

**TUGAS KIMIA KOMPUTASI**

Dosen : Drs. Iqmal Tahir, M.Si

Email : iqmal@ugm.ac.id

Nama :

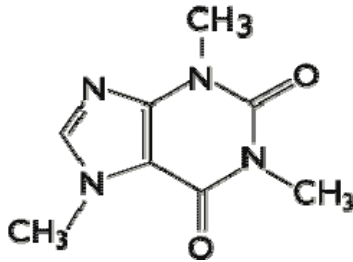
Tanggal :

No Mahasiswa :

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

**Soal dan Pertanyaan :**

1. Kafein adalah senyawa yang banyak dijumpai di bahan alam seperti biji kopi, teh, dan lain-lain. Struktur kafein seperti dijelaskan pada gambar berikut. Buatlah model struktur molekul kafein dan dengan berdasarkan optimasi menggunakan metoda mekanika kuantum semiempirik PM3 tentukan muatan atom kerangka utama penyusun kafein (dengan ketelitian 4 angka signifikan) dan hitunglah momen dipol kafein !



2. Senyawa khlorofenol adalah polutan dalam air dan senyawa ini dapat terdegradasi dengan bantuan katalis. Berdasarkan kestabilan dan reaktivitasnya, jelaskan kemampuan tingkat degradasi senyawa 2-khlorofenol dan 4-khlorofenol. Reaktivitas dapat ditentukan berdasarkan pertimbangan kuantitas  $\Delta(E_{\text{HOMO}}-E_{\text{LUMO}})$  yang dihitung dengan perhitungan mekanika kuantum. Petunjuk : Buatlah struktur dan lakukan optimasi geometri kedua struktur dengan menggunakan metoda semiempirik AM1.

Struktur	Struktur 2D	$E_{\text{HOMO}} / \text{eV}$	$E_{\text{LUMO}} / \text{eV}$	$\Delta(E_{\text{HOMO}}-E_{\text{LUMO}}) / \text{eV}$
2-khlorofenol				
4-khlorofenol				

**Jawaban (gunakan lembar sebaliknya jika kurang) :**