



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

KIMIA KOMPUTASI

Pengantar Konsep Kimia Komputasi

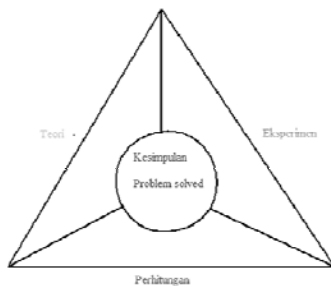
Drs. Iqmal Tahir, M.Si.

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.

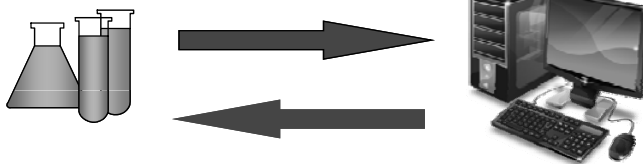


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia - FMIPA, UGM

2

Kimia komputasi

Ilmu kimia ini lebih banyak dipelajari dengan menggunakan komputer daripada dengan dikerjakan di laboratorium.



Komputer digunakan untuk perhitungan dan pemodelan untuk mengkaji aspek-aspek struktur, reaktivitas dan berbagai sifat molekul.

Perkembangan ilmu kimia komputasi saat ini berkembang cukup pesat karena :

- Kemajuan teknologi komputer yang terutama didukung oleh aspek kecepatan
- Desain dan struktur algoritma perhitungan kuantum yang semakin efisien

Perhitungan kimia komputasi dan pemodelan molekul dapat membantu untuk :

- Menerangkan konsep kimia dengan lebih rasional
- Dapat menerangkan kimia yang masih baru dan masih belum dikenal saat ini



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

Mengapa kimia perlu dilakukan di komputer ?

- Pemodelan relatif mudah dijalankan dibandingkan langkah eksperimen yang relatif banyak kendala
- Pemodelan umumnya aman dibandingkan kerja eksperimen yang memiliki risiko bahaya
- Pemodelan dapat dikatakan berbiaya minimal dibandingkan kerja eksperimen yang sangat mahal
- Pemodelan dapat diterapkan pada kebanyakan sistem kimia, sedangkan eksperimen relatif terbatas.
- Pemodelan dapat menghasilkan informasi langsung dibandingkan pengamatan eksperimen yang sering memerlukan interpretasi yang tidak jelas.
- Pemodelan dapat menghasilkan informasi mendasar tentang molekul yang terisolasi tanpa ada efek pelarut.



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

Prinsip pertimbangan dalam kimia komputasi

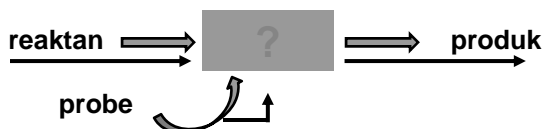
- Perhitungan kimia komputasi menerapkan suatu model dari apa yang nyata di alam
- Jadi peneliti itu hanya mempelajari model, bukan mempelajari alam nyata
- Data eksperimen merupakan representasi alam sehingga harus diutamakan dan lebih dipercaya dari hasil model.
- Suatu model hanya dapat dianggap valid jika hasilnya menyerupai data eksperimen.
- Prediksi dengan kimia komputasi dimungkinkan jika metoda kimia komputasi yang diterapkan sudah dapat terbukti menghasilkan model yang relatif akurat.



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

Manfaat pemodelan dengan kimia komputasi

- Pemodelan merupakan cara yang cepat, akurat dan relatif murah untuk
 - mempelajari sifat-sifat molekular
 - merasionalisasi dan membantu interpretasi suatu data eksperimen
 - membuat prediksi dari suatu sistem yang belum pernah dipelajari sebelumnya
 - Mempelajari sistem hipotesis
 - Merancang molekul baru
- Pemodelan dapat menjawab fenomena tersembunyi :



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

Contoh sifat-sifat molekular

- | | |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> ■ Energi <ul style="list-style-type: none"> • Free energy (ΔG) • Enthalpi (ΔH) • Entropi (ΔS) • Energy sterik (ΔG) | <ul style="list-style-type: none"> ■ Spektroskopi molekul <ul style="list-style-type: none"> • NMR (<i>Nuclear Magnetic Resonance</i>) • IR (<i>Infra Red</i>) • UV-vis (<i>Ultra Violet-visible</i>) • MW (<i>Microwave</i>) |
|---|---|
- Struktur 3D**

 - jarak
 - sudut
 - torsi
- | | |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> ■ Kinetik <ul style="list-style-type: none"> • Mekanisme reaksi • Konstanta laju | <ul style="list-style-type: none"> ■ Sifat-sifat elektronik <ul style="list-style-type: none"> • Orbital molekul • Distribusi muatan • Momen dipol |
|---|---|



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

Contoh sifat yang dapat dihitung dari kimia komputasi

- | | |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> ■ Struktur molekul ■ Struktur keadaan transisi ■ Spektra IR, NMR, UV ■ Energi reaksi ■ Energi penghalang ■ Energi disosiasi ■ Distribusi muatan ■ Laju reaksi ■ Energi bebas reaksi ■ Circular Dichroism (optical, magnetic, vibrational) ■ Spin-orbit couplings ■ Keadaan tereksitasi (vertical) ■ Efek solven ■ Nilai pKa | <ul style="list-style-type: none"> ■ Metoda fungsi kerapatan ■ Metoda korelasi lokal ■ Interaksi enzim-substrat ■ Struktur kristal (prediksi) ■ Sifat fisik melalui QSPR ■ Protein folding ■ Full reaction dynamics ■ Dinamika molekular ■ Dinamika solven ■ Systematic improvements of DFT ■ Keadaan tereksitasi (adiabatic)... |
|--|---|



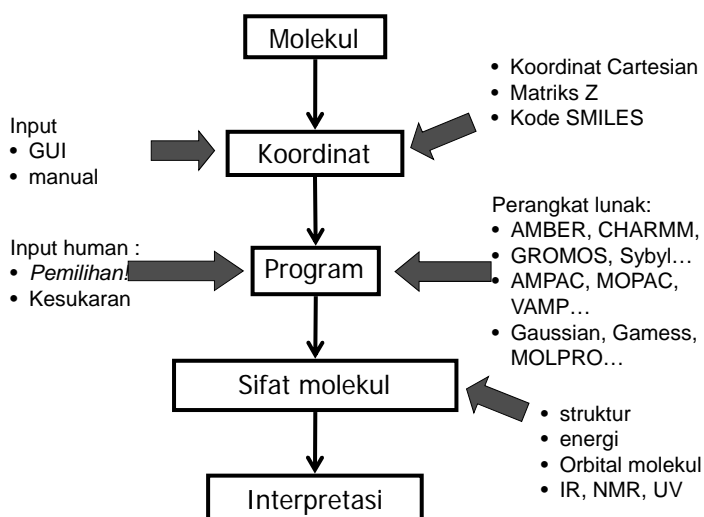
Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

Sifat yang dapat dihitung dari kimia komputasi

Urut sesuai tingkat kesukaran :

- Struktur molekul (+/- 1%)
- Enthalpi reaksi (+/- 2 kkal/mol)
- Frekuensi vibrasi (+/- 10%)
- Energi bebas reaksi (+/- 5 kkal/mol)
- Intensitas infra merah
- Momen dipol
- Laju reaksi (kesalahan masih sangat bervariasi)

Alur/flowchart perhitungan kimia komputasi



Overview Metoda Kimia Komputasi

- | | |
|--|---|
| <p>Metoda mekanika molekul (MM), medan gaya (<i>force fields</i>)</p> <ul style="list-style-type: none"> □ Mudah untuk diigunakan □ Mudah untuk diprogram □ sangat cepat □ Tidak memperhitungkan elektron (konsekuensinya kemampuan interpretasi terbatas) | <p>Metoda <i>ab initio</i></p> <ul style="list-style-type: none"> □ Metoda mekanika kuantum penuh □ Hanya melibatkan konstanta dasar ekseperiment □ Secara prinsip dapat memberikan akurasi tinggi □ Perhitungan relatif lengkap dengan memperhitungkan semua interaksi □ Kebutuhan konsumsi perhitungan sangat tinggi □ Terus membutuhkan peningkatan teknik secara sistematik |
| <p>Metoda mekanika kuantum semiempirik</p> <ul style="list-style-type: none"> □ Metoda mekanika kuantum □ Hanya memperthitungkan elektron valensi □ Cepat □ Akurasi terbatas | <p>Teori fungsi kerapatan (Density Functional Theory)</p> <ul style="list-style-type: none"> □ Metoda mekanika kuantum □ Secara prinsip "eksak" □ Lebih cepat daripada <i>ab initio</i> □ Akurasi bervariasi □ Tidak membutuhkan peningkatan teknik secara sistematik |



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

Pendekatan konseptual

- Validasi
- Interpretasi
- Prediksi

"...give us insight, not numbers" C. A. Coulson

- Merupakan hal yang mendasar untuk mengetahui tingkat akurasi data hasil perhitungan /pemodelan jika akan digunakan untuk menjawab dan menerangkan fenomena yang dipelajari.
- Kesepakatan bahwa akurasi target dikatakan memenuhi akurasi kimia :
Untuk energi jika berkisar pada daerah 1 kkal/mol (~4 kJ/mol).



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

Riset kimia komputasi

Apa yang ingin diketahui ? Mengapa ?

Ini merupakan tentang risetnya itu sendiri

Berapa akurasi yang diprediksi untuk diperlukan untuk menjawabnya?

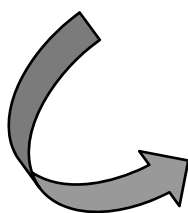
Digunakan sebagai dasar pemilihan metoda kimia komputasi yang paling sesuai

Berapa lama riset akan dijalankan ?

Digunakan sebagai dasar pemilihan metoda kimia komputasi yang paling layak.

Pendekatan dan asumsi seperti apa yang akan dibuat ? Mana yang signifikan ?

Diperlukan pemahaman untuk memperkirakan jawabannya.



Setelah semua terjawab, maka peneliti dapat menentukan perangkat lunak yang akan dipergunakan dengan ketersediaan aplikasi perhitungan dan kemampuan perangkat kerasnya.



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

Asesmen dan pertimbangan

Golden Rule:

- Sebelum menerapkan level teori pada situasi yang secara eksperimental belum dipahami, maka diperlukan penerapan hal itu pada situasi yang sudah jelas dipahami dengan dukungan data eksperimental yang tersedia.
- Tegasnya : Kalau level teori itu sudah dapat dibuktikan berhasil baik pada suatu eksperimen dengan dukungan data yang ada maka peneliti dapat mempertimbangkan penggunaannya untuk riset tersebut.
- Kebalikannya, jika teori tidak dapat bekerja dengan situasi yang sudah umum berlaku maka teknik tersebut jangan digunakan karena dapat menuntun hasil yang diperoleh sebagai kasus yang tidak dipahami.



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

Ada pertanyaan ?



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