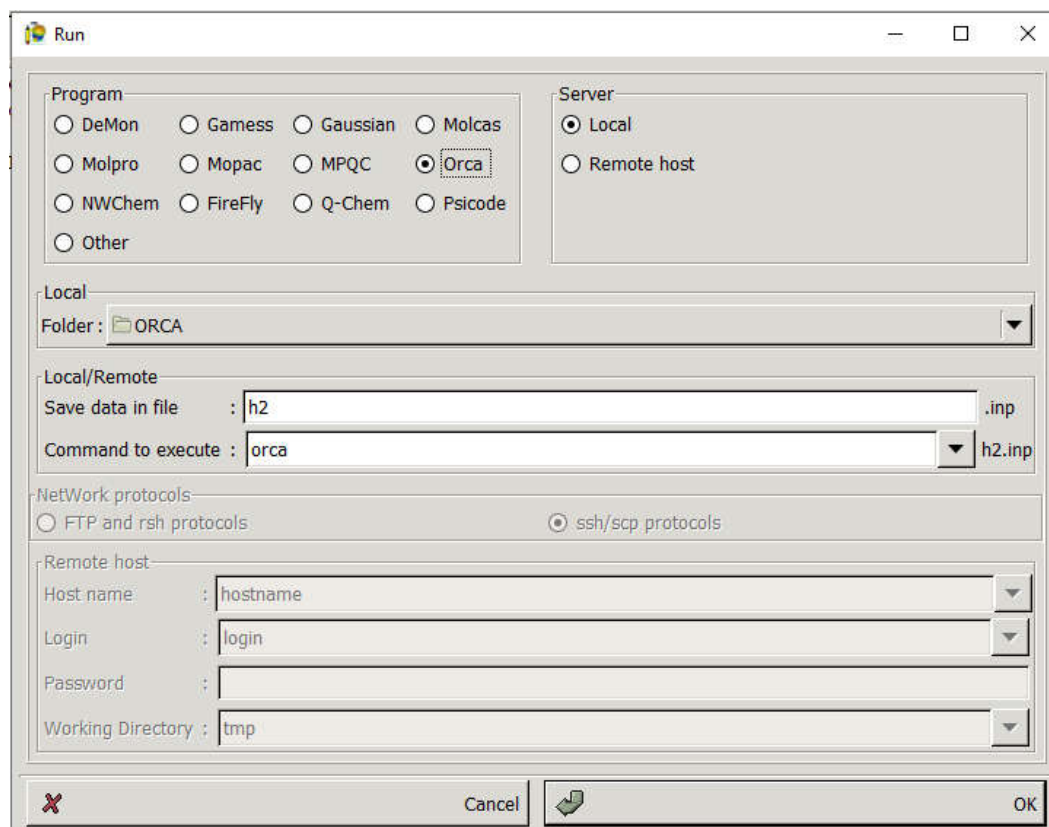
```

h2.inp | h2.out |
## avogadro generated ORCA input file
# Advanced Mode
#
! B3LYP OPT FREQ 6-31G(d)

* xyz 0 1
  H      -1.41867      -0.18873      0.00000
  H       0.29311       0.09436      0.00000
*

```

12. Untuk running pilihlah menu **Run > Run a Computation Chemistry program** dan atur seperti tampilan gambar di bawah ini, yaitu pilih Program **Orca** dan Server **Local**, lainnya biarkan apa adanya, lalu klik **OK** untuk menjalankan,



13. Program akan running terus sampai selesai, untuk mengecek apakah running sudah selesai atau belum maka pilihlah file h2.out dan tekanlah beberapa kali button **Update/end**, apabila sudah muncul tulisan seperti berikut berarti sudah selesai,

****ORCA TERMINATED NORMALLY****
TOTAL RUN TIME: 0 days 0 hours 0 minutes 25 seconds 182 msec

14. Analisislah file h2.out itu, misal melihat besarnya energi entalpi seperti tertulis sebagai berikut:

GIBBS FREE ENTHALPY

The Gibbs free enthalpy is $G = H - T \cdot S$

Total enthalpy ... -1.15527404 Eh

Total entropy correction ... -0.01479285 Eh -9.28 kcal/mol

Final Gibbs free enthalpy ... -1.17006690 Eh

For completeness - the Gibbs free enthalpy minus the electronic energy

G-E(el) ... -0.00135048 Eh -0.85 kcal/mol

Eh = Hartree