



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

## **KIMIA KOMPUTASI**

### **Anatomi Perhitungan Mekanika Molekul**

**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](mailto:iqmal@ugm.ac.id) atau [iqmal.tahir@yahoo.com](mailto:iqmal.tahir@yahoo.com)

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

## **PERHITUNGAN MEKANIKA MOLEKUL**

Ruang lingkup penerapan Mekanika Molekul (MM) meliputi :

- Molekul yang mengandung ribuan atom .
- Organik , oligonukleotida , peptida , dan sakarida
- Senyawa organollogam dan senyawa anorganik besar (zeolit).
- Sistem dalam keadaan terisolasi (vakum), dalam lingkungan pelarut secara implisit atau eksplisit .
- Model dalam keadaan dasar (ground state).
- Evaluasi sifat-sifat termodinamik dan kinetika ( melalui kajian simulasi dinamika molekul ).

Kecepatan komputasi untuk MM yang relatif cepat memungkinkan untuk digunakan dalam prosedur –prosedur yang memerlukan sejumlah besar energi seperti :

- Simulasi dinamika molekuler
- Pencarian energi konformasi
- Kajian molecular docking



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

## Prinsip Dasar MM

- Inti dan elektron disatukan dalam satu sistem berupa partikel menyerupai atom (atom like particle).
- Partikel menyerupai atom ini berbentuk bulat (sferik) dengan jari-jari yang diperoleh dari hasil pengukuran/teoritik dan memiliki muatan bersih (diperoleh secara teoritik).
- Interaksi didasarkan pada potensial pegas dan mekanika klasik (hukum Hooke).
- Interaksi dibedakan interaksi terkait ikatan dan non ikatan, dengan memperhatikan keadaan kesetimbangannya.
- Interaksi harus sudah diujikan dalam daftar himpunan dari atom-atom tertentu.
- Interaksi akan menentukan distribusi spasial partikel dan energi konformasinya.

Perhatikan bahwa prinsip-prinsip ini berbeda dari mekanika kuantum. Apakah perbedaan prinsipnya ?



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

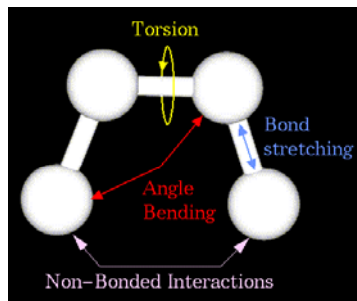
## Beberapa Sifat Perhitungan MM

- Dengan model bola pejal dan pegas maka representasi geometri keseimbangan relatif lebih baik dari model rigid.
- MM mampu untuk menghitung energi regangan relatif
- Dari sisi teknis, perhitungan relatif murah dan cepat
- Memerlukan banyak parameter empiris yang harus diuji dan dikalibrasi dengan hati-hati
- Terbatas untuk kesetimbangan geometri
- Tidak mengambil interaksi elektronik memperhitungkan
- Tidak menghasilkan informasi tentang sifat atau reaktivitas
- Tidak mudah untuk mengkaji reaksi kimia karena melibatkan pembuatan dan melanggar ikatan.



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

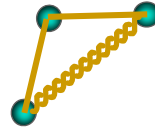
## MODEL STRUKTUR UNTUK MM



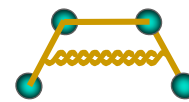
Ikatan / stretch



Sudut ikat / bend



Sudut torsi



Interaksi antar atom pada MM meliputi :

- Interaksi terkait ikatan (pada atom-atom yang berikatan langsung)
  - Ikatan : 1-1, 2-3, 3-4
  - Sudut ikatan : 1-2-3, 2-3-4
  - Sudut torsi /dihedral: 1-2-3-4
- Interaksi terkait non ikatan
  - Elektostatik : 1-4
  - Van der Waals

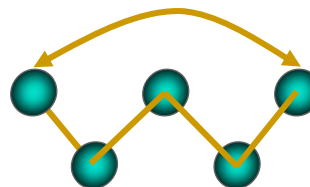
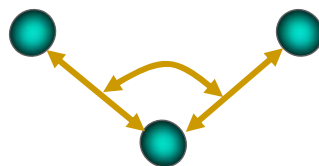


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry  
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

## Kontribusi Energi Tambahan

- Untuk interaksi ikatan juga dimungkinkan melibatkan suku energi kombinasinya
- Atom-atom yang tidak terikat langsung dapat memberikan gaya tersendiri.
- Interaksi ini direpresentasikan pada kontribusi energi interaksi non atomik (elektrostatik, VDW) dan kombinasinya.

Non-bonded



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

## Energi Potensial pada MM

Energi potensial pada MM merupakan total kontribusi dari seluruh komponen energi-energinya.

$$\text{Energi potensial} = E_{\text{interaksi ikatan}} + E_{\text{interaksi non ikatan}}$$

$$\begin{aligned} \text{Energi potensial} = & E_{\text{stretch}} + E_{\text{bend}} + E_{\text{torsion}} + \\ & E_{\text{VdW}} + E_{\text{electrostatic}} + \\ & E_{\text{stretch-bend}} + E_{\text{torsion-stretch}} + \dots \end{aligned}$$

- $E_{\text{stretch}}$  Stretch energy = energi ikatan (untuk seluruh ikatan)
- $E_{\text{bend}}$  Bending energy = energi sudut (untuk seluruh sudut ikat)
- $E_{\text{torsion}}$  Torsional energy = energi hihedral (untuk seluruh sudut dihedral)
- $E_{\text{VdW}}$  van Der Waals energy (untuk seluruh pasangan atom > 1,3)
- $E_{\text{electrostatic}}$  Electrostatic energy (untuk seluruh pasangan atom >1,3)
- $E_{\text{stretch-bend}}$  Stretch-bend energy
- $E_{\text{torsion-stretch}}$  Torsion-stretch energy




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

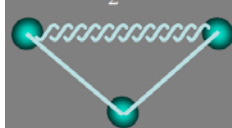
## Fungsi Energi Potensial

Energi ikatan :

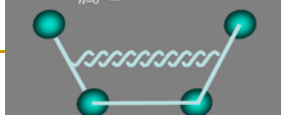
1. Energi ikat

$$v(l) = \frac{k}{2} (l - l_0)^2$$


2. Energi sudut

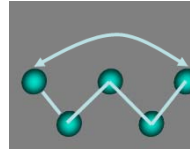
$$v(\theta) = \frac{k}{2} (\theta - \theta_0)^2$$


3. Energi dihedral

$$v(\omega) = \sum_{n=0}^N \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma))$$


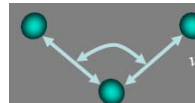
Energi

1. Energi van der Waals dan elektrostatis



$$v = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left[ 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right]$$

2. Energi kombinasi (cross-term):



$$v(l_1, l_2, \theta) = \frac{k_{\theta l_2}}{2} [(l_1 - l_{1,0}) + (l_2 - l_{2,0})](\theta - \theta_0)$$

## Energi Potensial pada MM

Energi potensial total :

$$V(r^N) = \sum_{\text{bonds}} \frac{k_i}{2} (l_i - l_{i,0})^2 + \sum_{\text{angles}} \frac{k_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0})^2 + \sum_{\text{torsions}} \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma)) - \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left( 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right) + \text{cross terms}$$

Komponen energi potensial pada MM:

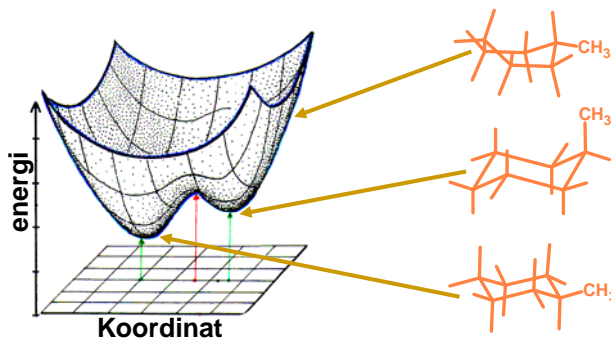
1. Interaksi terkait ikatan
  - Ikatan
  - Sudut ikatan
  - Sudut torsi /dihedral
2. Interaksi terkait non ikatan
  - Van der Waals
  - Elektrostatik



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

## Medan Gaya (Force Field) dan PES

- Sebuah medan gaya mendefinisikan untuk setiap PES molekul yang bersifat unik.
- Setiap titik pada PES merupakan konformasi molekul dengan ditandai data struktur dan energi.
- Energi adalah fungsi dari koordinat.



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

## Medan Gaya (Force Fields)

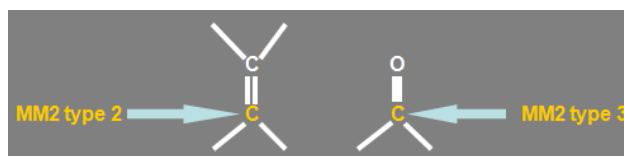
- Definisi
  - Berbentuk Fungsi Matematik (biasanya merupakan hasil kompromi antara akurasi hasil dan kemudahan perhitungan).
  - Terdiri dari parameter-parameter.
- Medan gaya bersifat empirik.
  - Tidak ada suatu bentuk medan gaya yang “benar”.
  - Medan gaya harus dievaluasi hanya berdasarkan asumsi dan kinerja yang terkait.
- Medan gaya diparameterisasi berdasarkan sifat-sifat tertentu seperti :
  - Sifat struktur
  - Energi
  - Spektra



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

## Medan Gaya: Tipe Atom

- Pada MM, atom-atom dibedakan berdasarkan masing-masing jenis dan tipenya.
- Tipe atom tergantung pada :
  - Nomor atom (contoh: C, N, O, H).
  - Pola hibridisasi (contoh:  $SP^3$ ,  $SP^2$ ,  $SP$ ).
  - Kondisi lingkungan (contoh : siklopropan, siklobutan).



- Medan gaya memiliki sifat “Transferability”. Sebagai contoh ikatan  $C=O$  akan berperilaku kurang lebih sama di semua molekul.

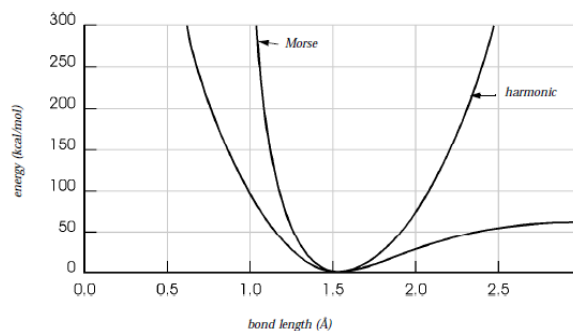


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry  
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

## Suku Energi Ikat (regangan, stretching)

- Potensial harmonik (AMBER)

$$V_{\text{stretch}} = \sum_{\text{bond}} K_r (r - r_0)^2$$



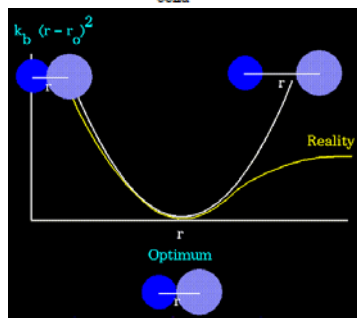
- Medan gaya disesuaikan dengan perhitungan potensial Morse yang sudah terbukti cukup baik.
- Meskipun tidak akurat, namun pada perhitungan mendekati keadaan energi minimumnya cukup baik. Dari sisi perhitungan masih dapat dilakukan secara cepat.



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

## Suku Energi Ikat – Parameter AMBER

$$V_{\text{stretch}} = \sum_{\text{bond}} K_r (r - r_0)^2$$



Bond	$r_0$ (Å)	$k$ (kcal mol <sup>-1</sup> Å <sup>-2</sup> )
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>3</sup>	1.523	317
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>2</sup>	1.497	317
Csp <sup>2</sup> =Csp <sup>2</sup>	1.337	690
Csp <sup>2</sup> =O	1.208	777
Csp <sup>3</sup> -Nsp <sup>3</sup>	1.438	367
C-N (amide)	1.345	719

- Termasuk tipe modulus keras (*hard mode*) : kurang begitu sensitif terhadap perubahan.



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

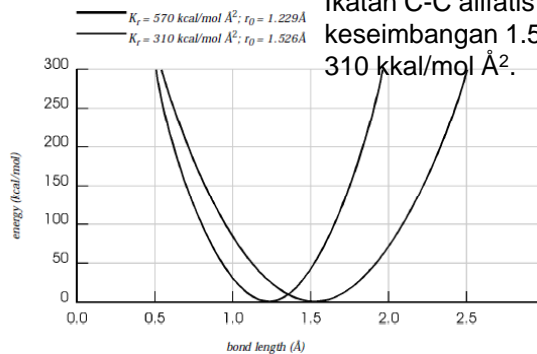
## Suku Energi Ikatan

$$V_{\text{stretch}} = \sum_{\text{bond}} K_i (r - r_0)^2$$

Contoh potensial harmonik (medan gaya AMBER) untuk :

Ikatan C-O karbonil : panjang ikatan keseimbangan 1.229 Å dan konstanta gaya 570 kkal/mol Å<sup>2</sup>.

Ikatan C-C alifatis : panjang ikatan keseimbangan 1.526 Å dan konstanta gaya 310 kkal/mol Å<sup>2</sup>.



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

## Suku Energi Ikatan – Variasi Medan Gaya

Bentuk potensial harmonik (AMBER) adalah :

$$v(l) = \frac{k}{2} (l - l_0)^2$$

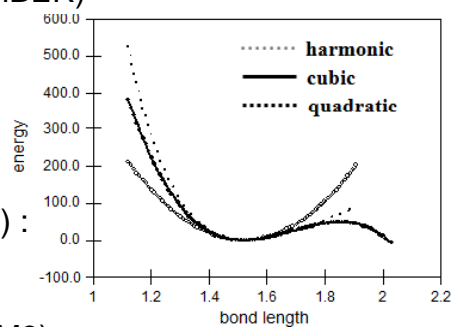
Bentuk medan gaya lainnya

- Bentuk potensial kubik (MM2) :

$$v(l) = \frac{k_1}{2} (l - l_0)^2 - \frac{k_2}{2} (l - l_0)^3$$

- Bentuk potensial kuadratik (MM3):

$$v(l) = \frac{k_1}{2} (l - l_0)^2 - \frac{k_2}{2} (l - l_0)^3 + \frac{k_3}{2} (l - l_0)^4$$



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



## Suku Energi Sudut Ikatan (Bengkokan)

- Bentuk potensial harmonik (AMBER) :

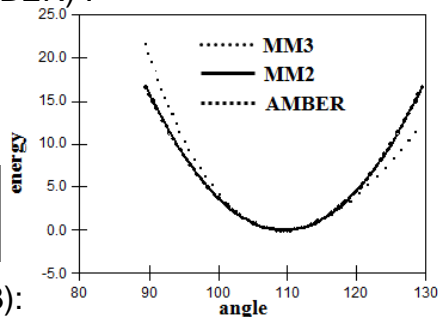
$$v(\theta) = \frac{k}{2}(\theta - \theta_0)^2$$

- Bentuk potensial kubik (MM2) :

$$v(\theta) = \frac{k1}{2}(\theta - \theta_0)^2 + \frac{k2}{2}(\theta - \theta_0)^6$$

- Bentuk potensial kuadratik(MM3):

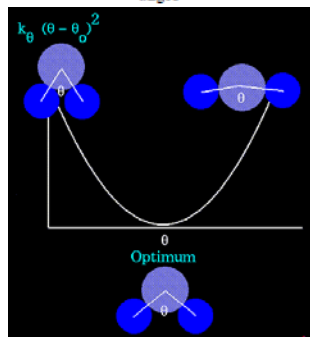
$$v(\theta) = \frac{k1}{2}(\theta - \theta_0)^2 + \frac{k2}{2}(\theta - \theta_0)^3 + \frac{k3}{2}(\theta - \theta_0)^4 + \frac{k4}{2}(\theta - \theta_0)^5 + \frac{k5}{2}(\theta - \theta_0)^6$$



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

## Energi Sudut – Parameter AMBER

$$V_{\text{bend}} = \sum_{\text{angle}} K_{\theta}(\theta - \theta_0)^2$$



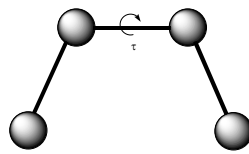
Angle	$\theta_0$	$k$ (kcal mol <sup>-1</sup> deg <sup>-1</sup> )
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>3</sup>	109.47	0.0099
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>3</sup> -H	109.47	0.0079
H-Csp <sup>3</sup> -H	109.47	0.007
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>2</sup> -Csp <sup>3</sup>	117.2	0.0099
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>2</sup> =Csp <sup>2</sup>	121.4	0.0121
Csp <sup>3</sup> -Csp <sup>2</sup> =O	122.5	0.0101

- Termasuk tipe modus keras (*hard mode*) : kurang begitu sensitif terhadap perubahan.
- Tetapi lebih sensitif dibandingkan suku energi ikat.

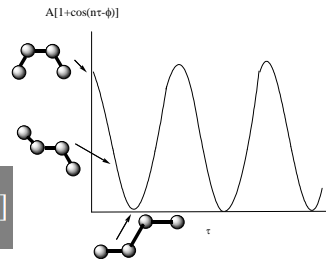


Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry  
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

## Suku : Energi Sudut Torsi



$$v(\omega) = \sum_{n=0}^N \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma))$$



- Suku ini mencerminkan adanya hambatan untuk rotasi di sekitar ikatan kimia.
- Bersama dengan suku energi non-ikatan yang akan bertanggung jawab untuk sebagian besar perubahan struktural dan energi.
- Energi torsi mewakili jumlah energi yang harus ditambahkan atau dikurangi dari suku-suku energi rentangan + energi bengkokan + energi interaksi tak-berikatan agar energi total sesuai dengan eksperimen
- Termasuk tipe modus lembut (*soft mode*) : sangat sensitif terhadap perubahan.



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

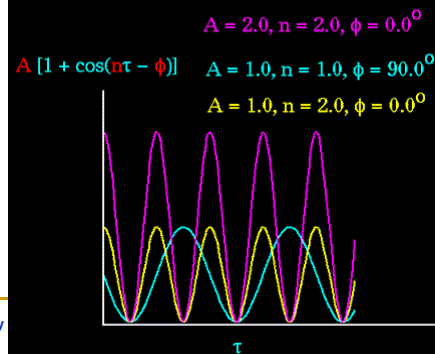
## Bentuk Umum Persamaan Energi Torsi

$$E = \sum_{\text{torsi}} A(1 + \cos(n\tau - \phi))$$

$$v(\omega) = \sum_{n=0}^N \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma))$$

- Parameter A : mengontrol amplitudo kurva ,
- Parameter n : mengontrol periodisitas
- Parameter "phi" menggeser seluruh kurva sepanjang sumbu sudut rotasi ( tau ) .
- Parameter yang ditentukan dari kurva fitting . Parameter unik untuk setiap sudut torsi dari setiap 4 atom yang berturutan berdasarkan jenis ato-atomnya (misalnya CCCC , COCN , HCCH , dll ) .

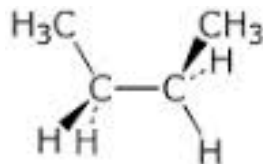
Potensi torsi dengan tiga kombinasi "A" , "n" , dan "phi" ditunjukkan pada plot berikut :



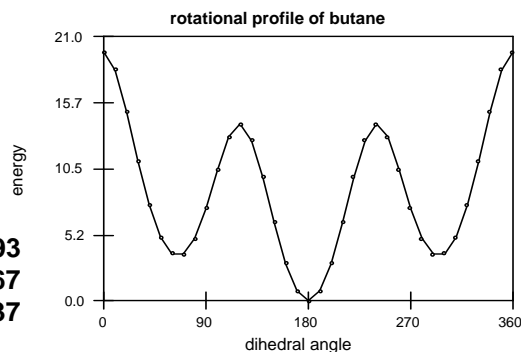
Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry  
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

## Contoh Energi Torsi Butana

- Energi torsi penghalang sumbu ikatan C-C bond pada butana adalah sekitar ~20kJ/mol.
- Seluruhnya terdapat 9 interaksi torsi pada sumbu ikatan C-C yang harus diperhitungkan untuk menghasilkan nilai energi torsi tadi.



#	Type	V1	V2	V3
1	C-C-C-C	0.200	0.270	0.093
4	C-C-C-H	0.000	0.000	0.267
4	H-C-C-H	0.000	0.000	0.237



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

## Suku Kombinasi (*Cross Terms*): Ikatan-Sudut Ikat (*Stretch-Bend*)

- Merupakan penggabungan antara beberapa suku energi
- Cukup penting untuk perhitungan struktur yang tidak biasa, misal sistem yang sangat regang dan untuk perhitungan spektra vibrasi.

**Stretch-Bend:** Jika sudut ikat bertambah besar maka ikatan yang terkait akan menyebabkan pengurangan interaksi antara atom 1 Dan 3.

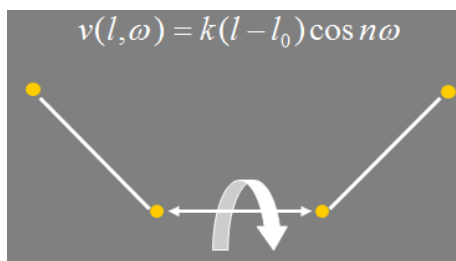
$$v(l_1, l_2, \theta) = \frac{k_{lb}}{2} [(l_1 - l_{1,0}) + (l_2 - l_{2,0})] (\theta - \theta_0)$$



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

## Suku Kombinasi: Ikatan-Sudut Torsi (*Stretch-Torsion*)

Stretch-Torsion: Untuk sudut torsi A-B-C-D, sumbu ikatan B-C akan memanjang jika ikatan A-B dan C-D berada pada posisi eklips.



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

## Interaksi Non-Ikatan

- Terjadi pada interaksi atom-atom di dalam satu molekul (*within molecule*) maupun atom-atom antar molekul (*between molecules*).
- Melibatkan interaksi ruang.
- Menggunakan model fungsi invers terhadap pangkat dari jarak antar atom.
- Termasuk modus sensitif (*Soft mode*).
- Secara umum dibedakan menjadi:
  - **Interaksi elektrostatis.**
  - **Interaksi van der Waals (VdW)**



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

## Interaksi Elektrostatik

$$V_{intermoleclar} = \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^B \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad V_{intramoleclar} = \sum_{i=1}^A \sum_{j=i+1}^A \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

- $q_i, q_j$  adalah muatan atom.
- Interaksi muatan-muatan atom ini terpisah pada kisaran jarak tertentu (berkurang sebanding dengan  $r^{-1}$ ).
- Jika  $q_i, q_j$  terpusat pada inti atom maka hal ini dapat dipertimbangkan sebagai muatan atom parsial.
- Nilai ini dapat diperoleh dari :
  - Disesuaikan pada suatu nilai momen elektriknya (momen dipol, quadropole dll.)
  - Disesuaikan pada sifat-sifat termodinamikanya.
  - Dari hasil perhitungan *Ab initio* : Potensial elektrostatik



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

## Interaksi Van Der Waals (VdW)

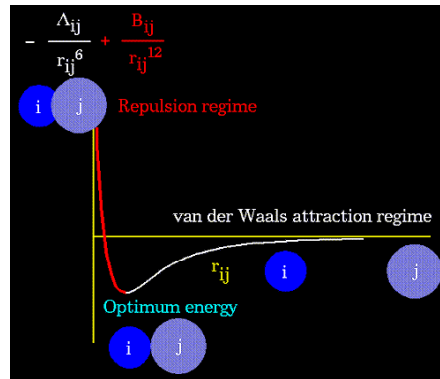
- Interaksi elektrostatik tidak dapat memperhitungkan seluruh interaksi non ikatan yang ada di dalam suatu sistem.
- Interaksi VdW :
  - Kontribusi tarik-menarik (*attractive*, Gaya London)
    - Terjadi secara instan akibat dipol-dipol akibat awan elektron yang berfluktuasi.
    - Berkurang sebanding terhadap  $r^6$ .
  - Kontribusi tolak-menolak (*repulsive*)
    - Terkait tolakan inti.
    - Terjadi pada jarak yang pendek ( $r < 1$ ) dan meningkat sampai  $1/r$ .
    - Pada jarak yang cukup lebar akan berkurang sebanding dengan  $\exp(-2r/a_0)$  dengan  $a_0$  adalah jari-jari Bohr.



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

## Interaksi Van Der Waals (VdW)

- Potensial VdW yang teramati merupakan hasil dari kesetimbangan antara gaya tarik-menarik (*attractive*) dan gaya tolak menolak (*repulsive*) antar atom.



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

## Persamaan Interaksi VdW

- **Potensial Lennard-Jones**

$$v(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

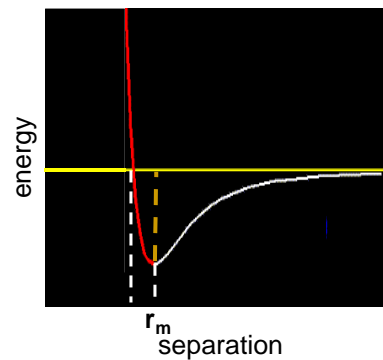
- Cukup cepat dalam proses perhitungan
- Kontribusi tarikan agak bersifat teoritik.
- Kontribusi tolakan mudah untuk dihitung tetap cukup tajam.

- **Bentuk Alternatif**

$$r_m = 2^{1/6} \sigma \approx \text{sum of VdW radii}$$

$$v(r) = \varepsilon \left\{ \left( \frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_m}{r} \right)^6 \right\}$$

$$v(r) = A/r^{12} - C/r^6 \quad A = \varepsilon r_m^{12} = 4\varepsilon \sigma^{12} \quad C = 2\varepsilon r_m^6 = 4\varepsilon \sigma^6$$



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

## Ikatan Hidrogen

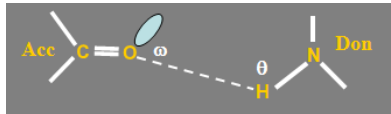
- Nilai energi ikatan hidrogen untuk konformasi geometri yang saling bebas (independent):

$$v(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{C}{r^{10}}$$

Dengan r adalah jarak antara atom donor ikatan hidrogen dan akseptor ikatan hidrogen.

- Nilai energi ikatan hidrogen untuk konformasi geometri yang saling tidak bebas (dependent) yakni dengan memperhitungkan aspek kolinearitas pada pasangan elektron bebas

$$v_{HB} = \left( \frac{A}{r_{H...Acc}^{12}} - \frac{A}{r_{H...Acc}^{10}} \right) \cos^2 \theta_{Don...H...Acc} \cos^4 \omega_{H...Acc...LP}$$



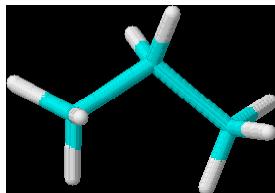
Austrian-Indonesian Centre (AIC) for Computational Chemistry  
Jurusan Kimia – FMIPA, UGM

## Contoh Perhitungan Medan Gaya MM

$$V(r^N) = \sum_{bonds} \frac{k_i}{2} (l_i - l_{i,0})^2 + \sum_{angles} \frac{k_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0})^2 + \sum_{torsions} \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma))$$

$$+ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N 4\epsilon_{ij} \left\{ \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right\}$$

Molekul propana C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>



- Ikatan
    - C-C x 2
    - C-H x 8
  - Sudut ikat
    - C-C-C x 1
    - C-C-H x 10
    - H-C-H x 7
- Sudut torsi
    - H-C-C-H x 12
    - H-C-C-C x 6
  - Non-ikatan
    - H-H x 21
    - H-C x 6



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