

Melampaui Bola dan Tongkat: Mendesain Ulang Pedagogi Kimia untuk Era Kuantum Melalui Visualisasi Komputasi

Ringkasan Eksekutif

Laporan ini membahas kesenjangan konseptual yang kritis antara praktik pengajaran kimia di tingkat menengah dan sarjana—yang sebagian besar masih bergantung pada model *ball-and-stick* (bola-dan-tongkat) dari abad ke-19—dengan realitas konseptual kimia modern, yang sepenuhnya didasarkan pada mekanika kuantum. Laporan ini berargumen bahwa model fisik tradisional tersebut bukan hanya simplifikasi yang tidak berbahaya, tetapi telah terbukti secara empiris sebagai sumber aktif miskonsepsi pedagogis. Model-model ini mengaburkan pemahaman siswa tentang konsep fundamental seperti ikatan kimia, distribusi muatan, dan reaktivitas. Dengan memanfaatkan bukti dari studi kognitif, termasuk teknologi pelacakan mata (*eye-tracking*), laporan ini menunjukkan bagaimana model *ball-and-stick* secara sistematis mengarahkan siswa pada kesimpulan yang keliru mengenai fenomena elektronik.

Sebagai solusi, laporan ini memetakan fondasi konseptual era kuantum yang seharusnya diajarkan secara visual, dengan fokus utama pada orbital molekuler (MOs) dan, yang paling penting, peta potensial elektrostatik (ESP maps). Peta-peta ini berfungsi sebagai jembatan pedagogis yang ideal, menggantikan model yang salah dengan representasi berbasis kuantum yang akurat secara visual untuk memprediksi reaktivitas. Laporan ini kemudian menyediakan tinjauan komprehensif dan panduan praktis untuk serangkaian perangkat lunak komputasi gratis (*open-source*) yang dapat diakses oleh pendidik (misalnya, Avogadro, JSmol, WebMO) serta platform komersial standar industri (misalnya, Spartan, Gaussian/GaussView).

Pada akhirnya, laporan ini tidak mengadvokasi eliminasi total model fisik. Sebaliknya, laporan ini mengusulkan pergeseran ke **model pedagogi hibrida** yang terbukti secara empiris. Model ini merekomendasikan penggunaan model fisik secara taktis untuk membangun pemahaman spasial-taktil (misalnya, stereokimia), sambil secara bersamaan dan terintegrasi menggunakan alat komputasi untuk memvisualisasikan realitas elektronik yang tidak terlihat (misalnya, reaktivitas, polaritas, energi). Laporan ini ditutup dengan seruan untuk bertindak bagi para pendidik, dosen, dan pembuat kurikulum di Indonesia untuk segera mengadopsi dan mengintegrasikan alat serta strategi modern ini, guna memastikan bahwa siswa dilengkapi dengan pemahaman yang akurat tentang dunia molekuler di era komputasi.

1. Pendahuluan: Kesenjangan Konseptual dalam Pendidikan Kimia Modern

Kimia sebagai disiplin ilmu profesional telah bertransformasi secara fundamental selama setengah abad terakhir. Kimia modern, pada intinya, adalah ilmu komputasi dan kuantum.¹ Metode seperti Teori Fungsi Kerapatan (DFT) dan pemodelan permukaan energi potensial bukan lagi alat khusus penelitian, melainkan alat kerja standar untuk memprediksi struktur, energi, spektra, dan reaktivitas.³

Namun, sebuah paradoks yang mencolok—dan secara pedagogis berbahaya—tetap ada. Di satu sisi, para profesional dan peneliti kimia memanipulasi orbital molekuler di layar komputer. Di sisi lain, ruang kelas pengantar dan laboratorium sekolah menengah (SMA) masih didominasi oleh alat peraga yang secara konseptual tidak berubah sejak August Wilhelm von Hofmann pertama kali memperkenalkannya di Royal Institution of Great Britain pada tahun 1865.⁴

Validasi atas keluhan yang ada saat ini sangat jelas: proliferasi perangkat lunak visualisasi 3D yang kuat, intuitif, dan seringkali gratis (seperti Avogadro ⁷, JSmol ⁸, dan VMD ⁹) telah menghilangkan hampir semua hambatan teknis dan biaya untuk adopsi. Ketergantungan yang berkelanjutan pada model *ball-and-stick* fisik bukan lagi sebuah kebutuhan yang didorong oleh sumber daya, melainkan sebuah pilihan pedagogis yang semakin tidak dapat dipertahankan.

Laporan ini berargumen bahwa transisi ke alat visualisasi komputasi bukanlah sekadar "tambahan" kurikulum yang bagus atau modernisasi untuk kepentingan modernisasi. Ini adalah **keharusan mendesak** untuk menghentikan penyebaran miskonsepsi yang terdokumentasi dengan baik. Sebagaimana akan ditunjukkan, model *ball-and-stick* tidak hanya menyederhanakan; model ini secara aktif "mengaburkan konsep yang benar" tentang sifat fundamental atom dan ikatan kimia. Laporan ini akan menyediakan landasan teoretis, bukti kognitif yang memberatkan, dan panduan praktis bagi para pendidik di Indonesia untuk "mengubah tool" mereka secara efektif, guna menyelaraskan pengajaran mereka dengan realitas mekanika kuantum di era modern.

2. Anatomi Miskonsepsi: Bagaimana Model Bola-dan-Tongkat Gagal di Era Kuantum

Untuk memahami mengapa perubahan diperlukan, pertama-tama kita harus menganalisis secara kritis keterbatasan dan bahaya dari alat pedagogis yang dominan saat ini.

2.1. Konteks Sejarah: Model sebagai Artefak Abad ke-19 yang Berharga

Penting untuk mengakui, seperti yang telah dikemukakan, bahwa model *ball-and-stick* adalah inovasi pedagogis yang revolusioner pada masanya.⁴ Sebelum pertengahan abad ke-19, konsep struktur molekuler sebagian besar bersifat hipotetis. Model Hofmann, dan kemudian model yang lebih canggih seperti CPK (Corey-Pauling-Koltun) yang dikembangkan di Caltech¹⁰, memungkinkan para ilmuwan untuk pertama kalinya memvisualisasikan konektivitas atom dan, yang terpenting, geometri tiga dimensi dasar. Model-model ini sangat penting untuk pengembangan teori struktur, isomerisme, dan stereokimia.⁶

Nilai historis mereka tidak terbantahkan. Namun, model-model ini dirancang untuk merepresentasikan pemahaman kimia *sebelum* revolusi kuantum. Mereka adalah alat dari era yang berbeda, dan keterbatasan mereka (misalnya, representasi ikatan yang kaku, skala yang tidak konsisten antar elemen) sudah diketahui bahkan saat mereka dikembangkan.¹²

2.2. Keterbatasan yang Melekat: Apa yang Gagal Ditampilkan oleh "Bola" dan "Tongkat"

Kegagalan model *ball-and-stick* sebagai alat pengajaran modern tidak terletak pada apa yang ditunjukkannya (konektivitas), tetapi pada semua hal fundamental yang *tidak* ditunjukkannya:

- **Tidak Ada Elektron Valensi:** Model ini sama sekali tidak menunjukkan elektron.¹³ Padahal, elektron valensi adalah "mata uang" dari semua ikatan dan reaksi kimia. Sebuah model yang menghilangkan pelaku utama secara inheren tidak lengkap.¹⁴
- **Tidak Ada Distribusi Elektron/Muatan:** Konsep paling penting dalam reaktivitas—polaritas, muatan parsial, dan kepadatan elektron—tidak mungkin

direpresentasikan.¹⁵ Semua ikatan terlihat sama netralnya.

- **Tidak Ada Orde Ikatan atau Resonansi:** Ikatan tunggal, ganda, dan tiga seringkali direpresentasikan oleh tongkat dengan panjang yang sama atau pegas yang membingungkan.¹³ Konsep delokalisasi elektron (misalnya, dalam cincin benzena) tidak mungkin divisualisasikan secara akurat.
- **Sifat Statis:** Model ini kaku dan tidak bernyawa. Mereka gagal total untuk menyampaikan sifat dinamis molekul yang sesungguhnya, yang terus-menerus bervibrasi, berotasi, dan bergerak.¹⁵
- **Batas Arbitrer:** Representasi ikatan sebagai "tongkat" yang menghubungkan dua "bola" bersifat arbitrer.¹⁷ Ini memperkuat gagasan bahwa ikatan adalah entitas fisik yang terpisah, bukan hasil dari tumpang tindih awan elektron yang difus.

2.3. Miskonsepsi yang Dihasilkan: Dari Simplifikasi Menjadi Kesalahan Konseptual

Keterbatasan yang diuraikan di atas bukanlah ketidaknyamanan akademis; keterbatasan tersebut secara langsung *menyebabkan* miskonsepsi yang mengakar dan sulit dihilangkan pada siswa.

- **Miskonsepsi 1: Atom adalah Bola Biliar Padat.** Representasi "bola" memperkuat gagasan usang zaman Daltonian bahwa atom adalah bola padat yang tidak dapat ditembus. Ini secara langsung bertentangan dengan konsep fundamental mekanika kuantum, di mana atom adalah inti positif yang dikelilingi oleh *awan probabilitas* elektron yang difus (orbital).¹⁸
- **Miskonsepsi 2: Ikatan adalah Objek Fisik yang Kaku.** Representasi "tongkat" menanamkan gagasan bahwa ikatan adalah benda fisik, seperti pasak, yang menahan atom-atom bersama-sama.¹⁷ Ini membuat pengajaran konsep yang benar—bahwa ikatan kovalen adalah *tumpang tindih* orbital molekuler dan berbagi kepadatan elektron—menjadi pertempuran yang berat.
- **Miskonsepsi 3: Ikatan adalah Diktotomi (Ionik vs. Kovalen).** Karena model *ball-and-stick* tidak dapat menunjukkan distribusi muatan¹⁵, model ini mendorong pengajaran ikatan secara biner: model "tongkat" untuk kovalen (berbagi) dan model tanpa tongkat (ion terpisah) untuk ionik (transfer). Ini gagal total dalam mengajarkan konsep modern yang esensial tentang *kontinum ikatan*—gagasan bahwa hampir semua ikatan adalah polar-kovalen, yang berada di antara dua ekstrem ideal.²⁰

Kekhawatiran ini bukanlah teoretis. Sebuah studi di Indonesia, khususnya di SMA Negeri Kota Banjarmasin, secara eksplisit mengidentifikasi miskonsepsi yang meluas di kalangan siswa kelas XI mengenai bilangan kuantum, konfigurasi elektron, dan orbital.²¹ Studi tersebut

menunjuk langsung pada **guru dan buku teks kimia** sebagai penyebab utama miskonsepsi ini. Ini adalah bukti langsung bahwa alat pengajaran (buku teks yang penuh dengan gambar *ball-and-stick* 2D) dan metode pengajaran terkait (yang didasarkan pada model-model ini) secara aktif berkontribusi pada pemahaman yang keliru di kalangan audiens target laporan ini. Keterbatasan media pembelajaran yang mendukung konsep mikroskopis 3D adalah masalah yang terdokumentasi dalam pendidikan kimia di Indonesia.²²

2.4. Bukti Kognitif: "Pelacakan Mata" Menunjukkan Bagaimana Model Menyesatkan Siswa

Bukti paling memberatkan terhadap ketergantungan yang berlebihan pada model *ball-and-stick* berasal dari studi kognitif yang menggunakan teknologi *eye-tracking* (pelacakan mata). Studi-studi ini memantau secara tepat di mana mata siswa melihat ketika mereka disajikan dengan berbagai representasi molekuler untuk memecahkan masalah kimia.²³

Temuan-temuan dari studi ini sangat jelas dan merupakan inti dari argumen ini:

1. **Ketergantungan pada yang Familiar:** Ketika disajikan secara bersamaan dengan model *ball-and-stick* (B&S) yang familiar dan model *Electrostatic Potential (ESP) map* (representasi berbasis kuantum yang baru), siswa—terutama yang memiliki pengetahuan awal rendah—secara signifikan lebih banyak menghabiskan waktu melihat model B&S.²⁴
2. **Korelasi dengan Kesalahan:** Ini adalah temuan kritis. Untuk pertanyaan-pertanyaan yang lebih sulit terkait *reaktivitas* (misalnya, "Di mana situs pada molekul ini yang akan diserang oleh proton?" atau "Di mana hidroksida akan menyerang?"), siswa yang menghabiskan *lebih banyak waktu* melihat model B&S *lebih mungkin untuk menjawab dengan salah*.²³
3. **Perilaku Ahli:** Sebaliknya, siswa yang berkinerja tinggi dan para ahli dengan cepat belajar untuk *mengabaikan* model B&S untuk pertanyaan reaktivitas. Mereka memfokuskan perhatian visual mereka hampir secara eksklusif pada *ESP map*, karena peta tersebut mengandung informasi yang relevan untuk menjawab pertanyaan (yaitu, distribusi muatan).²³

Implikasi dari temuan ini sangat mendalam. Model *ball-and-stick* bukan hanya netral atau tidak lengkap; model ini **secara aktif berbahaya** untuk mengajarkan reaktivitas. Model ini bertindak sebagai "penyangga kognitif" yang familiar yang memberikan siswa *kepercayaan diri yang salah*. Siswa *berpikir* bahwa mereka dapat menemukan jawaban atas pertanyaan elektronik ("Di mana muatan negatif?") dalam model B&S, padahal informasi tersebut secara fundamental tidak ada. Ini adalah demonstrasi empiris yang sempurna tentang bagaimana model ini "mengaburkan konsep yang benar."

3. Fondasi Konseptual Era Kuantum: Apa yang "Seharusnya" Dilihat Siswa

Jika model *ball-and-stick* adalah representasi yang salah untuk mengajarkan konsep modern, lalu apa "konsep yang benar" yang harus menggantikannya? Era mekanika kuantum mendefinisikan ulang atom dan ikatan, dan visualisasi komputasi modern memungkinkan kita untuk *melihat* konsep-konsep ini untuk pertama kalinya.

3.1. Dari "Bola" ke "Awan Probabilitas": Visualisasi Orbital Atom

Transisi konseptual pertama adalah menjauh dari model "bola biliar" atom.

- **Konsep yang Harus Diajarkan:** Bilangan kuantum (n , l , m) bukanlah "alamat" atau "lintasan" elips untuk elektron, seperti yang sering disalahartikan.¹⁹ Bilangan kuantum adalah parameter matematis yang muncul dari solusi persamaan Schrödinger. Mereka mendefinisikan **tingkat energi** (n , ukuran), **bentuk** (l , subkulit s , p , d , f), dan **orientasi spasial** (m , misalnya p_x , p_y , p_z) dari *awan probabilitas* elektron, yang dikenal sebagai orbital atom.¹⁸
- **Rekomendasi Alat:** Guru harus beralih dari menggambar lingkaran konsentris (model Bohr) atau menunjukkan bola plastik, ke penggunaan visualisasi komputasi yang sebenarnya dari bentuk-bentuk orbital ini. Laboratorium "Atomic Orbitals" yang tersedia melalui server WebMO²⁸ atau fitur visualisasi orbital di Avogadro²⁹ dapat menampilkan bentuk 3D yang benar dari orbital $1s$, $2p$, $3d$, dan seterusnya.

3.2. Dari "Tongkat" ke "Tumpang Tindih Orbital": Visualisasi Ikatan & Hibridisasi

Transisi konseptual kedua adalah menjauh dari model "tongkat" untuk ikatan.

- **Konsep yang Harus Diajarkan:** Ikatan kimia kovalen bukanlah objek fisik. Ikatan adalah hasil dari *tumpang tindih* orbital-orbital atom untuk membentuk orbital-orbital molekul (MOs), di mana kepadatan elektron dibagi antara dua (atau lebih) inti.³¹ Hibridisasi (misalnya, sp , sp^2 , sp^3) adalah *model* teoretis yang kuat—bukan fenomena fisik yang dapat diamati—yang digunakan untuk menjelaskan *geometri molekuler* yang teramati

(misalnya, bentuk tetrahedral dari CH₄ atau sudut ikatan 109.5 derajat).³²

- **Rekomendasi Alat:** Pendidik dapat menggunakan perangkat lunak seperti Avogadro untuk membangun molekul sederhana (misalnya, etana C_2H_6 , etena C_2H_4 , etuna C_2H_2). Setelah optimasi geometri cepat, siswa dapat secara visual mengukur sudut ikatan dan panjang ikatan yang dihasilkan, secara langsung menghubungkan konsep teoretis hibridisasi dengan bentuk 3D yang teramati.³⁵

3.3. Jembatan Pedagogis Kunci: Peta Potensial Elektrostatik (ESP Maps)

Untuk tujuan praktis di kelas kimia umum dan organik, ini adalah konsep visual yang paling penting untuk menggantikan ketergantungan pada model *ball-and-stick* untuk reaktivitas.

- **Apa itu ESP Map?** Peta Potensial Elektrostatik (ESP map), juga dikenal sebagai peta potensial energi elektrostatik, adalah visualisasi 3D dari distribusi muatan total dalam sebuah molekul.³⁶ Peta ini dihitung menggunakan metode mekanika kuantum. Peta ini biasanya direpresentasikan sebagai "permukaan" molekul (seringkali didefinisikan oleh permukaan kepadatan elektron total) yang diwarnai berdasarkan nilai potensial elektrostatik di setiap titik di permukaan tersebut.³⁶
- **Bagaimana Membacanya (Pedagogi):** Interpretasi visualnya sangat intuitif dan kuat. Permukaan diberi kode warna menggunakan spektrum pelangi:
 - **Merah:** Mewakili potensial elektrostatik *terendah*. Ini adalah area yang *kaya elektron* (kepadatan elektron tinggi) dan bermuatan parsial negatif.³⁶ Ini adalah **situs nukleofilik**—tempat yang "disukai" oleh muatan positif (seperti proton).
 - **Biru:** Mewakili potensial elektrostatik *tertinggi*. Ini adalah area yang *miskin elektron* (kepadatan elektron rendah) dan bermuatan parsial positif.³⁶ Ini adalah **situs elektrofilik**—tempat yang akan "diserang" oleh nukleofil (sumber elektron).
 - **Hijau/Kuning:** Mewakili area netral atau non-polar di antara dua ekstrem.³⁸

ESP map adalah *jembatan pedagogis yang sempurna*. Peta ini secara langsung dan visual menjawab pertanyaan yang *sama* yang coba dijawab oleh siswa secara keliru menggunakan model *ball-and-stick* ("Di mana reaksinya terjadi?"). ESP map menggantikan model yang salah (B&S) dengan representasi berbasis kuantum yang *benar*, yang sama-sama visual tetapi secara fundamental akurat dan prediktif.³⁹

3.4. Konsep Kunci Berikutnya: Orbital Molekuler Perbatasan (HOMO/LUMO)

Setelah siswa memahami ESP map (yang mewakili distribusi muatan *keadaan dasar*), langkah konseptual berikutnya adalah Teori Orbital Molekuler Perbatasan (FMO).

- **Konsep:** Reaktivitas kimia seringkali paling baik dijelaskan oleh interaksi antara orbital molekuler spesifik. Secara khusus, reaksi terjadi melalui interaksi antara *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO) dari satu molekul (nukleofil, pendonor elektron) dan *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO) dari molekul lainnya (elektrofil, penerima elektron).³¹
- **Visualisasi:** Perangkat lunak komputasi seperti Avogadro²⁹, Spartan⁴⁰, dan GaussView⁴¹ unggul dalam memvisualisasikan bentuk 3D dari orbital HOMO dan LUMO ini. Siswa dapat *melihat* di mana lobus orbital berada, memungkinkan mereka untuk memprediksi tidak hanya *jika* reaksi akan terjadi, tetapi *bagaimana* (secara stereokimia dan regiokimia) tumpang tindih orbital yang produktif akan terjadi.

4. Katalog Perangkat Lunak untuk Pedagogi Kuantum: Alat Bantu Gratis dan Open-Source

Transisi ke pedagogi berbasis kuantum ini dimungkinkan oleh ketersediaan perangkat lunak yang kuat dan gratis. Bagian ini menyediakan panduan praktis untuk alat-alat yang paling relevan bagi pendidik.

4.1. Avogadro: Titik Awal Intuitif

- **Deskripsi:** Avogadro adalah editor dan visualisator molekuler lintas platform (Windows, Mac, Linux), gratis, dan *open-source*.⁷
- **Kekuatan Pedagogis:** Antarmukanya sangat intuitif dan dirancang untuk digunakan baik oleh siswa maupun peneliti tingkat lanjut.⁴² Yang penting, penggunaannya dalam konteks SMA di Indonesia telah dipelajari dan terbukti efektif. Sebuah studi pelatihan guru di Indonesia menemukan bahwa Avogadro sangat membantu guru dalam mengajarkan

topik-topik yang menantang secara visual seperti bentuk molekul dan senyawa karbon.³⁵

- **Fitur Kuantum Kunci:**

- **Visualisasi MO:** Avogadro dapat membaca file *output* dari paket komputasi kuantum eksternal (seperti Gaussian, GAMESS, dll., biasanya dalam format.fchk atau.g09) dan memvisualisasikan orbital molekuler (HOMO, LUMO, dll.).²⁹
- **Kalkulasi & Visualisasi ESP:** Ini adalah fitur yang paling berharga untuk pengajaran. Avogadro memiliki ekstensi bawaan yang memungkinkan pengguna untuk *menghitung dan menampilkan* permukaan kuantum seperti ESP maps *secara langsung di dalam program*.²⁹

- Panduan Mini Tutorial untuk Pendidik³⁷:

1. Buka Avogadro. Bangun molekul sederhana (misalnya, formaldehida, H₂CO).
2. Lakukan optimasi geometri cepat (misalnya, menggunakan medan gaya UFF bawaan).
3. Buka menu Extensions -> Create Surfaces....
4. Di kotak dialog yang muncul, atur Surface Type ke Electron Density (atau Van der Waals).
5. Atur Color By: ke Electrostatic Potential.
6. Klik Calculate.
7. Dalam hitungan detik, Avogadro akan menampilkan ESP map. Guru dapat segera menunjukkan kepada siswa area **merah** (kaya elektron) di sekitar atom oksigen dan area **biru** (miskin elektron) di sekitar atom karbon. Ini adalah pelajaran reaktivitas 5 menit yang didukung oleh mekanika kuantum.

4.2. JSmol / Jmol: Aksesibilitas Berbasis Web

- **Deskripsi:** Jmol adalah penampil molekuler 3D berbasis Java, sedangkan JSmol adalah mitra HTML5-nya yang modern. Keduanya gratis dan *open-source*.⁸
- **Kekuatan Pedagogis:** Keuntungan terbesar JSmol adalah *tidak memerlukan instalasi*. JSmol berjalan di *browser* web apa pun, termasuk di *smartphone* atau tablet.⁴⁴ Ini menjadikannya alat yang ideal untuk lingkungan *e-learning*, tugas rumah, atau sekolah dengan kebijakan BYOD (*Bring Your Own Device*) atau yang menggunakan Chromebook.
- **Fitur Kuantum Kunci:** JSmol sangat baik dalam *memvisualisasikan* data yang sudah dihitung sebelumnya. Guru dapat membuat file *output* (misalnya, dari perhitungan Gaussian atau Spartan) dan mengunggahnya ke halaman web yang menyimpan JSmol. Siswa kemudian dapat memanipulasi MOs, kepadatan elektron, dan ESP maps secara interaktif.⁴⁴ Kekuatannya ada pada *distribusi* dan *aksesibilitas*, bukan pada *perhitungan*.⁴⁶

4.3. WebMO: Menjembatani Kesenjangan ke Komputasi Serius

- **Deskripsi:** WebMO adalah *interface* (antarmuka) berbasis web yang canggih untuk berbagai paket komputasi *backend* (seperti Gaussian, GAMESS, Psi4, MOPAC).⁴⁵
- **Kekuatan Pedagogis:** Ini mungkin model implementasi *terbaik* untuk departemen sekolah atau universitas. Institusi hanya perlu menginstal paket komputasi *backend* (banyak di antaranya gratis, seperti GAMESS ⁴⁸ atau Psi4 ⁴⁹) di *satu server*.⁴⁷ Siswa dan guru kemudian dapat mengakses kekuatan penuh kimia komputasi *ab initio* dari *browser* web sederhana di komputer lab atau laptop pribadi mereka.⁴⁷ Versi dasarnya gratis.
- **Studi Kasus (NC High School Server):** North Carolina High School Computational Chemistry Server ²⁸ adalah cetak biru yang sempurna untuk implementasi ini. Server ini menggunakan WebMO sebagai *frontend* untuk Gaussian. Server ini menyediakan laboratorium siap pakai yang telah teruji di kelas bagi para pendidik, yang mencakup topik-topik kuantum inti:
 - Atomic Orbitals Lab ²⁸
 - Determination of Molecular Geometries Lab (membandingkan VSEPR dengan geometri yang dioptimalkan DFT) ²⁸
 - Vibrational Frequencies of Water (untuk memperkenalkan spektroskopi IR) ²⁸
 - Confirming and Visualization Lewis Dot Structures ²⁸

4.4. Perangkat Lainnya (VMD, Gabedit): Alat Spesialis

- **VMD (Visual Molecular Dynamics):** Alat visualisasi gratis yang sangat kuat, tetapi dirancang khusus untuk sistem *biomolekuler besar* seperti protein dan asam nukleat.⁹ Ini adalah pilihan yang sangat baik untuk guru biokimia atau untuk menunjukkan bagaimana prinsip pemodelan dapat diskalakan ke sistem yang kompleks.⁵²
- **Gabedit:** GUI gratis dan *open-source* yang kuat yang dapat membangun file *input* dan memvisualisasikan file *output* untuk berbagai paket komputasi.⁵³ Antarmukanya sedikit lebih teknis daripada Avogadro tetapi sangat fungsional dan dihargai oleh komunitas komputasi.⁵⁵

5. Katalog Perangkat Lunak untuk Pedagogi Kuantum: Paket Komersial dan Pendidikan

Selain opsi gratis, paket komersial seringkali menawarkan alur kerja yang lebih terintegrasi, dukungan teknis, dan materi kurikulum yang dikembangkan secara khusus.

5.1. Spartan (Student Edition): Dirancang untuk Kurikulum

- **Deskripsi:** Paket pemodelan molekuler komersial dari Wavefunction, Inc. Spartan menawarkan "Student Edition" yang lebih terjangkau dan terfokus yang dirancang khusus untuk kurikulum sarjana.⁵⁷
- **Kekuatan Pedagogis:** Seluruh antarmuka dan alur kerja dibuat *khusus* untuk tujuan pendidikan.⁵⁷ Spartan memungkinkan siswa tidak hanya memvisualisasikan tetapi juga *melakukan* perhitungan kuantum dengan mudah (misalnya, MMFF, PM3, Hartree-Fock, dan DFT seperti B3LYP dan ω B97X-D).⁵⁷
- **Fitur Kuantum Kunci** ⁴⁰:
 - Visualisasi MOs, kepadatan elektron, dan ESP maps yang superior dan mudah diakses.
 - **Integrasi Spektra:** Fitur yang menonjol adalah kemampuannya untuk *menghitung* spektrum (misalnya, IR, H-NMR, C-NMR) dan kemudian *secara langsung* menampilkannya di samping database besar spektrum eksperimental (seperti SSPD atau CSD).⁴⁰ Ini memungkinkan siswa untuk membuat koneksi langsung dan kuat antara perhitungan teoretis dan data laboratorium dunia nyata.

5.2. Gaussian & GaussView: Standar Emas Penelitian

- **Deskripsi:** Gaussian adalah salah satu program kimia komputasi *ab initio* yang paling banyak digunakan dan dihormati di dunia untuk penelitian.⁶¹ GaussView adalah antarmuka pengguna grafis (GUI) resminya.⁶³
- **Kekuatan Pedagogis:** Meskipun memiliki kurva belajar yang lebih curam dan biaya yang lebih tinggi, penggunaan Gaussian/GaussView di kelas (bahkan untuk tugas-tugas sederhana) memiliki manfaat pedagogis yang unik: ini mengenalkan siswa pada alat *yang sama persis* yang mereka akan gunakan jika mereka melanjutkan ke penelitian pascasarjana atau industri.⁶⁵ Ini adalah praktik ilmiah yang otentik.

- **Fitur Kuantum Kunci:** Gaussian dapat menghitung dan GaussView dapat memvisualisasikan *segala sesuatu*. Ini termasuk permukaan MO dan ESP ⁴¹, animasi mode vibrasi (termasuk analisis anharmonik yang kompleks) ⁶⁶, dan plot berbagai jenis spektrum (IR, Raman, VCD, NMR).⁴¹ Ini adalah alat *generasi* data, bukan hanya visualisator.

Tabel 1. Perbandingan Perangkat Lunak Inti untuk Pedagogi Kimia Kuantum

Perangkat Lunak	Biaya	Platform	Target Pengguna	Fitur Kuantum Kunci (Visualisasi)	Kasus Penggunaan Pedagogis
Avogadro	Gratis	Win, Mac, Linux	Pemula - Menengah (SMA/Univ.)	ESP (kalkulasi bawaan), MOs (dari file eksternal)	Titik awal terbaik; visualisasi cepat ESP & bentuk molekul ⁷
JSmol	Gratis	Berbasis Web	Pemula (SMA/Univ.)	ESP, MOs, Vibrasi (hanya melihat file eksternal)	<i>E-learning</i> , tugas rumah, BYOD; menyematkan visual 3D di web ⁸
WebMO	Gratis (Basic)	Berbasis Web (Server)	Pemula - Ahli (SMA/Univ.)	ESP, MOs, Spektra (antarmuka untuk <i>backend</i> komputasi)	Implementasi institusional ; lab virtual terkelola ²⁸

Spartan Student	Berbayar	Win, Mac	Menengah (Univ.)	ESP, MOs, Spektra (semua dihitung & divisualisasikan secara internal)	Lab kimia organik/fisik terintegrasi; menghubungkan teori & spektra ⁴⁰
Gaussian/ GaussView	Berbayar	Win, Mac, Linux	Ahli (Univ./Riset)	ESP, MOs, Spektra, Vibrasi (semua dihitung & divisualisasikan)	Praktik penelitian otentik; kursus komputasi lanjutan ⁴¹

6. Merevolusi Ruang Kelas: Strategi Implementasi dan Pedagogi Hibrida

Memiliki perangkat lunak yang tepat hanyalah setengah dari pertempuran. Perubahan yang sesungguhnya terletak pada *bagaimana* alat-alat ini diintegrasikan ke dalam kurikulum. Bagian ini membahas hambatan implementasi dan mengusulkan strategi pedagogis berbasis bukti yang mengungguli penggantian total.

6.1. Mengatasi Hambatan Implementasi

Mengadopsi alat baru selalu menghadirkan tantangan. Penelitian telah mengidentifikasi beberapa hambatan utama untuk mengintegrasikan kimia komputasi (CC) di tingkat sekolah:

1. **Pelatihan dan Kepercayaan Diri Guru:** Hambatan terbesar seringkali adalah kurangnya pelatihan.⁶⁷ Guru mungkin tidak merasa percaya diri menggunakan perangkat lunak komputasi atau menafsirkan *output*-nya. Solusinya adalah program pengembangan profesional yang ditargetkan. Studi di Indonesia tentang pelatihan Avogadro untuk guru SMA menunjukkan bahwa lokakarya yang terfokus dan terbimbing dapat secara efektif meningkatkan keterampilan dan kepercayaan diri guru dalam menggunakan alat-alat

ini.³⁵

2. **Infrastruktur dan Waktu Kurikulum:** Kekhawatiran tentang ketersediaan komputer di lab dan waktu di dalam kelas yang padat adalah nyata.⁶⁷ Solusinya adalah memanfaatkan alat berbasis web seperti JSmol dan WebMO, yang dapat diakses dari perangkat apa pun.⁴⁴ Selain itu, platform lab virtual yang dirancang khusus untuk penggunaan SMA, seperti Comp-Chem-Lab (CCL) dari Jerman, menyediakan aktivitas terpandu yang dapat diselesaikan dalam periode kelas standar.⁶⁸ CCL, misalnya, memungkinkan siswa SMA untuk menyelidiki energi disosiasi ikatan dan energetika reaksi dalam lingkungan berbasis web yang terkontrol.⁶⁹
3. **Latar Belakang Teoretis:** Guru dan siswa mungkin tidak memiliki latar belakang matematika yang mendalam dalam mekanika kuantum.⁶⁷ Solusinya adalah *tidak* mengajarkan persamaan Schrödinger. Fokus pedagogis harus beralih dari *penurunan* matematis ke *interpretasi visual*. Siswa tidak perlu menyelesaikan persamaan DFT; mereka hanya perlu belajar bagaimana *membaca* ESP map untuk memprediksi reaktivitas. Ini adalah pergeseran dari perhitungan algoritmik ke penalaran kausal berbasis visual.³⁹

6.2. Sebuah Kontradiksi Kritis: Kapan Model Fisik Lebih Unggul?

Dorongan untuk membuang model *ball-and-stick* sepenuhnya dapat dimengerti, tetapi data pedagogis mengungkapkan sebuah nuansa kritis: dalam beberapa kasus, model fisik *hands-on* sebenarnya *lebih unggul* daripada model komputasi.

Sebuah studi penting tahun 2021 secara langsung membandingkan efektivitas model fisik versus model virtual (berbasis komputer) untuk mengajarkan *stereokimia*—topik yang sangat bergantung pada penalaran spasial 3D.⁷⁰ Temuan-temuan tersebut mengejutkan:

- Grup yang menggunakan **model fisik** (*hands-on*) menunjukkan pemahaman stereokimia yang **secara signifikan lebih besar** daripada grup yang menggunakan model virtual.
- Terlebih lagi, grup model fisik **secara signifikan lebih baik** dalam *menerapkan* pengetahuan stereokimia tersebut ke masalah mekanisme reaksi yang kompleks.⁷⁰

Studi lain⁷¹ menemukan bahwa meskipun model fisik dan multimedia memiliki kontribusi yang *sama* terhadap pemahaman stereokimia, model *hands-on* (fisik) *lebih disukai* dan lebih bermanfaat bagi siswa dengan keterampilan penalaran ilmiah yang lebih rendah.

Implikasinya jelas: model *ball-and-stick* unggul dalam tugas-tugas **taktil-spasial**. Kemampuan untuk secara fisik memegang, memutar, dan memanipulasi model di tangan memberikan perancah kognitif untuk penalaran 3D (misalnya, mengidentifikasi pusat kiral,

memvisualisasikan enansiomer) yang saat ini tidak dapat ditiru oleh model virtual di layar.¹⁵

6.3. Proposal Inti: Pedagogi Hibrida (Fisik + Komputasi)

Ini mengarah pada wawasan pedagogis paling penting dalam laporan ini. Solusi *terbaik* bukanlah penggantian total, melainkan **integrasi strategis**.

Data empiris mendukung pendekatan hibrida ini. Beberapa studi telah menemukan bahwa hasil belajar siswa **paling tinggi** ketika mereka menggunakan **model fisik bersamaan dengan model 3D yang dihasilkan komputer**.⁷³

- **Teori di Balik Hibrida:** Model fisik menyediakan *perancah taktil* ⁷³ untuk *bentuk* 3D. Model komputasi secara bersamaan menyediakan *data kuantum* (elektronik) yang tidak terlihat yang ada di permukaan bentuk tersebut. Siswa dapat menghubungkan apa yang mereka *sentuh* (model B&S) dengan apa yang mereka *lihat* di layar (ESP map).
- **Strategi Baru:** Pendidik tidak boleh "membuang" model *ball-and-stick* mereka. Mereka harus "**menugaskan kembali**" (re-contextualize) model-model tersebut. Model B&S tidak boleh lagi digunakan untuk menjelaskan *ikatan* atau *reaktivitas*. Peran mereka yang baru dan spesifik adalah untuk mengajarkan **geometri 3D dan stereokimia**, dan idealnya, mereka harus digunakan *tepat di samping komputer* yang menjalankan Avogadro atau Spartan.

6.4. Rencana Pelajaran Hibrida (Contoh Praktis)

Bagaimana tampilan pedagogi hibrida ini di dalam kelas?

- **Topik: Keasaman (Asam Karboksilat vs. Alkohol)**
 - *Metode Lama:* Guru menunjukkan gambar B&S 2D dari etanol dan asam asetat. Keduanya memiliki gugus O-H. Siswa diberitahu untuk menghafal bahwa asam karboksilat lebih asam.
 - *Metode Hibrida Baru:*
 1. **Fisik:** Siswa memegang model B&S dari kedua molekul untuk menghargai strukturnya.
 2. **Komputasi:** Di layar, guru memuat ESP maps dari kedua molekul (dihitung dalam Avogadro ³⁷ atau Spartan).
 3. **Wawasan:** Siswa *melihat* bahwa proton H pada O-H etanol hanya *sedikit* biru ³⁸, tetapi proton H pada O-H asam asetat berwarna **biru tua**.³⁶ Siswa secara visual

menemukan bahwa proton asam karboksilat jauh lebih positif (miskin elektron) dan karena itu lebih "asam".

- **Topik: Reaksi SN2 (Stereokimia dan Reaktivitas)**

- *Metode Lama:* Guru menggambar panah melengkung pada representasi 2D di papan tulis, yang sering membingungkan siswa.
- *Metode Hibrida Baru:*
 1. **Fisik:** Siswa menggunakan model B&S dari sebuah alkil halida kiral. Mereka secara fisik mempraktikkan "serangan dari belakang" oleh nukleofil, membalikkan pusat kiral seperti payung tertiuang angin (inversi Walden).⁷⁰ Ini melatih pemahaman *spasial-taktil*.
 2. **Komputasi:** Kemudian, guru beralih ke Spartan atau GaussView untuk memutar animasi perhitungan keadaan transisi ⁴¹, yang menunjukkan bagaimana energi potensial sistem meningkat saat nukleofil mendekat dan gugus pergi terlepas.
 3. **Wawasan:** Siswa menghubungkan *gerakan fisik* yang mereka latih dengan *penghalang energi* kuantum yang sebenarnya dari reaksi tersebut.

- **Topik: Pengantar Hidrokarbon (Konteks SMA Indonesia)**

- *Masalah:* Siswa kesulitan membedakan isomer (misalnya, butana vs. isobutana) dan melihat struktur 3D dari gambar 2D di buku teks.²²
- *Metode Hibrida Baru:*
 1. **Fisik:** Siswa mencoba membangun butana dan isobutana (2-metilpropana) menggunakan model B&S mereka.⁷⁴
 2. **Komputasi:** Secara bersamaan, guru membangun kedua molekul di Avogadro (seperti dalam pelatihan guru di Indonesia ³⁵). Guru menekan tombol "Optimalkan Geometri".
 3. **Wawasan:** Siswa melihat molekul di layar "rileks" ke dalam konformasi energi terendahnya. Guru kemudian dapat menampilkan energi yang dihitung untuk kedua molekul, *membuktikan* bahwa mereka adalah isomer—senyawa berbeda dengan energi dan stabilitas yang berbeda.

7. Kesimpulan dan Mandat untuk Modernisasi Pedagogi Kimia

Laporan ini dimulai dengan memvalidasi keluhan bahwa ketergantungan yang berkelanjutan pada model *ball-and-stick* di era komputasi modern adalah praktik pedagogis yang bermasalah. Bukti-bukti yang telah diuraikan mengkonfirmasi hal ini dengan kuat. Ketergantungan pada model *ball-and-stick* untuk mengajarkan konsep elektronik *memang* "mengaburkan konsep yang benar." Studi kognitif menggunakan pelacakan mata menunjukkan bahwa model-model ini secara aktif menyesatkan siswa yang mencoba memahami reaktivitas,

mengarahkan mereka untuk mencari informasi di tempat yang tidak ada.²³ Ini berkontribusi langsung pada miskonsepsi yang terdokumentasi dengan baik tentang konsep-konsep kuantum fundamental di kalangan siswa, termasuk di Indonesia.²¹

Perangkat lunak untuk memperbaiki ini sudah ada, sudah matang, mudah diakses, dan seringkali gratis. Alat-alat seperti Avogadro⁷, JSmol⁸, dan WebMO (dengan *backend* gratis seperti GAMESS)⁴⁷ sangat mumpuni untuk memvisualisasikan konsep-konsep kuantum yang *benar*. Dari semua konsep ini, **peta potensial elektrostatik (ESP map)** menonjol sebagai alat pedagogis yang paling kuat, berfungsi sebagai jembatan visual yang intuitif dari struktur ke reaktivitas.³⁹

Namun, solusi optimalnya bukanlah eliminasi total, melainkan **re-kontekstualisasi dan integrasi**. Bukti menunjukkan bahwa model fisik *hands-on* tetap menjadi alat yang unggul untuk mengajarkan pemahaman *spasial-taktil* seperti stereokimia.⁷⁰

Oleh karena itu, rekomendasi utama dari laporan ini adalah adopsi **pedagogi hibrida** yang terinformasi oleh bukti.

1. **Tugaskan Kembali Model Fisik (Ball-and-Stick):** Peran mereka harus dibatasi secara eksklusif untuk mengajarkan geometri 3D, bentuk, dan stereokimia—tugas-tugas di mana manipulasi taktil bermanfaat.
2. **Adopsi Model Komputasi:** Untuk *semua* konsep elektronik—polaritas, reaktivitas, energi, ikatan, dan spektroskopi—pendidik harus beralih ke visualisasi berbasis komputasi (terutama ESP maps dan MOs).
3. **Integrasikan Keduanya:** Hasil belajar terbaik dicapai ketika kedua model digunakan secara bersamaan⁷³, memungkinkan siswa untuk menghubungkan model fisik yang mereka sentuh dengan data kuantum yang mereka lihat di layar.

Bagi para pendidik kimia, dosen, dan pembuat kurikulum di Indonesia, ini adalah sebuah mandat. Untuk berhenti menanamkan miskonsepsi yang telah mendarah daging, kita "harus mengubah tool" kita. Transisi ini—dari ketergantungan tunggal pada "bola dan tongkat" statis abad ke-19 ke visualisasi kuantum hibrida yang dinamis dan terintegrasi—adalah langkah paling penting yang dapat kita ambil untuk memastikan siswa kita mempelajari representasi kimia yang akurat, modern, dan benar-benar prediktif.

Works cited

1. Quantum Chemistry - Pritzker School of Molecular Engineering - The University of Chicago, accessed October 28, 2025, <https://pme.uchicago.edu/quantum-uchicago-research/quantum-chemistry>
2. Quantum computational chemistry | Rev. Mod. Phys. - Physical Review Link Manager, accessed October 28, 2025, <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.92.015003>
3. (1) Pemodelan Molekul - magister kimia undip, accessed October 28, 2025,

- <https://mkim.fsm.undip.ac.id/kurikulum/rps-matakuliah-pilihan/1-pemodelan-molekul/>
4. accessed October 28, 2025, https://en.wikipedia.org/wiki/Ball-and-stick_model#:~:text=In%201865%2C%20German%20chemist%20August.at%20Bottisham%2C%20Cambridgeshire%2C%20UK.
 5. Types of Molecular Models | Whipple Museum, accessed October 28, 2025, <https://www.whipplemuseum.cam.ac.uk/explore-whipple-collections/models/modelling-chemistry/types-molecular-models>
 6. History of the use of models to represent and understand the behavior of molecules, accessed October 28, 2025, <https://acs.digitellinc.com/p/s/history-of-the-use-of-models-to-represent-and-understand-the-behavior-of-molecules-593043>
 7. Avogadro - Free cross-platform molecular editor - Avogadro, accessed October 28, 2025, <https://avogadro.cc/>
 8. Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D, accessed October 28, 2025, <https://jmol.sourceforge.net/>
 9. VMD - Visual Molecular Dynamics, accessed October 28, 2025, <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
 10. A Cache of Chemistry Models - Caltech Magazine, accessed October 28, 2025, <https://magazine.caltech.edu/post/chemmodels>
 11. (PDF) KIMIA ORGANIK Penulis - ResearchGate, accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/396522455_KIMIA_ORGANIK_Penulis
 12. Ball-and-stick model - Wikipedia, accessed October 28, 2025, https://en.wikipedia.org/wiki/Ball-and-stick_model
 13. Learning to teach chemical bonding: a framework for preservice teacher educators, accessed October 28, 2025, <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2023/rp/d2rp00049k>
 14. Styrofoam-and-Velcro: An Alternative to Ball-and-Stick Models - PMC - NIH, accessed October 28, 2025, <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC4278502/>
 15. Ball And Stick Chemistry - Pressidium, accessed October 28, 2025, <https://app1-c89-pub.pressidium.com/chemistry-suggest-002/ball-and-stick-chemistry.pdf>
 16. Full article: Students' perceptions of physical magnetic models and immersive virtual reality for chemistry learning - Taylor & Francis Online, accessed October 28, 2025, <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/09500693.2025.2574523?mi=iv1sv3>
 17. The Multiple Student Conceptions of the Chemical Bond in a ..., accessed October 28, 2025, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.4c00024>
 18. Teori Mekanika Kuantum dan Modelnya – Materi Kimia Kelas 10 - Zenius Education, accessed October 28, 2025, <https://www.zenius.net/blog/kupas-tuntas-materi-mekanika-kuantum/>
 19. Bilangan Kuantum Utama, Azimut, Magnetik, dan Spin - Materi Kimia Kelas 10, accessed October 28, 2025, <https://www.zenius.net/blog/bilangan-kuantum/>
 20. A Commentary on “Secondary School Students' Misconceptions of Covalent

- Bonding” - Science-Education-Research, accessed October 28, 2025,
<https://science-education-research.com/downloads/publications/2011/Taber-2011-Models-Molecules-and-Misconceptions.pdf>
21. Miskonsepsi Bilangan Kuantum dan Konfigurasi Elektronik pada Peserta Didik Kelas XI IPA, Studi Kasus di SMA Kota Banjarmasin | Rahman | Quantum: Jurnal Inovasi Pendidikan Sains - PPJP ULM, accessed October 28, 2025,
<https://ppjp.ulm.ac.id/journal/index.php/quantum/article/view/1202>
 22. (PDF) Analysis of the Needs for the Development of Computational Chemistry-Based Learning Media on the Subject of Hydrocarbons - ResearchGate, accessed October 28, 2025,
https://www.researchgate.net/publication/382540289_Analysis_of_the_Needs_for_the_Development_of_Computational_Chemistry-Based_Learning_Media_on_the_Subject_of_Hydrocarbons
 23. Identifying Student Use of Ball-and-Stick Images ... - ACS Publications, accessed October 28, 2025,
https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ed200259j?ref=article_openPDF
 24. Beyond ball-and-stick: Students' processing of novel STEM ..., accessed October 28, 2025,
https://www.researchgate.net/publication/276972250_Beyond_ball-and-stick_Students'_processing_of_novel_STEM_visualizations
 25. Defining Areas of Interest in Organic Chemistry Education Eye-Tracking Research, accessed October 28, 2025,
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.4c00830>
 26. Full article: The application of eye-tracking technology in chemistry education research: a systematic review - Taylor & Francis Online, accessed October 28, 2025,
<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/02635143.2024.2435343?src=>
 27. Bilangan Kuantum: Pengertian dan Contoh Soal - Gramedia, accessed October 28, 2025,
<https://www.gramedia.com/literasi/bilangan-kuantum-pengertian-dan-contoh-soal/>
 28. North Carolina High School Computational Chemistry Server, accessed October 28, 2025,
<http://chemistry.ncssm.edu/>
 29. Extensions Menu - Avogadro, accessed October 28, 2025,
<https://avogadro.cc/docs/menus/extensions-menu/>
 30. Viewing Molecular Orbitals - Avogadro, accessed October 28, 2025,
<https://avogadro.cc/docs/tutorials/viewing-molecular-orbitals/>
 31. Tugas 9 - 12 Pemodelan Molekul | PDF - Scribd, accessed October 28, 2025,
<https://id.scribd.com/document/870239669/Tugas-9-12-Pemodelan-Molekul>
 32. Hibridisasi Kimia: Arti, Teori, Jenis, dan Proses Terjadinya - Sampoerna Academy, accessed October 28, 2025,
<https://www.sampoernaacademy.sch.id/id/news/proses-terjadinya-hibridisasi-kimia>
 33. Hibridisasi Kimia Kelas 10 - Pengertian, Tipe, Cara Menentukan, dan Contoh Soal - Quipper, accessed October 28, 2025,

- <https://www.quipper.com/id/blog/mapel/kimia/hibridisasi-kimia-kelas-10/>
34. Bab buku dari Hibridasi - Teachy, accessed October 28, 2025, https://teachy.ai/id_ID/buku/pendidikan-menengah-atas/kelas-10-sma/kimia/hibridisasi-or-bab-buku
 35. Journal of Social Research and Community Service - LPPM-UNILA ..., accessed October 28, 2025, <http://repository.lppm.unila.ac.id/47160/1/24807-61787-2-PB.pdf>
 36. Electrostatic Potential maps - Chemistry LibreTexts, accessed October 28, 2025, [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Chemical_Bonding/Fundamentals_of_Chemical_Bonding/Electrostatic_Potential_maps](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Chemical_Bonding/Fundamentals_of_Chemical_Bonding/Electrostatic_Potential_maps)
 37. Viewing Electrostatic Potential Maps - Avogadro, accessed October 28, 2025, <https://avogadro.cc/docs/tutorials/viewing-electrostatic-potential/>
 38. Electrostatic Potential Maps and Bond Polarity - Organic Chemistry - YouTube, accessed October 28, 2025, https://www.youtube.com/watch?v=Sd_2RwNE4iU
 39. Affordances of Electrostatic Potential Maps in Promoting Use of Electronic Features and Causal Reasoning in Organic Chemistry | Journal of Chemical Education - ACS Publications, accessed October 28, 2025, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.4c00500>
 40. Spartan is a molecular modeling and computational chemistry software developed by Wavefunction, Inc., used to predict the structures, properties, and reactivity of molecules. - UCSD Blink, accessed October 28, 2025, <https://blink.ucsd.edu/technology/computers/software-acms/available-software/spartan.html>
 41. Gaussian & GaussView Tutorial Videos, accessed October 28, 2025, <https://gaussian.com/videos/>
 42. Avogadro download | SourceForge.net, accessed October 28, 2025, <https://sourceforge.net/projects/avogadro/>
 43. Results from 2021 Community Survey - Avogadro, accessed October 28, 2025, <https://avogadro.cc/news/community-survey-21/>
 44. The Molecule Calculator: A Web Application for Fast Quantum Mechanics-Based Estimation of Molecular Properties | Journal of Chemical Education - ACS Publications, accessed October 28, 2025, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ed400164n>
 45. GUIs for Quantum Chemistry... Where are they? - Matter Modeling Stack Exchange, accessed October 28, 2025, <https://mattermodeling.stackexchange.com/questions/7065/guis-for-quantum-chemistry-where-are-they>
 46. The 3Dmol.js Learning Environment: A Classroom Response System for 3D Chemical Structures | Request PDF - ResearchGate, accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/343863638_The_3Dmoljs_Learning_Environment_A_Classroom_Response_System_for_3D_Chemical_Structures
 47. WebMO, accessed October 28, 2025, <https://www.webmo.net/>
 48. GAMESS: Open Source Quantum Chemistry Software | Ames Laboratory, accessed October 28, 2025,

- <https://www.ameslab.gov/gamess-open-source-quantum-chemistry-software>
49. Home | ChemCompute: Free Computational Chemistry For Undergraduates, accessed October 28, 2025, <https://chemcompute.org/>
 50. VMD: visual molecular dynamics - PubMed - NIH, accessed October 28, 2025, <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/8744570/>
 51. What is VMD? - Theoretical and Computational Biophysics Group, accessed October 28, 2025, https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/allversions/what_is_vmd.html
 52. VMD as a Platform for Interactive Small Molecule Preparation and Visualization in Quantum and Classical Simulations | Journal of Chemical Information and Modeling - ACS Publications, accessed October 28, 2025, <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.3c00658>
 53. Gabedit download | SourceForge.net, accessed October 28, 2025, <https://sourceforge.net/projects/gabedit/>
 54. Gabedit-A Graphical User Interface for Computational Chemistry Softwares - ResearchGate, accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/45098630_Gabedit-A_Graphical_User_Interface_for_Computational_Chemistry_Softwares
 55. Gabedit Reviews - 2025 - SourceForge, accessed October 28, 2025, <https://sourceforge.net/projects/gabedit/reviews/>
 56. Open Source Molecular Modeling - PMC - PubMed Central, accessed October 28, 2025, <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC5037051/>
 57. Spartan Student - Wavefunction, Inc., accessed October 28, 2025, <https://www.wavefun.com/spartan-student>
 58. Spartan'24 - Wavefunction, Inc., accessed October 28, 2025, <https://www.wavefun.com/spartan>
 59. Spartan (chemistry software) - Wikipedia, accessed October 28, 2025, [https://en.wikipedia.org/wiki/Spartan_\(chemistry_software\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Spartan_(chemistry_software))
 60. PRODUCTS - Wavefunction, Inc., accessed October 28, 2025, <https://www.wavefun.com/products>
 61. Gaussian.com | Expanding the limits of computational chemistry, accessed October 28, 2025, <https://gaussian.com/>
 62. What is the best computational chemistry software? : r/Chempros - Reddit, accessed October 28, 2025, https://www.reddit.com/r/Chempros/comments/xzx26k/what_is_the_best_computational_chemistry_software/
 63. GaussView 6 | Gaussian.com, accessed October 28, 2025, <https://gaussian.com/gaussview6/>
 64. Gaussian & GaussView 6 - TAMU HPRC, accessed October 28, 2025, <https://hprc.tamu.edu/kb/Software/Gaussian/>
 65. GaussView for Dummies : r/comp_chem - Reddit, accessed October 28, 2025, https://www.reddit.com/r/comp_chem/comments/i5u8oc/gaussview_for_dummies/
 66. GaussView 6 Tutorial 3: Visualizing Results - YouTube, accessed October 28, 2025, <https://www.youtube.com/watch?v=EeUQu0g8agE>

67. Integrating Computational Chemistry into Secondary School Lessons | Journal of Chemical Education - ACS Publications, accessed October 28, 2025, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.3c00908>
68. Educator's Month: How can high school students use computational chemistry for scientific inquiry? Insights from the development of the Comp-Chem Lab - Schrödinger, Inc., accessed October 28, 2025, <https://www.schrodinger.com/life-science/resources/webinar/educators-month-how-can-high-school-students-use-computational-chemistry-for-scientific-inquiry-insights-from-the-development-of-the-comp-chem-lab/>
69. High School Students Experimenting with Computational Chemistry ..., accessed October 28, 2025, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.4c01136>
70. Advancing multimedia learning for science: Comparing the effect of ..., accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/353712793_Advancing_multimedia_learning_for_science_Comparing_the_effect_of_virtual_versus_physical_models_on_student_learning_about_stereochemistry
71. Teaching Stereochemistry with Multimedia and Hands-On Models: The Relationship between Students' Scientific Reasoning Skills a - ERIC, accessed October 28, 2025, <https://files.eric.ed.gov/fulltext/EJ1424126.pdf>
72. (PDF) Teaching Stereochemistry with Multimedia and Hands-On Models: The Relationship between Students' Scientific Reasoning Skills and The Effectiveness of Model Type - ResearchGate, accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/371792913_Teaching_Stereochemistry_with_Multimedia_and_Hands-On_Models_The_Relationship_between_Students'_Scientific_Reasoning_Skills_and_The_Effectiveness_of_Model_Type
73. Physical models can provide superior learning opportunities beyond ..., accessed October 28, 2025, <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC6220871/>
74. (PDF) Influence of Using Ball-And-Stick Models in Teaching Nomenclature to SS3 Chemistry Students in Sabon Gari Local Government Area of Kaduna State - ResearchGate, accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/326827619_Influence_of_Using_Ball-And-Stick_Models_in_Teaching_Nomenclature_to_SS3_Chemistry_Students_in_Sabon_Gari_Local_Government_Area_of_Kaduna_State
75. Visualization Tools for Organic Chemistry | Request PDF - ResearchGate, accessed October 28, 2025, https://www.researchgate.net/publication/231268403_Visualization_Tools_for_Organic_Chemistry