

PEMANFAATAN SOFTWARE KIMIA KOMPUTASI UNTUK PEMBELAJARAN ILMU KIMIA TINGKAT SMU MELALUI VISUALISASI MODEL MOLEKUL

Iqmal Tahir

*Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry
Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Gadjah Mada
Sekip Utara, Yogyakarta 55281*

INTISARI

Pembelajaran ilmu kimia dengan menerapkan praktek oleh siswa dapat mendukung penerimaan konsep secara lebih baik. Praktek ilmu kimia saat ini dipandang hanya praktek di laboratorium kimia dengan melakukan eksperimen secara langsung. Saat ini praktek pembelajaran ilmu kimia dapat dilakukan dengan mempelajari aspek molekuler berupa visualisasi model molekul dan aspek-aspek terkait lainnya. Pada makalah ini diuraikan alternatif pemanfaatan software kimia komputasi untuk keperluan pembelajaran ilmu kimia tingkat SMU melalui visualisasi model molekul. Beberapa materi seperti konsep periodisasi, teori VSEPR, contoh geometri dan struktur molekul dari berbagai senyawa organik serta senyawa anorganik juga diberikan. Software yang diperlukan juga dibahas terutama untuk memudahkan akses oleh para guru kimia untuk menerapkan hal tersebut pada kelas masing-masing.

PENDAHULUAN

Ilmu kimia dalam pembelajarannya seringkali membutuhkan metoda yang lebih bersifat eksperimental daripada hanya sekedar pengajaran lisan. Termasuk dalam hal ini adalah pembelajaran ilmu kimia di tingkat sekolah menengah umum. Siswa akan dapat menerima konsep-konsep ilmu kimia dengan lebih benar apabila dapat mengamati langsung fenomena dan gambaran yang sesungguhnya apabila siswa dapat melakukan praktek di laboratorium. Praktek-praktek di laboratorium kimia saat ini akan menghadapi kendala ketersediaan bahan kimia yang relatif mahal. Pada kondisi dewasa ini, tidak semua sekolah tingkat SMU di Indonesia dapat menyediakan fasilitas laboratorium kimia yang memadai untuk keperluan tersebut. Kondisi ini menyebabkan sebagian besar sekolah tidak mampu untuk menyelenggarakan kegiatan praktek di laboratorium kimia secara representatif. Di sisi lain, sebagian besar sekolah-sekolah memiliki fasilitas laboratorium untuk praktek komputer bagi para siswa. Fasilitas komputer yang ada tersebut sebenarnya dapat dimanfaatkan sebagai alternatif untuk keperluan praktek pembelajaran ilmu kimia.

Beberapa konsep ilmu kimia khususnya pada skala molekuler dapat dipelajari dengan menggunakan model molekul (Leach, 1996). Contoh hal ini adalah kajian tentang ukuran atom dan periodisitas, bentuk geometri dari struktur molekul, stereokimia dan lain-lain. Model

molekul pada mulanya diajarkan dengan menggunakan model tiga dimensional dengan menggunakan alat peraga berbentuk bola-bola dari bahan plastik atau kayu. Saat ini dengan adanya perkembangan teknologi komputer baik dari segi perangkat keras maupun perangkat lunak memungkinkan untuk pemodelan molekul dengan menggunakan komputer. Beberapa perangkat lunak yang tersedia di pasaran saat ini dapat digunakan untuk keperluan visualisasi model molekul. Beranjak dari kondisi tersebut di atas maka perlu dicoba praktek visualisasi model molekul oleh siswa SMU sebagai alternatif pembelajaran yang diharapkan dapat lebih menarik minat mahasiswa untuk mempelajari ilmu kimia secara lebih intensif.

Pada makalah ini diuraikan beberapa topik tentang ilmu kimia yang dapat dipelajari berdasarkan model molekul dengan menggunakan visualisasi di komputer. Tujuan dari penulisan ini adalah dapat memberi wawasan baru bagi para guru ilmu kimia tingkat SMU tentang alternatif pembelajaran menggunakan teknik visualisasi model molekul.

KEBUTUHAN FASILITAS

Untuk dapat melakukan praktek visualisasi ini maka dibutuhkan seperangkat komputer dengan spesifikasi standar dan terutama menggunakan sistem operasi Windows minimal 9X. Spesifikasi perangkat keras berupa komputer dengan prosesor minimal pentium dengan RAM 16 MB dan kapasitas kosong dari harddisk sekitar 700 MB – 1500 MB untuk instalasi software (tergantung keperluan). Kemampuan grafis komputer semakin tinggi akan semakin baik. Printer warna hanya diperlukan apabila guru memberikan tugas untuk mencetak dan pembuatan laporan.

Saat ini banyak sekali software-software yang dapat digunakan untuk aplikasi visualisasi struktur molekul, baik software yang bersifat komersial maupun yang bersifat freeware (gratis) atau shareware (gratis untuk sementara waktu atau gratis untuk software versi terbatas). Kebanyakan software komersial berharga relatif mahal dan relatif tidak terjangkau untuk keperluan pembelajaran SMU di Indonesia. Hal ini dapat diatasi dengan strategi pemilihan software yang bersifat freeware atau shareware tersebut.

Untuk keperluan visualisasi senyawa-senyawa organik atau anorganik tertentu, dapat digunakan software Rasmol. Software ini dapat didownload secara gratis dari internet. Kelemahan software ini hanya dapat untuk visualisasi tanpa dapat digunakan untuk pembuatan atau manipulasi struktur molekul. Software yang dapat digunakan untuk keperluan pembuatan atau manipulasi struktur misalnya adalah HyperChem, Chem3D atau Alchemy. Software versi

demo dari program-program tersebut tersedia di website masing-masing produsen software tersebut dan dapat didownload secara gratis.

Untuk keperluan visualisasi struktur kristal dapat menggunakan software Xtal atau PowderCell. Software tersebut bersifat komersial dan versi demo juga tersedia di website masing-masing produsen. Untuk keperluan ini, sebenarnya terdapat software freeware tetapi hanya dapat dijalankan pada komputer yang menggunakan sistem operasi UNIX/LINUX.

Alternatif lain yang dapat dilakukan guru adalah apabila di sekolah tersedia jaringan internet maka guru dapat menggunakan fasilitas situs web dengan alamat <http://www.molecules.org/>. Untuk keperluan ini maka guru dapat memanfaatkan aplikasi tersebut baik secara *on-line* maupun *off-line*. Untuk keperluan ini diperlukan software untuk browsing seperti Internet Explorer, Netscape Navigator atau Opera. Selain itu diperlukan juga suatu software kecil untuk keperluan visualisasi sebagai plug-in browser yang digunakan yakni software Chime. Software ini dapat didownload secara gratis dan diinstallkan langsung di komputer.

PENGENALAN SOFTWARE VISUALISASI STRUKTUR MOLEKUL

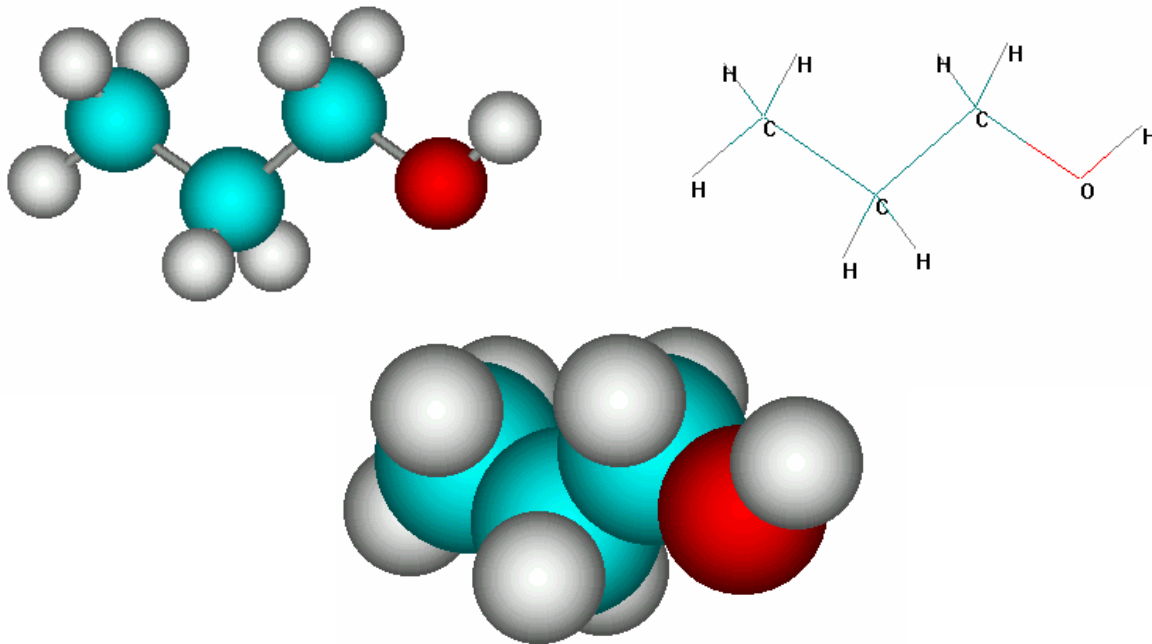
Sebelum dikenalkan aspek visualisasi struktur molekul, pada bagian ini dikenalkan format kode file (*source code*) sehingga dapat diterjemahkan komputer sebagai suatu gambaran struktur. Molekul harus dijabarkan dalam bentuk identifikasi seluruh jenis atom-atom penyusun molekul dan koordinat atom tersebut dalam bentuk koordinat Cartesian (XYZ). Identifikasi jenis atom meliputi lambang atom, spesifikasi jenis atom, muatan dan keterangan lain bila diperlukan. Selanjutnya berdasarkan identifikasi jenis atom dan koordinat tersebut akan diterjemahkan menjadi susunan atom-atom dan oleh komputer untuk panjang ikatan yang sesuai akan diterjemahkan menjadi ikatan atom. Gambaran umum ini berlaku untuk seluruh program visualisasi komputer, yang membedakan hanya aturan penulisan dan format detail yang lebih spesifik.

Sebagai contoh adalah pada gambar 1 untuk software Hyperchem berupa format identifikasi atom dan koordinat serta hasil visual yang ditampilkan.

```

forcefield mm+
sys 0 0 1
view 40 0.41174 55 15 -0.4658915 -0.8385957 -0.282316 0.7684918 -0.5416318 0.3406689 -0.4385948 -0.05824277
0.8967956 -1.624 3.0693 -55.552
seed 0
mol 1
atom 1 - C C4 - 0 2.393496 1.158491 -1.639604e-007 4 2 s 5 s 6 s 7 s
atom 2 - C C4 - 0 2.393496 2.698491 -1.639604e-007 4 1 s 3 s 8 s 9 s
atom 3 - C C4 - 0 0.9415681 3.211819 -1.639604e-007 4 2 s 4 s 10 s 11 s
atom 4 - O O2 - 0 0.941568 4.641819 -1.639604e-007 2 3 s 12 s
atom 5 - H H - 0 3.421159 0.7951617 -1.639604e-007 1 1 s
atom 6 - H H - 0 1.879673 0.7951617 0.8899872 1 1 s
atom 7 - H H - 0 1.879662 0.7951538 -0.8899779 1 1 s
atom 8 - H H - 0 2.907319 3.061821 0.8899872 1 2 s
atom 9 - H H - 0 2.907331 3.061828 -0.8899778 1 2 s
atom 10 - H H - 0 0.4277449 2.848489 -0.8899875 1 3 s
atom 11 - H H - 0 0.4277337 2.848481 0.8899775 1 3 s
atom 12 - H HO - 0 0.03647017 4.961815 -1.639604e-007 1 4 s
endmol 1

```



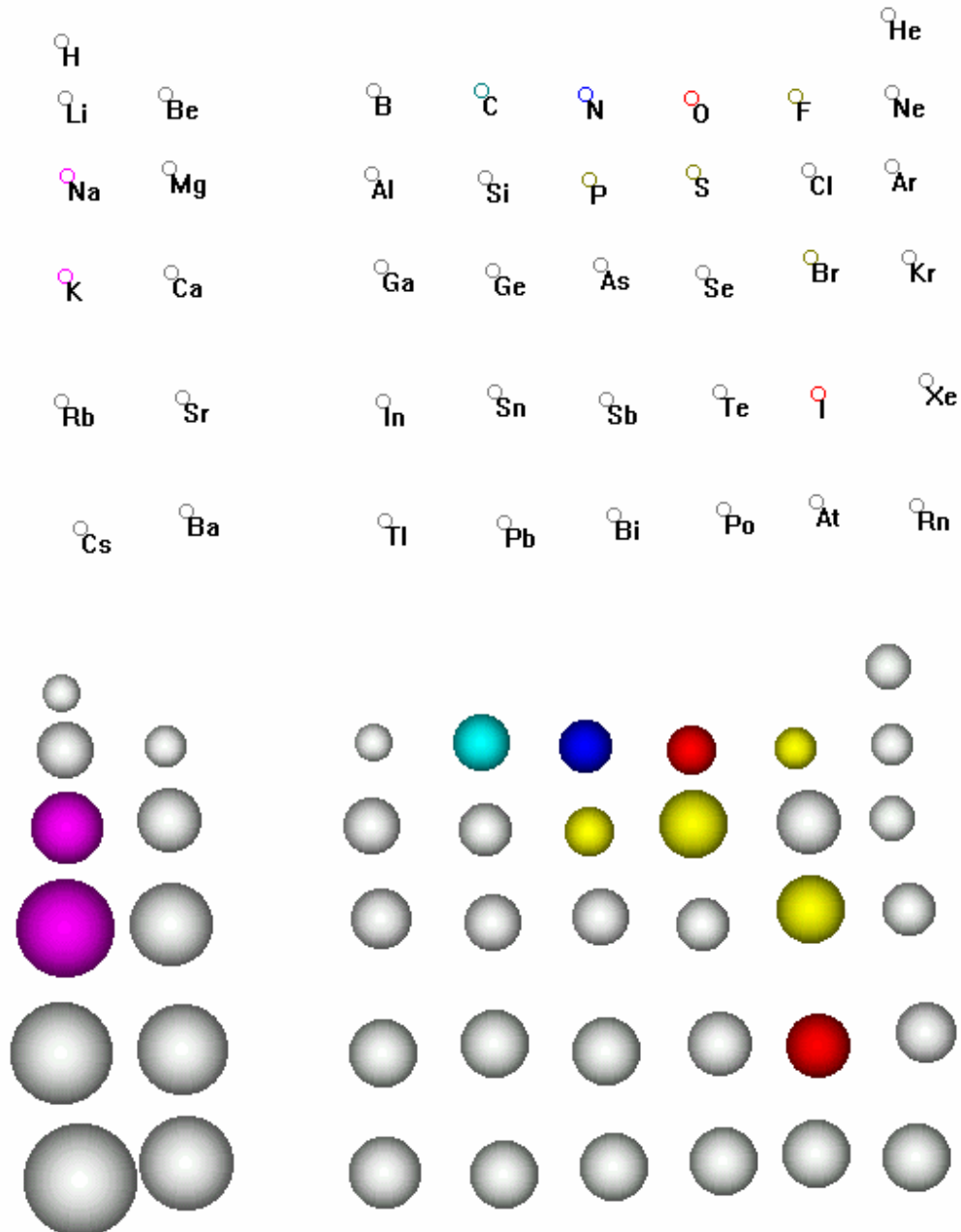
Gambar 1. Contoh tampilan kode format struktur dan visualisasi dari senyawa propanol

BEBERAPA MATERI PEMBELAJARAN KIMIA DENGAN KOMPUTER

Berikut ini disajikan beberapa materi ilmu kimia tingkat SMU yang dapat digunakan sebagai materi praktek visualisasi dengan menggunakan komputer.

1. Konsep periodisasi – ukuran jari-jari atom

Materi ini membahas tentang ukuran jari-jari atom yang memberi kontribusi susunan periodik pada tabel berkala. Pada gambar 2 disajikan visualiasi jenis atom dan ditampilkan lambang atom yang dimaksud, selanjutnya pada gambar berikutnya dapat ditampilkan visual bola yang merepresentasikan atom yang sesuai dengan ukuran jari-jari atom tersebut.

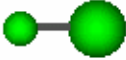






Gambar 3. Visualiasi ukuran jari-jari atom untuk golongan A

2. Konsep periodisasi – panjang ikatan

Materi ini membahas tentang pengaruh jenis atom sesuai urutan pada satu golongan terhadap panjang ikatan dengan atom hidrogen yang terbentuk. Pada tabel 1 disajikan dengan pengaruh jenis ikatan tersebut terhadap panjang ikatan yang dihasilkan. Nilai panjang ikatan tersebut dapat diperoleh pada software HyperChem.



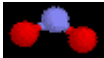

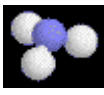








Tabel 1. Nilai panjang ikat antara H-X (X = halida) dan komparasi dengan H-H

Jenis ikatan	Visualisasi	Panjang ikatan (Angstrom)
H-I		1,58730
H-Br		1,42111
H-Cl		1,28359
H-F		0,82626
H-H		0,67660

3. Teori struktur molekul – VSEPR (*Valence Shell Electron Pair Repulsion*)

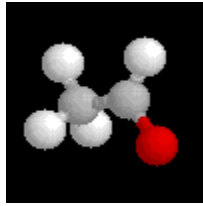
Pada bagian ini disajikan gambaran bentuk-bentuk geometri yang mungkin terjadi dengan berdasarkan teori VSEPR dan disajikan contoh-contoh molekul yang mengikuti bentuk geometri tersebut. Visualisasi secara tiga dimensional dapat membantu untuk lebih memperjelas bentuk geometri yang dimaksud yakni dengan eksplorasi dari berbagai arah. Dengan program HyperChem atau Rasmol, sudut yang terbentuk dapat diukur juga. Dalam kaitan ini guru dapat memberi tugas bagi siswa untuk membuat berbagai jenis molekul lain seperti CH₄, NH₃, H₂O dan H₂S kemudian dipelajari bentuk geometri serta pengukuran sudut ikat yang terjadi.

Tabel 2. Bentuk geometri molekul berdasarkan teori VSEPR

Jumlah pasangan elektron	Geometry pasangan elektron (Sudut ikat)	Jumlah Atom di Sekeliling	Bentuk geometri molekul	Contoh Rumus	Gambar
2	linear (180°)	2	linear	BeH ₂	
3	trigonal planar (120°)	3	trigonal planar	CO ₃ ²⁻	
		2	<i>bent</i>	NO ₂ ⁻	
4	tetrahedral (109.5°)	4	tetrahedral	CH ₄	
		3	trigonal piramidal	NH ₃	
		2	<i>bent</i>	H ₂ O	
5	trigonal bipiramidal (90°, 120°)	5	trigonal bipiramidal	PCl ₅	
		4	<i>see-saw</i>	SF ₄	
		3	Bentuk T	BrF ₃	
6	oktahedral (90°)	2	linear	ICl ₂ ⁻	
		6	oktahedral	SF ₆	
		5	square piramidal	BrF ₅	
		4	square planar	ICl ₄ ⁻	

4. Visualisasi berbagai jenis senyawa organik sederhana

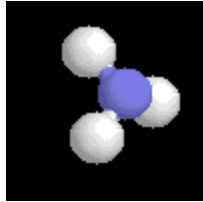
Asetaldehid



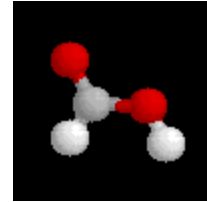
Formamida



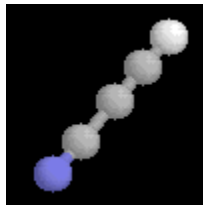
Amonia



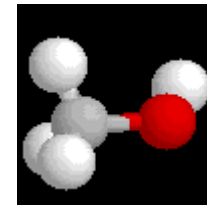
Asam Formiat



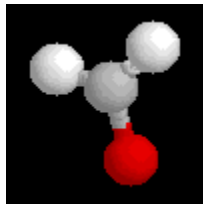
Cyanoetilen



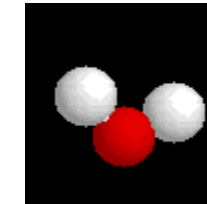
Metanol



Formaldehid

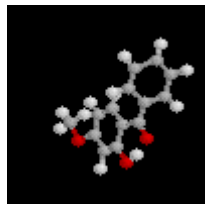


Air

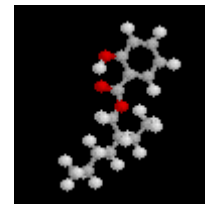


5. Visualisasi berbagai jenis senyawa organik : senyawa tabir surya

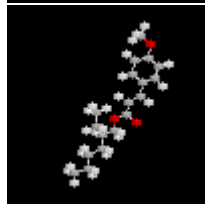
Octocrylen



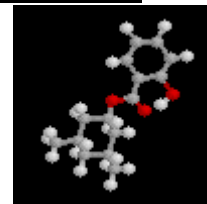
Etilheksil salisilat



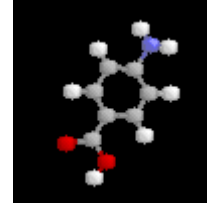
p-metoksisinamat



Homosalat

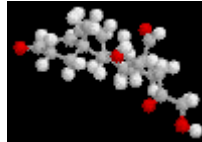


p-aminobenzoic acid

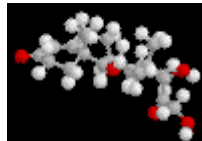


6. Visualisasi berbagai jenis senyawa organik: Hormon

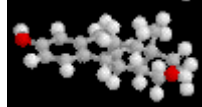
Aldosteron



Cortisol



Estradiol



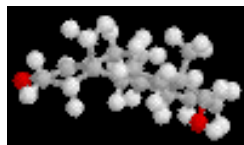
Norethindron



Progesteron

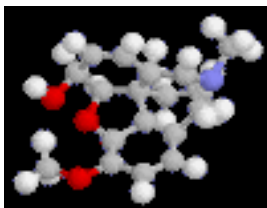


Testosterone

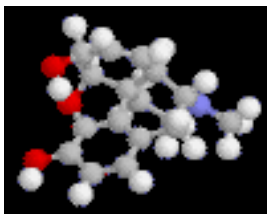


7. Visualisasi berbagai jenis senyawa organik : Turunan Morfin

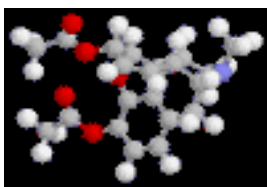
Codein



Heroin

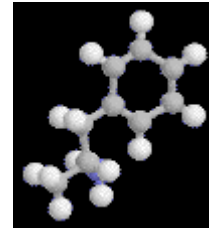


Morfin

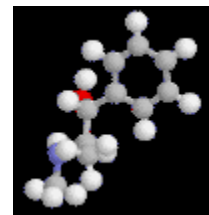


8. Visualisasi berbagai jenis senyawa organik : Neurotransmitters and Mimics

Amfetamin



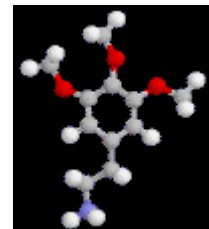
Ephedrine



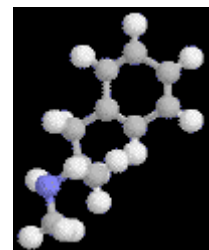
Epinefrin



Meskalin

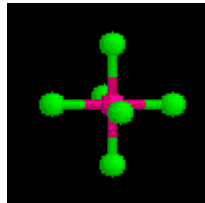


Metamfetamin

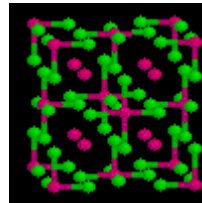


9. Visualiasi senyawa kompleks

Kalium heksakloroplatinat(IV), $K_2[PtCl_6]$



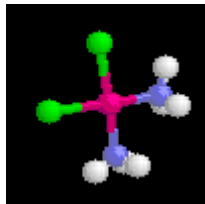
Gambaran ikatan koordinasi



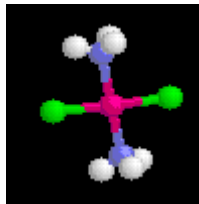
8 unit sel penyusun sel kristal.

Diamminedichloroplatinum(II), $Pt(NH_3)_2Cl_2$, cis and trans

Senyawa cis-platin, $cis-Pt(NH_3)_2Cl_2$, yang merupakan senyawa antikanker dengan penjualan terbesar. Isomer trans bersifat tidak aktif.



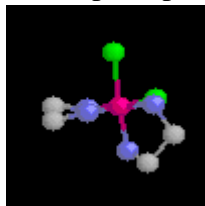
cis isomer.



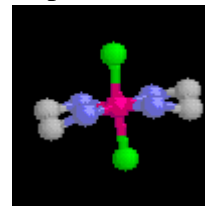
trans isomer.

Dichlorobis(ethylenediamine)cobalt(III), $Co(en)_2Cl_2^+$, cis and trans

Isomer trans akan didapatkan pada larutan dingin dan isomer cis pada larutan panas.



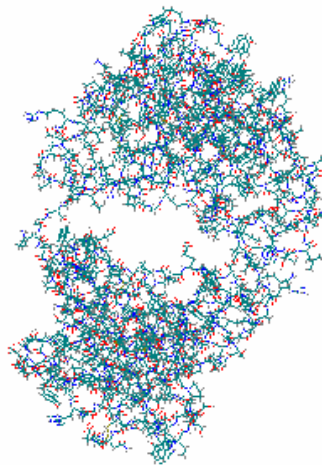
cis isomer.



trans isomer.

10. Visualisasi senyawa makromolekul : Immunoglobulin

```
HEADER IMMUNOGLOBULIN 29-NOV-88 1F19 1F19 3
COMPND R19.9 (IG*G2B=K=, /CRIS$==----A=) FAB FRAGMENT 1F19 4
SOURCE MOUSE (MUS $MUSCULUS) MONOCLONAL ANTIBODIES 1F19 5
AUTHOR M.B.LASCOMBE,P.ALZARI,R.POLJAK,A.NISONOFF
```

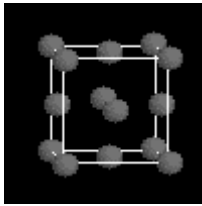


11. Visualisasi struktur kristal

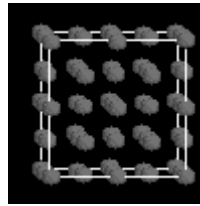
Materi ini dapat divisualkan dengan program PowderCell.

Face centered cubic or cubic close packed

Logam-logam Ag, Al, Au, Cu, Ir, Ni, Pb, Pd, Pt, and Rh, serta gas mulia Ar, Kr, Ne, and Xe.



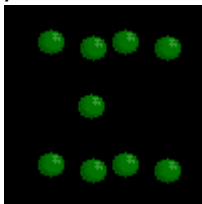
1 unit sel



8 unit sel

Hexagonal close packed

Be, β -Ca, Cd, α -Co, Hf, Mg, Os, Re, Ru, Sc, β -Sr, Tc, Ti, Tl, Y, Zn, and α -Zr.



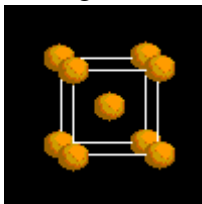
1 unit sel



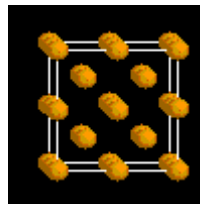
Struktur yang diperluas

Body centered cubic

Logam-logam Ba, Cr, Cs, α -Fe, K, Li, Mo, Na, Rb, Ta, V, dan W

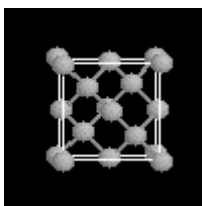


1 unit sel

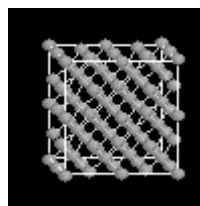


8 unit sel

Intan

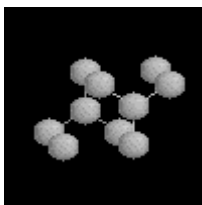


1 unit sel

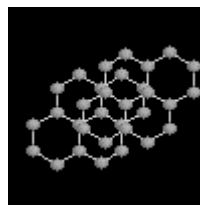


8 unit sel

Grafit

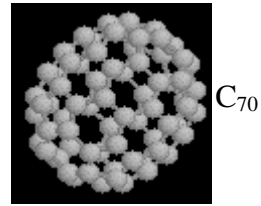
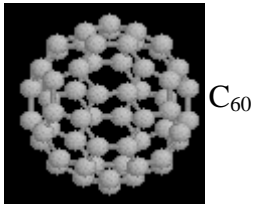


1 unit sel

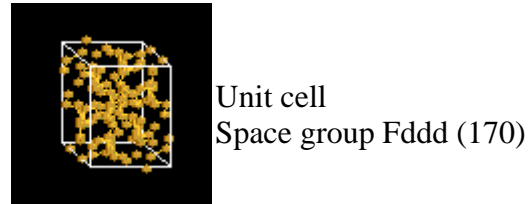
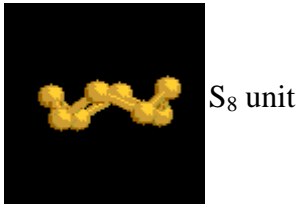


Struktur diperluas

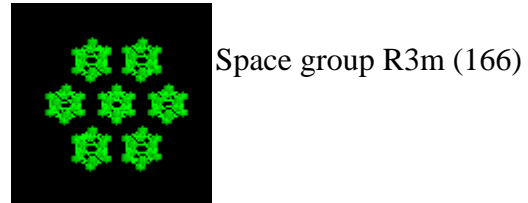
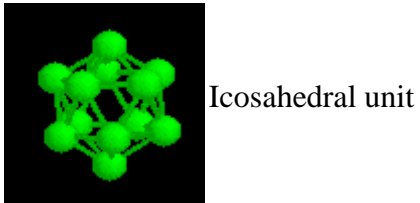
Buckminsterfullerene



Sulfur

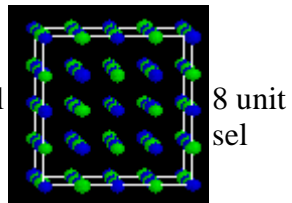
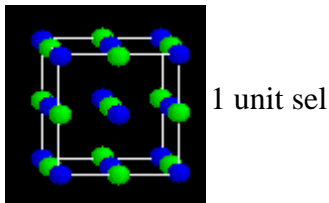


Boron

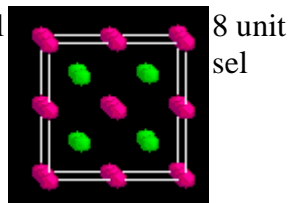
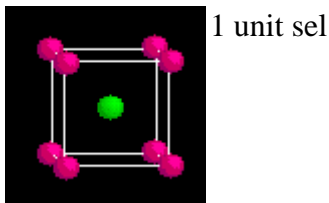


12. Visualisasi senyawa anorganik biner

Sodium chloride, NaCl



Cesium chloride, CsCl



PENUTUP

Kreativitas guru di dalam menerapkan praktek visualisasi pada pembelajaran ilmu kimia ini perlu ditingkatkan dan didukung oleh manajemen sekolah yang bersangkutan. Dengan pelaksanaan hal ini akan memberi tambahan minat bagi siswa untuk mempelajari ilmu kimia secara lebih baik serta dapat memberi nilai lebih bagi sekolah yang bersangkutan khususnya dalam rangka pelaksanaan kurikulum berbasis kompetensi. Beberapa materi dapat dipilih sesuai dengan tingkat dan kemampuan siswa atau bahkan diciptakan materi-materi baru yang relevan dengan perkembangan ilmu pengetahuan. Sebagai contoh pada bagian ini telah dipikirkan beberapa model senyawa-senyawa yang banyak dijumpai di kehidupan sehari-hari. Guru kimia selain menyajikan visual dari model molekul tersebut juga dapat memberikan wawasan yang terkait dengan konteks molekul tersebut.

Untuk implementasi serta sosialisasi di sekolah-sekolah, lembaga Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC) – Jurusan Kimia FMIPA UGM membuka diri untuk membantu pengembangan hal ini. AIC menyediakan fasilitas serta sumber daya manusia yang bersedia untuk menindaklanjuti pengembangan kegiatan ini.

DAFTAR PUSTAKA

Grant, G.H.dan Richards, W.G., 1995, *Computational Chemistry*, Oxford Science Publication, Oxford University Press. Oxford.

Leach, A.R., 1996, *Molecular Modelling : Principles and Applications*, Addison Wisley, Longman, Southampton University, London.

Website : <http://www.molecules.org/>