

# TUTORIAL KE-I KIMIA KOMPUTASI

Oleh:

Dra. M. Setyorini, M.Si  
Andrian Saputra, S.Pd., M.Sc

## I. Pendahuluan

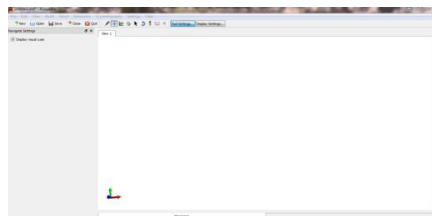
NWChem (*Northwest Computational Chemistry Package*) merupakan salah satu perangkat lunak (*software*) kimia komputasi berbasis *open source* yang banyak digunakan untuk menganalisis sifat-sifat molekul berdasarkan perhitungan mekanika kuantum. Pada tutorial ini diberikan panduan operasional menggunakan software **NWChem**, **NWRun**, **Avogadro**, dan **Jmol** dengan sistem operasi Windows 7.

## II. Perhitungan Molekul Sederhana

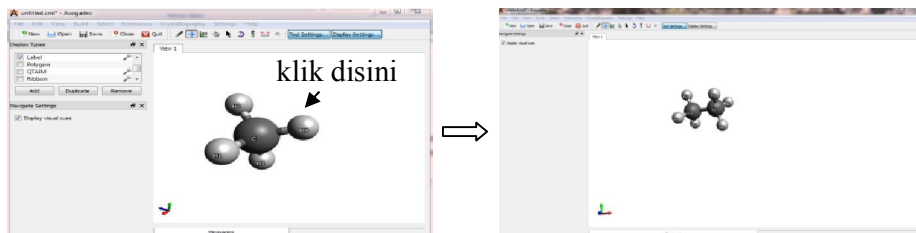
Sebelum melakukan perhitungan, buatlah suatu folder di dekstop komputer Anda masing-masing dengan nama '**latihan**' dan di dalam folder tersebut buatlah 1 (satu) folder baru dengan nama **etana**.

### A. Molekul etana konformasi anti/goyang

1. Klik icon software avogadro  sehingga muncul tampilan berikut:



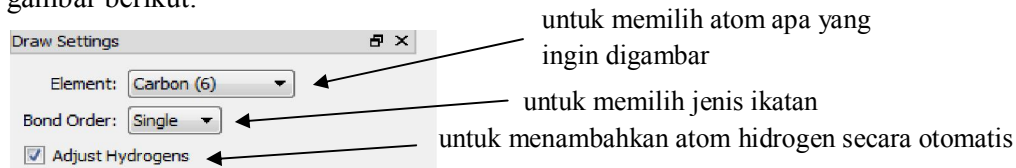
2. pada avogadro pilih icon  kemudian klik pada layar (*background*) avogadro, maka akan dihasilkan molekul metana. Kemudian lakukan klik lagi pada salah satu atom hidrogen metana sehingga dihasilkan molekul etana.



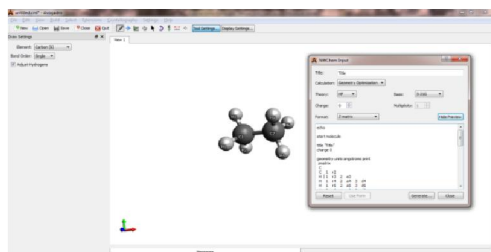
keterangan:

 = atom karbon     = atom hidrogen

3. icon  digunakan untuk menggambar molekul dimana ketika icon tersebut di klik akan tampil pengaturan gambar (*draw setting*) di samping layar Avogadro seperti gambar berikut:

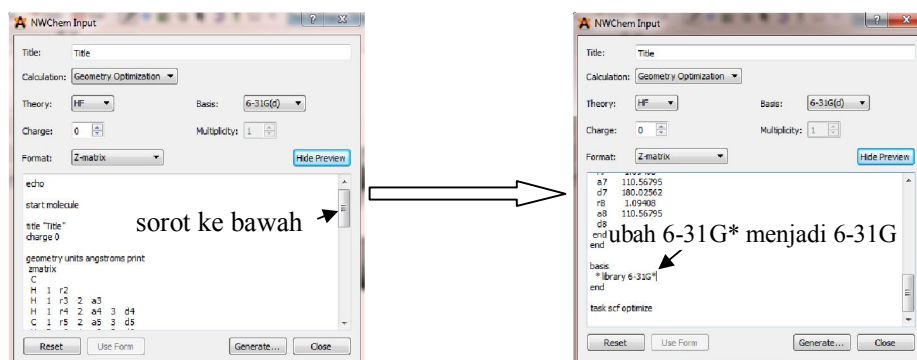


4. untuk memutar molekul, klik icon  dan putar molekul tersebut pada layar.
5. setelah molekul etana tergambar, kemudian pada menu **Extention** pilih **Optimize geometry** untuk mendapatkan struktur yang lebih baik.
6. Pada menu **Ekstention** pilih **NWChem** dan akan muncul kotak dialog yang berisi informasi koordinat molekul etana seperti pada gambar:

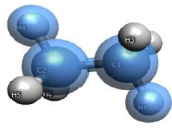


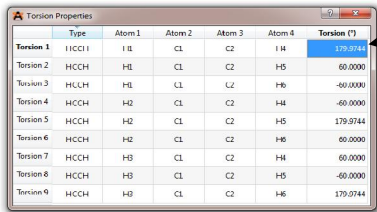
7. Pada kotak dialog,
- menu '**Title**' isikan judul misalnya **etana-anti**
  - menu '**Calculation**' pilih **Optimize Geometry**
  - menu '**Theory**' pilih **HF (Hartree-Fock)**
  - menu '**Format**' pilih **Z-Matrix**
  - menu '**Basis**' pilih **6-31G**

(Keterangan: pilihan untuk basis set 6-31G tidak tersedia di Avogadro, sehingga pada menu '**Basis**' pilih 6-31G(d) sehingga pada kotak input akan terbaca sebagai 6-31G\*, kemudian hapus tanda bintang (\*) seperti pada gambar berikut:

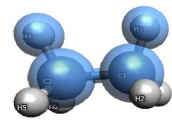


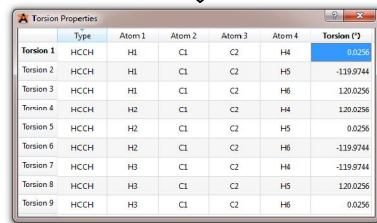
- kemudian klik menu **'Generate'** untuk menghasilkan file koordinat dari struktur etana yang sudah dibuat. Beri nama file dengan nama **'etana-anti.nw'** dan simpan file tersebut di dalam folder **'etana'**.
  - Tutup kotak input dengan klik Close atau tanda icon  tetapi biarkan (jangan ditutup !!!) layar avogadro yang tergambar struktur etana konformasi anti
8. Dari struktur etana konformasi anti pada layar Avogadro yang sudah dibuat sebelumnya, akan dibuat etana eklips dengan cara:
- pilih menu **view → properties → torsion properties**, sehingga muncul kotak dialog yang berisi informasi sudut dihedral pada molekul etana
  - Kemudian **ubahlah salah satu sudut dihedral menjadi 0 lalu tekan Enter** (ket: sudut ini tidak akan persis = 0.0000 dan tidak masalah)



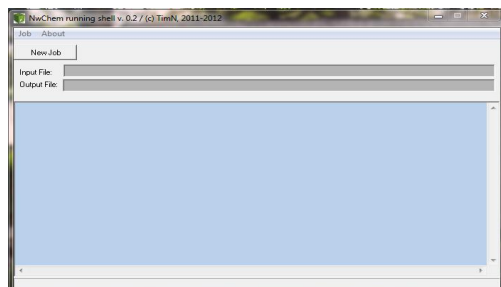




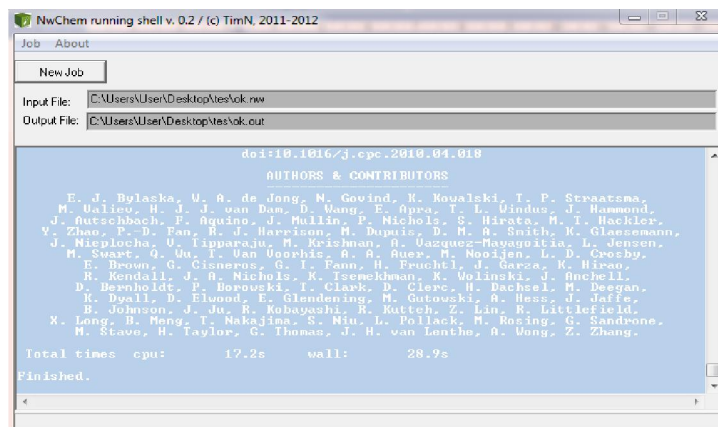




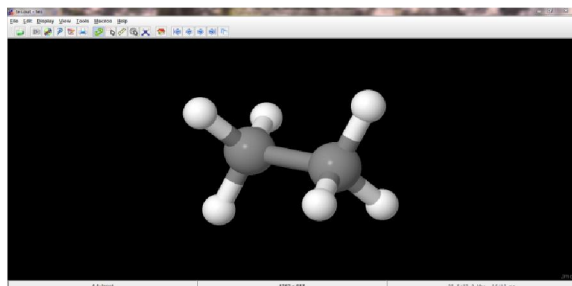
9. Kemudian ikuti prosedur nomor (6) – (7), lalu simpan file etana eklips pada folder **'etana'** dan beri nama **etana-eklips.nw**
10. Tutup kotak input dan tutup layar Avogadro dengan klik icon 
11. Kemudian siap dilakukan perhitungan dengan NWChem **untuk file etana-anti.nw**. Untuk perhitungan Nwchem dengan windows kita menggunakan bantuan software **NWRun**. Klik icon NWRun  hingga muncul tampilan berikut:



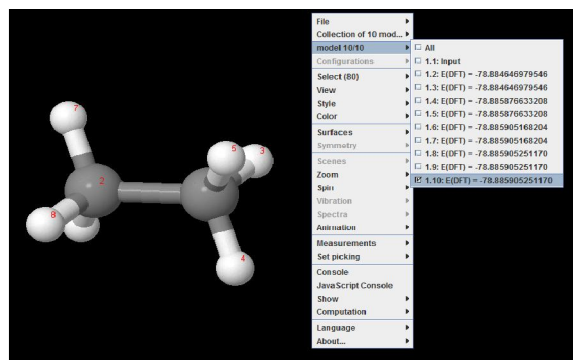
12. Lalu klik **New Job** pada NWRun untuk memasukkan file **etana-anti.nw** dan secara otomatis NWRun akan meminta penyimpanan file output.
13. Simpan file output NWChem dengan nama **etana-anti.out**, lalu secara otomatis akan dilakukan perhitungan NWChem. Perhitungan dinyatakan selesai apabila pada NWRun sudah muncul sitasi penulis NWChem sebagai berikut:



14. Setelah proses perhitungan selesai, tutup layar NWRun.
15. Setelah proses perhitungan selesai, kemudian siap dilakukan analisis menggunakan Jmol dengan cara: klik icon jmol  sehingga muncul layar Jmol
16. Pada layar Jmol, buka file etana hasil optimasi (**etana-anti.out**) dengan cara **file → open → file etana-anti.out** (ingat: file etana-anti.out berada pada dekstop) sehingga muncul gambar berikut:



17. Kemudian klik menu **display → label → number** dilanjutkan dengan **klik kanan → color → labels → red** untuk memunculkan penomoran pada setiap atom
18. Lakukan **klik kanan → model** sehingga dapat dilihat berbagai energi dari energi tertinggi ke energi terendah.  
**Keterangan:** Energi tertinggi merupakan energi etana anti sesuai struktur awal yang digambar, energi terendah merupakan energi etana anti terstabil hasil perhitungan.
19. Pada **model**, **pilih energi terendah (paling bawah)** untuk mendapatkan struktur terstabil hasil perhitungan seperti yang ditunjukkan pada gambar berikut:



energi struktur terstabil  
hasil perhitungan

20. Analisis jarak ikat dilakukan dengan cara:

**klik kanan pada layar → pilih *measurement* → *click for distance measurement***

kemudian pada struktur etana, untuk mengukur panjang ikatan C-H:

**klik pada atom C dan tarik sampai pada atom H yang terikat langsung dengan atom C tersebut.**

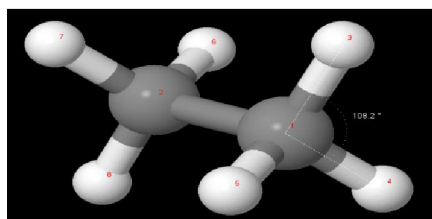
untuk mengukur panjang ikatan C-C, **klik pada atom C dan tarik sampai pada atom C yang lain.** Catat hasil pengamatan pada tabel pengamatan.

21. Kemudian analisis sudut ikat lakukan:

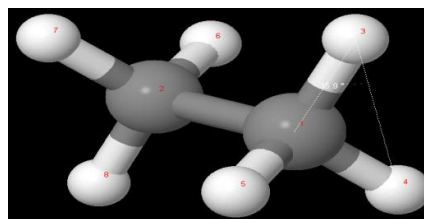
**klik kanan pada layar → pilih *measurement* → *click for angle measurement***

kemudian pada struktur etana, untuk menganalisis sudut ikat H-C-H: **klik pada atom H lalu tarik sampai pada atom C yang mengikat atom H tersebut, lalu tarik lagi sampai pada atom H yang lain (perhatikan gambar).**

**Keterangan:** sudut ikat dianalisis hanya pada sudut yang terbentuk antara dua ikatan dalam struktur etana. Sebagai contoh



Benar

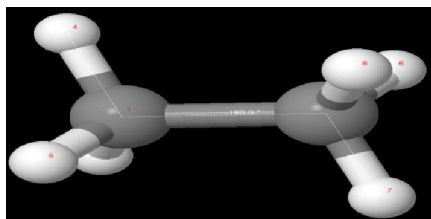


Salah

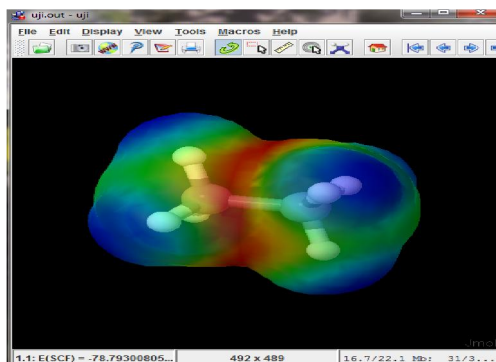
22. Kemudian untuk analisis sudut dihedral lakukan:

**klik kanan pada layar → pilih *measurement* → *click for torsion (dihedral) measurement*** kemudian pada struktur etana, untuk menganalisis sudut dihedral H-C-H-H: **klik pada atom H (atom pertama) lalu tarik sampai pada atom C (atom kedua) lalu tarik lagi sampai pada atom C yang lain (atom ketiga) lalu tarik lagi sampai pada atom H yang lain (atom keempat).**

**keterangan:** sudut dihedral adalah sudut bidang antara 4 atom, atom pertama sebagai rujukan, atom kedua dan ketiga sebagai sumbu putar bidang antara atom keempat dan atom pertama



23. Untuk analisis potensial elektrostatik, **klik kanan** → **model** → **pilih E(scf) 1.2** kemudian **klik kanan** → **pilih surface** → **Molecular electrostatic potential (range ALL)**, maka akan muncul tampilan sebagai berikut:



Hasil analisis potensial elektrostatik

24. Dari hasil gambar potensial elektrostatik, export gambar tersebut ke dalam format JPG dengan cara: **File** → **Export** → **Export Image**, lalu **simpan gambar pada folder etana dan beri nama etana-anti-pe.jpg**
25. untuk menampilkan bentuk molekul, anda dapat menggunakan berbagai bentuk seperti bentuk *spacefill*, *ball and stick*, dan *wireframe*. Caranya **klik kanan pada layar Jmol** → **style** → **scheme** → **pilih salah satu (*spacefill*, *ball and stick*, atau *wireframe*)**.
26. **Catatlah** hasil perhitungan **dalam Ms. Word** dengan **format tabel** dan **simpan file Word** ini dalam folder “**latihan**” dan beri nama file dengan nama “**data**”

| Nama molekul      | Energi (kJ/mol) | Panjang ikatan | Sudut ikatan | Sudut dihedral | Gambar potensial elektrostatik |
|-------------------|-----------------|----------------|--------------|----------------|--------------------------------|
| etana anti/goyang |                 | C-H            | H-C-H        | H-C-C-H        |                                |
|                   |                 | C-C            |              |                |                                |
|                   |                 |                |              |                |                                |

Keterangan: (1 Hartree= 2625,49962 kJ/mol)

## **B. Molekul etana konformasi eklips**

27. Sebelumnya anda sudah membuat file input untuk etana eklips dengan nama **etana-eklips.nw** yang disimpan di dalam folder '**etana**' didekstop komputer anda masing – masing. **Bukalah file etana-eklips.nw** tersebut menggunakan **notepad** kemudian **ubahlah/tambahlah** pada file tersebut menggunakan perintah seperti berikut ini:

echo

start molecule

title "Title"

charge 0

geometry units angstroms print

zmatrix

C1

C2 C1 r2

H3 C1 r3 C2 a3

H4 C1 r4 C2 a4 H3 d4

H5 C1 r5 C2 a5 H3 d5

H6 C2 r6 C1 a6 H3 d6

H7 C2 r7 C1 a7 H3 d7

H8 C2 r8 C1 a8 H3 d8

variables

r2 = 1.51206

r3 = 1.09417

a3 = 110.56194

r4 = 1.09437

a4 = 110.54897

d4 = 240.03908

r5 = 1.09371

a5 = 110.59294

d5 = 120.02972

r6 = 1.09371

a6 = 110.59294

d6 = 0.02562

r7 = 1.09437

a7 = 110.54897

d7 = 239.99063

r8 = 1.09417

a8 = 110.56194

d8 = 120.02971

end

Ini adalah koordinat z-matriks untuk etana anti/goyang dengan keterangan sebagai berikut:

C1, C2, ... adalah atom karbon etana sesuai dengan penomoran pada gambar tampilan di avogadro

H1, H2, ... adalah atom hidrogen etana sesuai dengan penomoran pada gambar tampilan di avogadro

r2, r3, ... adalah variabel panjang ikatan

a3, a4, ... adalah variabel sudut ikatan

d4, d5, ... adalah variabel sudut dihedral

sisipkan tulisan "constant" dan "end" diatas sehingga menjadi seperti berikut ini:

constant  
d8 = 120.02971  
end

basis

\* library 6-31G

end

} Kode perintah basis set (kumpulan fungsi gelombang) yang ingin dipakai misal: 6-31G, 6-311G, dan lain-lain

task scf optimize → perintah untuk proses scf (*self consistent field*)

**File setelah diubah akan menjadi seperti berikut ini:**

echo

start molecule

title "Title"

charge 0

geometry units angstroms print

zmatrix

C1

C2 C1 r2

H3 C1 r3 C2 a3

H4 C1 r4 C2 a4 H3 d4

H5 C1 r5 C2 a5 H3 d5

H6 C2 r6 C1 a6 H3 d6

H7 C2 r7 C1 a7 H3 d7

H8 C2 r8 C1 a8 H3 d8

variables

r2 = 1.51206

r3 = 1.09417

a3 = 110.56194

r4 = 1.09437

a4 = 110.54897

d4 = 240.03908

r5 = 1.09371

a5 = 110.59294

d5 = 120.02972

r6 = 1.09371

a6 = 110.59294

d6 = 0.02562

r7 = 1.09437

a7 = 110.54897

d7 = 239.99063

r8 = 1.09417

a8 = 110.56194

**constant**

**d8 = 120.02971**

**end**

end



kode ini dimaksudkan untuk membuat salah satu sudut dihedral molekul etana eklips (**d8**) konstant sehingga pada saat perhitungan proses sudut dihedral ini tidak berubah

basis

\* library 6-31G

end

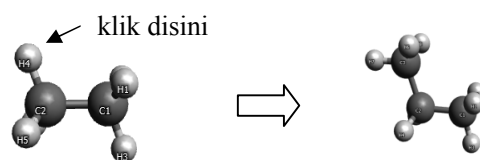
task scf optimize

28. Kemudian **“save”** file yang telah dimodifikasi tersebut (**CTRL+S**) dan lakukan perhitungan NWChem dengan mengikuti langkah yang sama dengan nomor (11) – (14).
29. Catatlah hasil perhitungan pada file **“data”** (file Word) seperti pada langkah nomor (26) dengan **kolom nama molekul** diisi dengan nama **etana eklips**

### C. Latihan menggambar dengan Avogadro

Menggambar molekul propana,

30. **Gambarlah molekul etana** terlebih dahulu menggunakan **Avogadro** kemudian **pada draw setting** seperti pada nomor (3), **pilih element** lalu pilih **Carbon (C)**, kemudian **klik pada salah satu atom H yang terikat pada salah satu atom C etana** sedemikian sehingga atom H tersebut akan diganti menjadi atom C. **Simpanlah** file tersebut dengan nama **propana-1**.



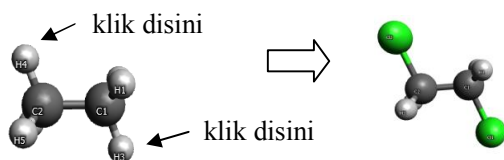
31. Propana memiliki 2 konformasi. untuk mengubah konformasi molekul ini pilih menu **view → properties → torsion properties**, sehingga muncul kotak dialog yang berisi informasi sudut dihedral pada molekul propana, kemudian **ubahlah sudut dihedral (torsion properties) H-C-C-C** awal dengan menambah **60°** lalu **tekan Enter**. Gambar yang dihasilkan disimpan dengan nama **propana-2**
32. Gambar yang telah dihasilkan, di **“printscreen”** atau menggunakan **snipping tool** lalu pada file **“data”** (file Word) buatlah tabel dan masukkan gambar tersebut:

Contoh tabel:

| No | Nama molekul | Gambar |
|----|--------------|--------|
|    |              |        |
|    |              |        |
|    |              |        |
|    |              |        |

Menggambar molekul 1,2-dikloroetana

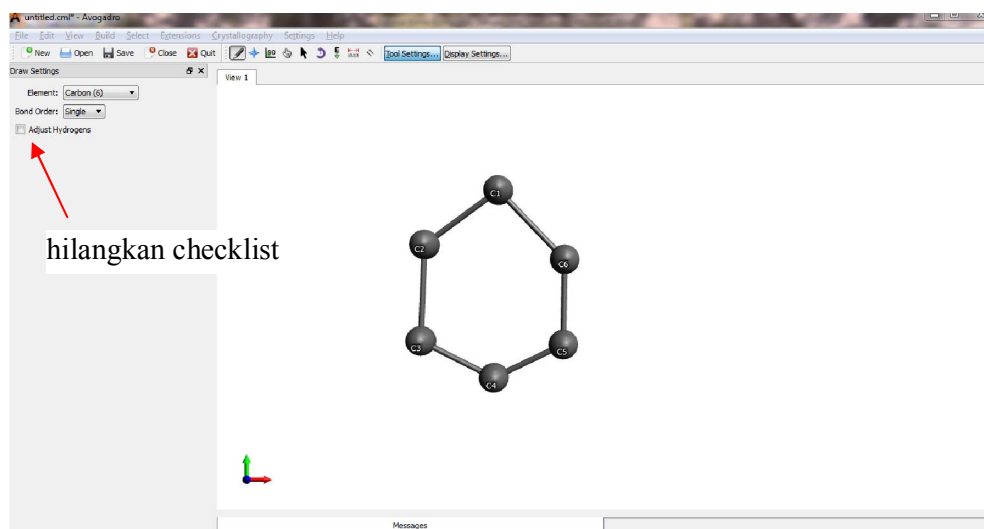
33. **gambarlah molekul etana** terlebih dahulu menggunakan **Avogadro** kemudian **pada draw setting** seperti pada nomor (3), **pilih element** lalu pilih **Chlorine (Cl)**, kemudian **klik pada salah satu atom H yang terikat pada masing-masing atom C etana** sedemikian sehingga atom H tersebut akan diganti menjadi atom **Cl**. **Simpanlah** file tersebut dengan nama **1,2-dikloroetana-1**.



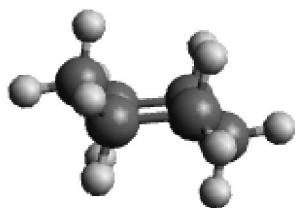
34. 1,2-dikloroetana memiliki lebih dari satu konformasi, untuk mengubah konformasi molekul ini pilih menu **view** → **properties** → **torsion properties**, sehingga muncul kotak dialog yang berisi informasi sudut dihedral pada molekul 1,2-dikloroetana, kemudian **ubahlah sudut dihedral (torsion properties) Cl-C-C-Cl awal dengan menambah 60° lalu tekan Enter**. Gambar yang dihasilkan disimpan dengan nama 1,2-dikloroetana-2
35. Prediksilah konformasi lain dari 1,2-dikloroetana dengan penambahan sudut torsi setiap 60° (**sebagai tugas dirumah**)

#### D. Menggambar molekul siklik (topik: Sikloheksana)

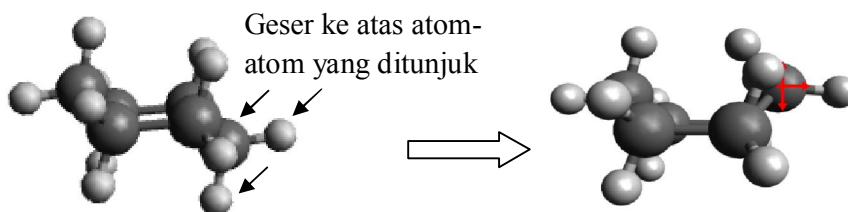
36. **Gambarlah struktur siklik enam secara sembarang** menggunakan icon  (hilangkan tanda checklist ☒ penambahan atom hidrogen otomatis) seperti yang ditunjukkan pada gambar berikut:



37. Kemudian pilih menu **Build** → **Add Hydrogen** untuk menambahkan atom hidrogen pada struktur yang sudah dibentuk. **Lakukan kembali proses optimasi geometri seperti langkah nomor (5)** sehingga didapatkan struktur **sikloheksana konformasi kursi** seperti yang ditunjukkan pada gambar berikut:



38. Ulangi langkah pada nomor (32) pada gambar sikloheksana yang dihasilkan ke dalam tabel hasil pengamatan
39. Untuk menggambar sikloheksana konformasi perahu, gunakan manipulation tool dengan klik icon  kemudian geser atom C dan H (seperti pada gambar) ke atas sehingga membentuk konformasi perahu seperti pada gambar berikut



40. Kemudian lakukan kembali optimasi geometri seperti pada langkah nomor (5) sehingga akan dihasilkan sikloheksana dengan konformasi perahu.
41. Ulangi langkah pada nomor (32) pada gambar sikloheksana yang dihasilkan ke dalam tabel hasil pengamatan
42. Latihan:

**Gambarlah** molekul berikut dengan konformasi kursi serta bentuk cis dan trans jika ada.

- a. Untuk 1-kloro-sikloheksana

Pada molekul sikloheksana yang telah dibuat, gantilah satu atom H dengan atom *Cl* (prediksi ada berapa kemungkinan konformer)

- b. 1,2-dikloro-sikloheksana, 1,3-dikloro-sikloheksana, dan 1,4-dikloro-sikloheksana **(untuk dikerjakan di rumah)**

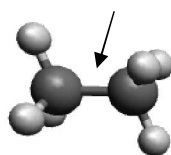
Pada molekul sikloheksana yang telah dibuat, gantilah dua atom H dengan atom *Cl* (prediksi apakah ditemukan keisomeran geometri cis-trans)

43. Ulangi langkah pada nomor (32) pada gambar sikloheksana yang dihasilkan ke dalam tabel hasil pengamatan

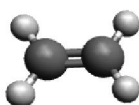
**E. Menggambar molekul dengan ikatan rangkap**

44. **Gambarlah** molekul etana anti dan **pada ikatan C-C diklik satu kali** sehingga akan dihasilkan etena (rangkah dua) seperti pada gambar berikut:

klik pada bagian ini



etana



etena

45. Latihan:

Gambarlah molekul cis-1,2-dikloroetena, trans-1,2-dikloroetena

46. **Untuk dikerjakan dirumah,** gambarlah molekul 2-bromo-1-kloro propena, dan 2-bromo-3-kloro-butena.
47. Ulangi langkah pada nomor (32) pada gambar sikloheksana yang dihasilkan ke dalam tabel hasil pengamatan.

**GOOD LUCK...☺**