 Austrian Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA
Universitas Gadjah Mada (UGM)

KIMIA KOMPUTASI Informasi Kuliah


Drs. Iqmal Tahir, M.Si.

Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry, Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Gadjah Mada, Sekip Utara, Yogyakarta, 55281

Tel : 0857 868 77886; Fax : 0274-545188
Email : iqmal@ugm.ac.id atau iqmal.tahir@yahoo.com

Website :
<http://iqmal.staff.ugm.ac.id>
<http://iqmaltahir.wordpress.com>


KIMIA KOMPUTASI (Computational Chemistry)



"Computational chemistry simulates chemical structures and reactions numerically, based in full or in part on the fundamental laws of physics."

Foresman and Frisch
In Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 1996

Penggunaan komputer untuk membantu kebutuhan penyelesaian masalah dalam bidang kimia meliputi kajian-kajian secara molekular yang kemudian dikaitkan pada sistem makroskopisnya. Kajian menerapkan berbagai konsep teori kimia fisik (khususnya kimia kuantum) dan ditunjang konsep lain (khemometri, informasi, dan lain-lain) yang diselesaikan dengan perhitungan yang terprogram di komputer.

 Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA, UGM

MATERI KULIAH KIMIA KOMPUTASI S1


Mata kuliah Kimia Komputasi mencakup pembelajaran tentang konsep dasar kimia komputasi yang menyangkut metode kimia komputasi dan penerapannya

Materi kuliah kimia komputasi meliputi :

- Konsep dasar kimia komputasi dan pemodelan molekular, metode kimia komputasi yang meliputi metode mekanika molekular, semiempiris, ab initio DFT.
- Simulasi Molekular : Monte Carlo dan Dinamika Molekular
- Aplikasi rancang molekul / obat berbantuan komputer (CAMD) dan hubungan kuantitatif struktur-aktivitas (QSAR)
- Aplikasi spektroskopi

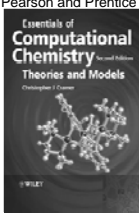
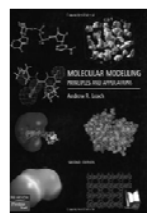
TUJUAN INSTRUKSIONAL UMUM


Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menjelaskan tentang beberapa metode kimia komputasi dan dapat membedakan keunggulan dan kelemahan setiap metode kimia komputasi sehingga dapat menerapkannya untuk pemodelan molekular.

 Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA, UGM

Buku pegangan

- Pranowo, H.D., Hetadi, A.K.R., 2011, Pengantar Kimia Komputasi, Penerbit Lubuk Agung, Bandung
- Cramer, C.J., 2004, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons, West Sussex
- Leach, A.R., 2001, Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition), Pearson and Prentice Hall

 Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA, UGM


PERKULIAHAN KIMIA KOMPUTASI S1

Perkuliahan

- Tatap muka
- Praktek perhitungan

Penilaian

- Tugas individu
- Ujian sisipan
- Ujian akhir

 Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA, UGM

Cek situs web :

<http://iqmal.staff.ugm.ac.id>



 Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA, UGM