



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

KIMIA KOMPUTASI

Ruang Lingkup Metoda Kimia Komputasi

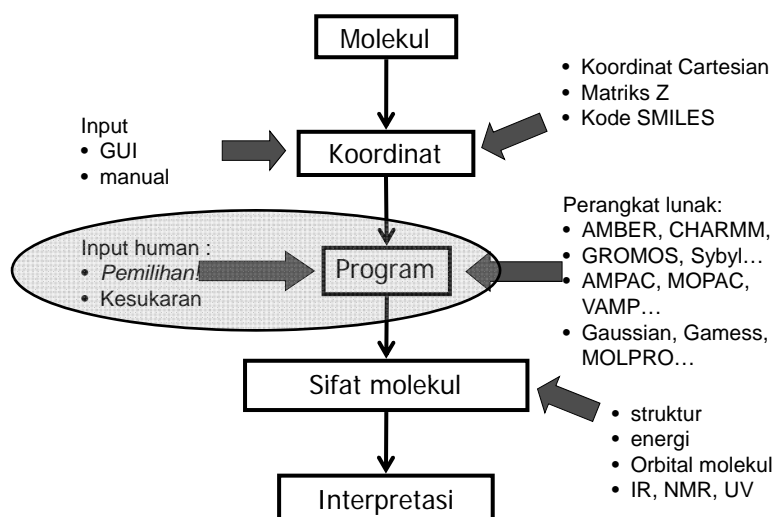
Drs. Iqmal Tahir, M.Si.

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>

Alur/flowchart perhitungan kimia komputasi



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

Overview Metoda Kimia Komputasi

Metoda mekanika molekul (MM), medan gaya (force fields)

- Mudah untuk diigunakan
- Mudah untuk diprogram
- sangat cepat
- Tidak memperhitungkan elektron (konsekuensinya kemampuan interpretasi terbatas)
- Akurasi tergantung dari parameter yang digunakan

Metoda mekanika kuantum semiempirik

- Metoda mekanika kuantum
- Hanya memperhitungkan elektron valensi
- Cepat
- Akurasi terbatas

Metoda *ab initio*

- 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

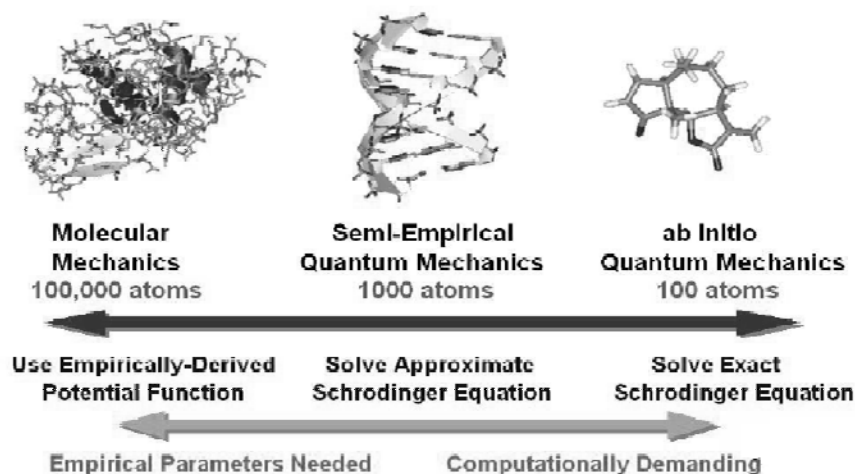
Teori fungsi kerapatan (Density Functional Theory)

- Metoda mekanika kuantum
- Secara prinsip "eksak"
- Lebih cepat daripada *ab initio*
- Akurasi bervariasi
- Tidak membutuhkan peningkatan teknik secara sistematik

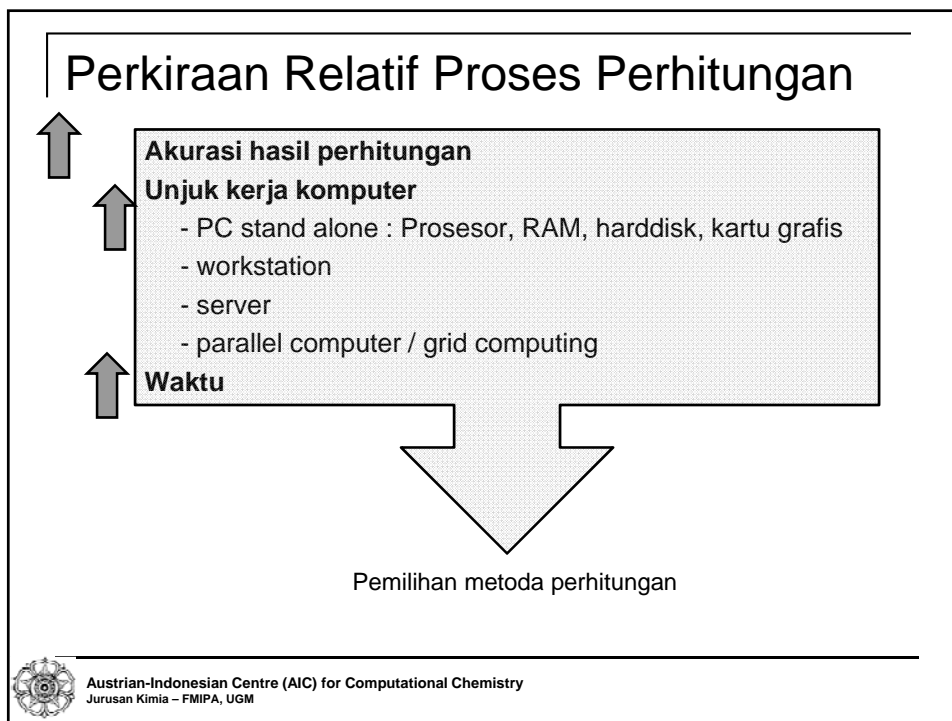


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

Perbandingan metoda kimia komputasi



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



Perkiraan Relatif Proses Perhitungan

- Mekanika Molekul :
Skala waktu perhitungan cpu sekitar akar kuadrat dari jumlah atom yang dihitung.
Molekul dengan jumlah atom total 300 dapat diselesaikan dalam waktu 1 menit di PC dan hitungan detik di komputer paralel.
MM dapat diterapkan ke molekul besar/makromolekul seperti peptida, protein, dll.
- Mekanika kuantum (Semi-empirical dan *ab initio*)
Waktu perhitungan oleh CPU adalah sekitar pangkat tiga sampai pangkat empat dari jumlah orbital atom (fungsi basis) pada basis set yang digunakan. Tergantung metoda yang digunakan.
Metoda semiempirik dapat digunakan pada senyawa dengan jumlah atom 300 dapat diselesaikan dalam waktu beberapa menit di PC dan kurang dari satu menit di komputer paralel.

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

Metoda Mekanika Molekular

- Perhitungan energi berdasarkan mekanika klasik (Newtonian energi)
- Menggunakan asumsi bahwa atom-atom berbentuk bola pejal dan ikatan menyerupai pegas. Hukum Hooke berlaku untuk setiap perhitungan

$$E_{\text{stretch}} = k_s (l - l_0)^2$$

C-C; C=O

0.5	1.23	303.753
0.6	1.23	226.233
0.7	1.23	160.113
0.8	1.23	105.393
0.9	1.23	62.073
1	1.23	30.153
1.1	1.23	9.633
1.2	1.23	0.513
1.3	1.23	2.793
1.4	1.23	16.473
1.5	1.23	41.553
1.6	1.23	78.033
1.7	1.23	125.913
1.8	1.23	185.193
1.9	1.23	255.873
2	1.23	337.953

- Energi total MM

$$E = E_{\text{bonds}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}} + E_{\text{non-bonded}}$$

$$E_{\text{non-bonded}} = E_{\text{electrostatic}} + E_{\text{van der Waals}}$$



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

Hasil Perhitungan MM

- Energi Sterik atau energi total :
Energi total = merupakan jumlahan dari beberapa komponen energi artifisial (yang tergantung dari parameter medan gaya yang digunakan)
- Enthalpi pembentukan
- Momen dipol
- Struktur molekul 3D (Geometri : panjang ikatan, sudut ikatan, sudut dihedral) dari konformasi terminimasi.



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

Beberapa Medan Gaya pada MM

- MM2, MM3 (Allinger)
- MMX (Gilbert, in PCModel)
- MM+ (HyperChem's version of MM2)
- MMFF (Merck Pharm.)
- Amber (Kollman)
- OPLS (Jorgensen)
- BIO+ (Karplus, part of CHARMM)
- (dll)



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

Mekanika Kuantum Ab Initio

- Menggunakan penyelesaian berdasarkan persamaan Schrödinger.
- Penyelesaian diselesaikan secara “eksak” dan sedikit parameterisasi.
- Dalam prakteknya sangat membutuhkan unjuk kerja dan waktu perhitungan.



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

Variasi Teori *Ab Initio*

- HF (Hartree-Fock)
 - elektron diperlakukan bercampur dengan elektron lainnya.
- Teori perturbasi Moller-Plesset
 - Melibatkan korelasi beberapa elektron : MP2, MP3
- Interaksi konfigurasi (*Configuration Interaction*)
 - QCISD, QCSID(T)
- Pemilihan himpunan basis (basis set) :
 - STO-3G, 3-21G, 6-31+G, 6-311G**, dll



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

Mekanika Kuantum Semiempirik

- Menggunakan perhitungan yang menyederhanakan persamaan Schrödinger untuk memperkirakan energi dari sebuah sistem (molekul) sebagai fungsi dari geometri dan distribusi elektronik.
- Penyederhanaan membutuhkan parameter-parameter yang diperoleh secara empiris (bukan teoritis) untuk memungkinkan nilai-nilai dihitung setuju dengan nilai-nilai yang diamati.
- Beberapa metoda semiempirik :
 - Hückel (treats π electrons only)
 - CNDO, INDO, ZINDO
 - MINDO/3
 - MNDO
 - **AM1, PM3**
 - dll



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

Hasil Perhitungan Mekanika Kuantum

- Energi (enthalpi pembentukan)
- Momen dipol
- Tingkatan energi orbital (HOMO, LUMO, dll)
- Distribusi elektron (kerapatan elektron)
- Potensial elektrostatik
- Frekuensi vibrasional (Spektra IR)
- Energi ionisasi
- Energy afinitas elektron (electron affinity)
- Spektra UV-Vis (selisih HOMO-LUMO)
- Aciditas dan basisitas (afinitas proton)
- Pergeseran kimia NMR dan konstanta coupling
- dll

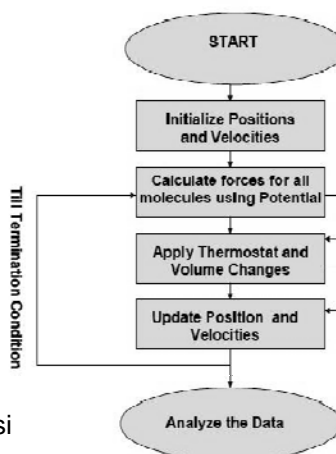


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

Metoda Kimia Komputasi

Simulasi Dinamika Molekular (Molecular Dynamics, MD)

- Simulasi komputer pada sistem sekumpulan atom-atom yang saling berinteraksi untuk dievaluasi secara numerik berdasarkan hukum Newton dengan mempertimbangkan energi potensial permukaan (potential energy surface, PES).
- Simulasi MD melibatkan waktu (dalam order ps) dan tergantung pada kondisi temperatur
- MD dapat menentukan struktur konformasi yang memiliki energi minimum.

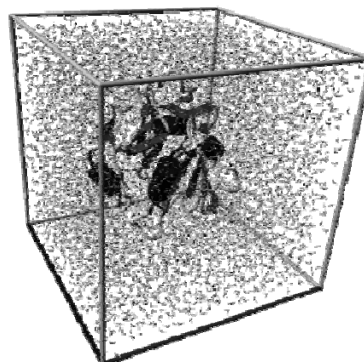


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

Metoda Kimia Komputasi

Simulasi Dinamika Molekular (Molecular Dynamics, MD)

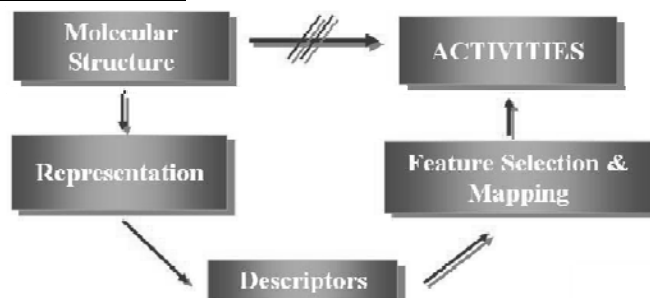
- Simulasi komputer yang melibatkan pelarut.
- Kondisi NVT : sistem diletakkan pada satu boks berukuran tertentu, ditentukan jumlah masing-masing komponen.



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

Metoda Kimia Komputasi

QSAR / QSPR.



QSAR : **Quantitative Structure - Activity Relationship**

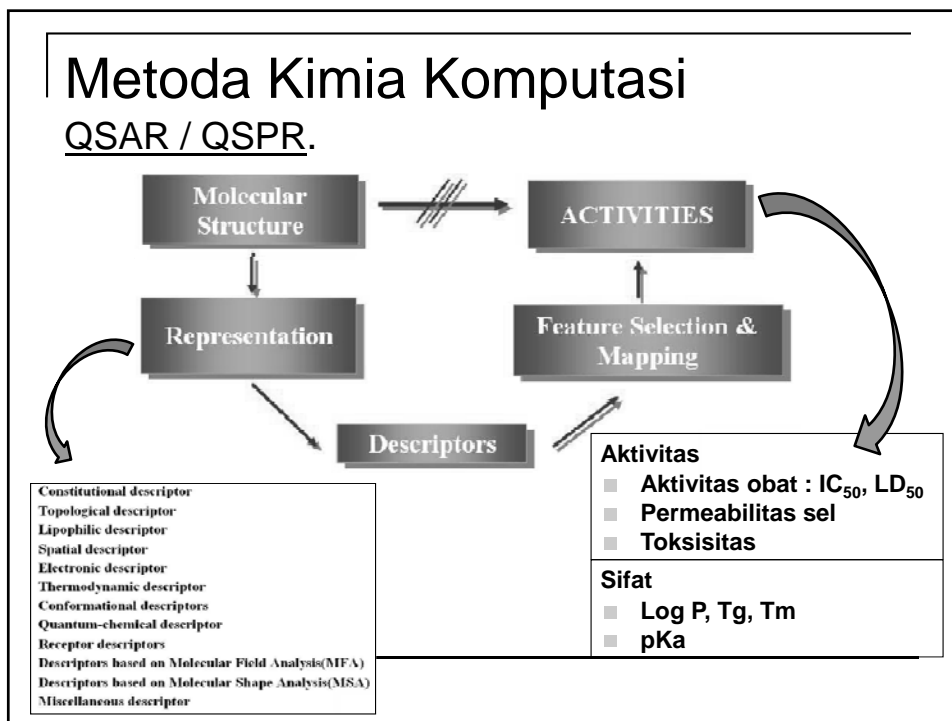
: Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas

QSPR : **Quantitative Structure – Property Relationship**

: Hubungan Kuantitatif Struktur dan Sifat



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



Metoda Kimia Komputasi

QSAR / QSPR.

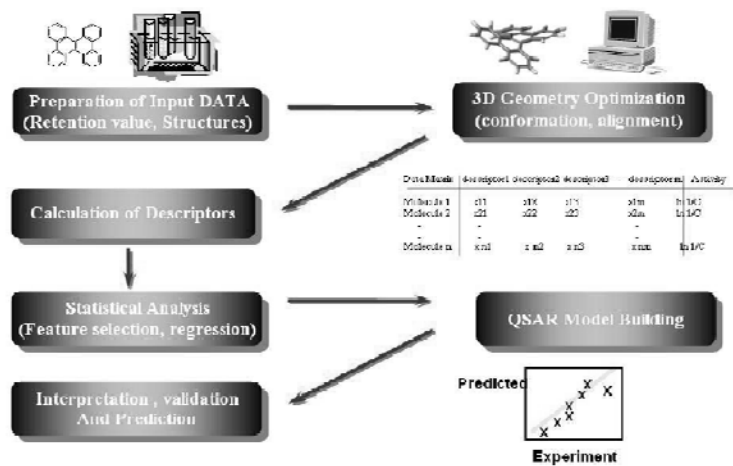
- QSAR digunakan untuk memprediksi sifat struktur baru atau memprediksi struktur yang harus memiliki sifat tertentu (misalnya, obat-obatan)
- Metoda QSAR :
 1. QSAR 2D : Metoda Free-Wilson, Teori Kontribusi Gugus`
 2. QSAR metoda Hansch

$$\text{Aktivitas} = f(\Delta E, \Delta H, \Delta S) + \text{konstanta}$$
 3. QSAR 3D : COMFA

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

Metoda Kimia Komputasi

QSAR / QSPR.



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