

PEMODELAN KIMIA KOMPUTASI

Bayu Prianto
Peneliti Bidang Material Dirgantara, LAPAN

RINGKASAN

Sejak lahirnya penemuan mekanika kuantum, dalam ilmu kimia berkembang bidang baru yaitu kimia komputasi. Kimia komputasi adalah cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (seperti gas, cairan, padatan, dan kristal cair), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Pemodelan kimia komputasi dapat membantu para kimiawan untuk : (1) Mendesain awal proses reaksi sintesis, (2) Mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi, (3) Melakukan simulasi reaksi dalam komputer, dan (4) Menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan.

1 PENDAHULUAN

Sejak dahulu kimia terkenal sebagai bidang ilmu yang berlandaskan pada percobaan/eksperimen. Karena memang semua penjelasan-penjelasan ilmiah yang dipaparkan selalu dilandaskan pada hasil percobaan. Dalam arti bahwa pemahaman kimia atau teori-teori baru timbul setelah melakukan pengamatan terhadap hasil-hasil percobaan. Begiru pula dengan bidang fisika, semua teori-teori baru timbul setelah melakukan pengamatan terhadap hasil-hasil percobaan.

Seiring dengan perkembangan ilmu pengetahuan, ilmu fisika mengalami perkembangan yang cukup pesat. Banyak teori-teori baru ditemukan, seperti penemuan bahwa partikel dapat bersifat seperti gelombang, atau sebaliknya gelombang dapat bersifat seperti partikel, sampai pada penemuan mekanika kuantum, dengan persamaannya yang terkenal adalah persamaan Schrodinger. Persamaan Schrodinger yang dihasilkan tersebut merupakan jantung bagi kebanyakan ilmu modern. Bentuk persamaan Schrödinger yang paling sederhana adalah

$$\nabla^2 \psi = -E \psi \quad (1-1)$$

Semua penemuan tersebut di atas hanya berlaku bila suatu partikel berukuran kecil dan memiliki energi yang kecil pula.

Sejak saat itu, pemahaman ilmu kimia tidak hanya terjadi karena pengamatan hasil-hasil percobaan, tetapi juga pengembangan teori mekanika kuantum, yaitu untuk meramalkan sifat-sifat dari suatu atom ataupun molekul. Akan tetapi, penyelesaian persamaan mekanika kuantum tidaklah mudah jika hanya menggunakan kalkulator tangan. Seiring dengan perkembangan ilmu komputer, maka kemampuan dari suatu komputer dapat dimanfaatkan untuk menyelesaikan persamaan mekanika kuantum. Hal ini menyebabkan lahir subbidang baru yaitu kimia komputasi yang merupakan bagian dari kimia teori.

2 PENGERTIAN KIMIA KOMPUTASI

Kimia komputasi adalah cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang ditentemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (atau banyak molekul protein gas, cairan, padatan, dan kristal cair), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Contoh sifat-sifat molekul yang dihitung antara lain struktur atom, energi dan selisih energi, muatan, momen dipol, kereaktifan, frekuensi getaran dan besaran spektroskopi lainnya. Simulasi terhadap makromolekul (seperti protein dan asam nukleat) dan sistem besar bisa

mencakup kajian konformasi molekul dan perubahannya (mis. proses denaturasi protein), perubahan fasa, serta peramalan sifat-sifat makroskopik (seperti kalor jenis) berdasarkan perilaku di tingkat atom dan molekul. Istilah *kimia komputasi* kadang-kadang digunakan juga sebagai ilmu komputer dan kimia. Oleh karena itu para kimiawan komputasi dituntut untuk dapat mengembangkan *hardware* maupun *software* dalam meningkatkan kemampuan komputer untuk menyelesaikan permasalahan kimia, serta untuk dapat mengubah data hasil perhitungan komputer menjadi data yang dapat divisualisasikan (seperti bentuk molekul) sehingga lebih mudah dipahami oleh para kimiawan lainnya.

Istilah kimia teori dapat didefinisikan sebagai deskripsi matematika untuk kimia, sedangkan kimia komputasi biasanya digunakan ketika metode matematika dikembangkan dengan cukup baik untuk dapat digunakan dalam program komputer. Perlu dicatat bahwa kata "tepat" atau "sempurna" tidak muncul di sini, karena sedikit sekali aspek kimia yang dapat dihitung secara tepat. Hampir semua aspek kimia dapat digambarkan dalam skema komputasi kualitatif atau kuantitatif hampiran.

Kimia komputasi kini menjadi salah satu bidang dengan pertumbuhan tercepat dalam kimia. Walaupun terdapat spesialis dalam bidang ini, penerapan teknik-tekniknya oleh kimiawan dalam percobaan semakin meningkat sejalan dengan berkembangnya kemampuan *software*,

3 METODE KOMPUTASI MOLEKUL

Metode komputasi molekul tidak selalu menggunakan teori ikatan kimia modern dan mekanika kuantum seperti dijelaskan sebelumnya. Komputasi molekul, dapat dipakai untuk penanganan molekul yang kompleks, bila memakai teori ikatan kimia modern dan mekanika kuantum.

Selain itu, dikembangkan metode lain, yang tidak dilandasi oleh ikatan kimia modern dan mekanika kuantum. Misalnya, metode mekanika molekul, yang mengabaikan kehadiran elektron dalam molekul. Ikatan kimia tidak lagi diperhitungkan sebagai akibat interaksi elektron-

elektron, melainkan disederhanakan dengan menggunakan prinsip-prinsip mekanika klasik (hukum-hukum fisika klasik). Molekul dianggap tersusun atas atom-atom yang berinteraksi satu sama lain melalui model interaksi yang sesuai dengan hukum-hukum mekanika klasik (hukum-hukum fisika klasik).

Jadi metode komputasi molekul secara sistematis dapat digolongkan dalam berbagai pendekatan berikut:

- Metode mekanika molekul, metode ini menggunakan dasar hukum-hukum fisika klasik sebagai perhitungannya.
- Metode mekanika kuantum, metode ini menggunakan dasar hukum-hukum fisika kuantum sebagai perhitungannya.
 - ^D Pendekatan teori struktur elektron
 - Metode semi empiris
 - Metode *ab initio*
 - Pendekatan teori fungsional kerapatan (DFT= *Density Functional Theory*)

Untuk mendapatkan hasil perhitungan komputasi dengan akurasi tinggi maka pada umumnya pendekatan yang digunakan (metode *ab initio*) adalah teori struktur elektron. Tetapi, pendekatan ini memiliki kekurangan, yaitu waktu perhitungan komputasinya lama dibandingkan dengan perhitungan yang menggunakan pendekatan mekanika molekul. Sedang Kelebihannya adalah pada umumnya menghasilkan perhitungan yang mendekati penyelesaian sebenarnya, karena semua pendekatan yang telah dibuat dapat dianggap cukup kecil secara numerik relatif terhadap penyelesaian sebenarnya. Secara umum, perhitungan dengan pendekatan struktur elektron (*ab initio*) memberikan hasil kualitatif yang sangat baik dan dapat memberikan kenaikan keakuratan hasil kuantitatif jika molekul yang dikaji semakin kecil.

Dalam metode struktur elektron ini menggunakan hukum mekanika kuantum sebagai dasar komputasinya.

4 PEMODELAN MOLEKUL

Model didefinisikan sebagai gambaran sederhana atau gambaran ideal dari suatu

sistem atau proses, seringkali dalam bentuk persamaan matematika, atau perencanaan yang digunakan untuk memfasilitasi perhitungan dan prediksi. Oleh karena itu pemodelan molekul tersebut terkait dengan cara untuk meniru perilaku molekul dan sistem molekul. Jika dahulu pemodelan molekul cukup dengan menggunakan mekanika fisika klasik dengan menggunakan sebuah pensil, kertas, dan kalkulator tangan. Kini pemodelan molekul terkait erat dengan pemodelan komputer, karena komputasi telah mengevolusi pemodelan molekul menjadi lebih luas lagi, sehingga banyak perhitungan yang tidak dapat dilakukan tanpa menggunakan sebuah komputer.

Para kimiawan komputasi sering berusaha memecahkan persamaan Schrödinger non-relativistik, dengan penambahan koreksi relativistik, walaupun beberapa perkembangan telah dilakukan untuk memecahkan persamaan Schrödinger yang sepenuhnya relativistik. Pada prinsipnya persamaan Schrödinger dapat diselesaikan secara teoritis dengan bergantung-waktu atau tak-bergantung-waktu yang disesuaikan dengan masalah yang dikaji, tetapi pada prakteknya tidak mungkin kecuali untuk sistem yang amat kecil. Karena itu, sejumlah besar metode hampiran dikembangkan untuk mencapai kompromi terbaik antara ketepatan perhitungan dan biaya komputasi.

Dalam kimia teori, kimiawan dan fisikawan secara bersama-sama mengembangkan algoritma dan program komputer untuk memungkinkan peramalan sifat-sifat atom dan molekul, dan/atau lintasan reaksi untuk reaksi kimia, serta simulasi sistem makroskopis. Kimiawan komputasi kebanyakan "sekedarnya" menggunakan program komputer dan metodologi yang ada dan menerapkannya untuk permasalahan kimia tertentu. Di antara sebagian besar waktu yang digunakan untuk hal tersebut, kimiawan komputasi juga dapat terlibat dalam pengembangan algoritma baru, maupun pemilihan teori kimia yang sesuai, agar diperoleh proses komputasi yang paling efisien dan akurat.

Terdapat beberapa pendekatan yang dapat dilakukan:

- Kajian komputasi dapat dilakukan untuk menemukan tirik awal untuk sintesis dalam laboratorium. Dalam arti bahwa ketika kita ingin mensintesis senyawa tertentu, banyak kemungkinan pereaksi yang dapat membentuk senyawa yang kita ingin sintesiskan tersebut. Begitu pula dengan pelarut, pelarut cukup banyak mempengaruhi reaksi. Peran komputasi disini adalah meramalkan dari sekian banyak pereaksi dan pelarut yang mungkin, pereaksi dan pelarut mana yang paling efektif dan efisien untuk membentuk senyawa yang kita inginkan. Sehingga para kimiawan tidak perlu melakukan *try and error* untuk mencari pereaksi dan pelarut yang efektif dan efisien untuk mensintesis senyawa yang kita inginkan.

Contoh:

Untuk sintesis Ammonium Perkhlorat (AP) (NH_4ClO_4)

Kemungkinan pereaksi yang mungkin:

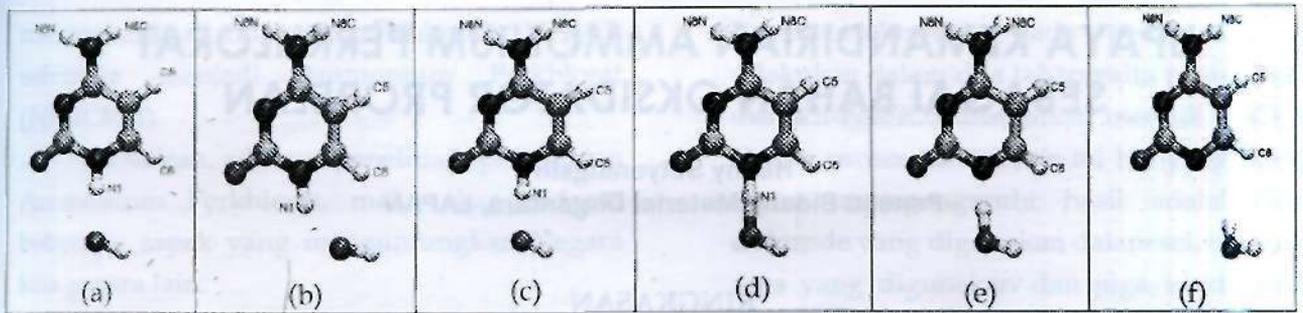
- NaClO_4 dengan NH_4Cl
- NaClO_4 dengan NH_4NO_3
- NaClO_4 dengan NH_4SO_4

maka dengan bantuan kimia komputasi, ternyata pereaksi NaClO_4 dengan NH_4Cl lebih efektif dan efisien untuk membentuk AP dilihat dari nilai kereaktifannya (nilai energi bebas Gibbs yang lebih kecil). Barulah kimiawan mensintesisnya dalam laboratorium, tanpa harus menguji dengan pereaksi-pereaksi yang lain.

- Kajian komputasi dapat digunakan untuk menelaah mekanisme reaksi dan menjelaskan pengamatan pada reaksi di laboratorium.

Contoh:

Proses penuaan dapat terjadi karena kerusakan pada basa DNA, kimiawan komputasi mengkajinya dengan mempelajari mekanisme kerusakan basa sitosin karena penyerangan radikal OH. Hasil simulasinya ditampilkan pada Gambar 4-1.



Gambar 4-1: (a) hingga (f) adalah potongan-potongan gambar yang diambil dari video simulasi reaksi dehidrogenasi radikal OH terhadap molekul sitosin, reaksinya berlangsung selama 576 femto detik (576×10^{-15} detik)

- Kajian komputasi dapat digunakan untuk memahami sifat dan perubahan pada sistem makroskopis melalui simulasi yang berlandaskan hukum-hukum interaksi yang ada dalam sistem. Sifat-sifat molekul, seperti energi, struktur, momen dipol, keterpolaran, atau *hyperpolarizability* merupakan beberapa besaran yang dapat dihitung lewat perhitungan.

Terdapat beberapa bidang utama dalam topik kajian tersebut di atas, antara lain:

- Penyajian komputasi atom dan molekul.
- Pendekatan dalam penyimpanan dan pencarian spesi kimia (Basisdata kimia).
- Pendekatan dalam penentuan pola dan hubungan antara struktur kimia dan sifat-sifatnya (QSPR, QSAR).
- Elusidasi struktur secara teoritis berdasarkan pada simulasi gaya-gaya.
- Pendekatan komputasi untuk membantu sintesis senyawa yang efisien.
- Pendekatan komputasi untuk merancang molekul yang berinteraksi lewat cara-cara yang khusus, khususnya dalam perancangan obat.
- Simulasi proses transisi fasa
- Simulasi sifat-sifat bahan seperti polimer, logam, dan kristal (termasuk kristal cair).

5 KESIMPULAN

Kimia komputasi adalah salah satu cabang ilmu kimia yang kini menjadi salah satu bidang dengan pertumbuhan tercepat dalam kimia. Walaupun terdapat spesialis dalam

bidang ini, penerapan teknik-tekniknya oleh kimiawan percobaan semakin meningkat sejalan dengan meningkatnya kemampuan dan semakin mudahnya komputer. Pemodelan kimia komputasi dapat membantu para kimiawan untuk : (1) Mendesain awal proses reaksi sintesis yang diinginkan, (2) Mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi yang mungkin terjadi dari desain yang telah dibuat, (3) Melakukan simulasi reaksi dalam komputer, **dan** (4) Menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan.

DAFTAR RUJUKAN

- Foresman, J. B., Frisch, JE., 1993. *Exploring Chemistry with Elektronik Structure Method*. 2nd edition. Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 3-7, 61-69, 97-99.
- Leach, Andrew R., 2001. *Molecular Modelling : Principles and Applications*. 2nd edition. Pearson Education Limited.
- Martoprawixo, Muhammad A., Grant & Richards, 1998. *Kimia Komputasi*. Penerbit ITB.
- Prianto, Bayu, 2005. *Irradiasi Sitosin : Studi Dehidrogenasi dengan Kehadiran Radikal OH Menggunakan Program CPMD*. Skripsi.