

TUGAS KIMIA KOMPUTASI

Dosen : Drs. Iqmal Tahir, M.Si

Email : iqmal@ugm.ac.id

Nama :

Tanggal :

No Mahasiswa :

Harap dikumpulkan di loker Drs. Iqmal Tahir, M.Si (jurusan Kimia FMIPA UGM).

Soal dan Pertanyaan :

- Menggunakan fasilitas perhitungan Energi Potential, gambarkan grafik energi sebagai fungsi dari sudut torsi mulai $0 - 360^\circ$, untuk molekul-molekul berikut :
 - Butana. $E = f(\text{torsi } C1-C2-C3-C4)$
 - 1,4-dikhloro etana. $E = f(\text{torsi } Cl1-C1-C2-Cl2)$
 - Dari masing-masing grafik jelaskan kedudukan minimum lokal dan minimum global yang diperoleh.
- Kestabilan bentuk kursi dan bentuk perahu dari senyawa sikloheksana dapat ditentukan dengan menentukan struktur yang paling stabil dari bentuk-bentuk tersebut. Dari perhitungan mekanika molekul dengan medan gaya AMBER, dihasilkan data energi struktur berikut:

Konformasi	Energi Single point (kkal/mol)	Energi teroptimasi (kkal/mol)
Kursi	3,6094	3,1102
Perahu	14,3245	11,4719

- Mengapa energi terhitung hasil optimasi selalu lebih rendah dari energi single point.
 - Jelaskan apa yang terjadi pada proses optimasi
 - Struktur mana yang lebih stabil dari dua bentuk sikloheksana tersebut. Gambarkan strukturnya. Seberapa besar (kkal/mol) kestabilan bentuk yang Saudara pilih relatif dari bentuk lainnya.
- Ulangi data perhitungan untuk sikloheksana dengan menggunakan perhitungan MM+

Konformasi	Energi teroptimasi (kkal/mol)	
	AMBER	MM+
Kursi		
Perahu		

Jawaban (gunakan lembar sebaliknya jika kurang) :