

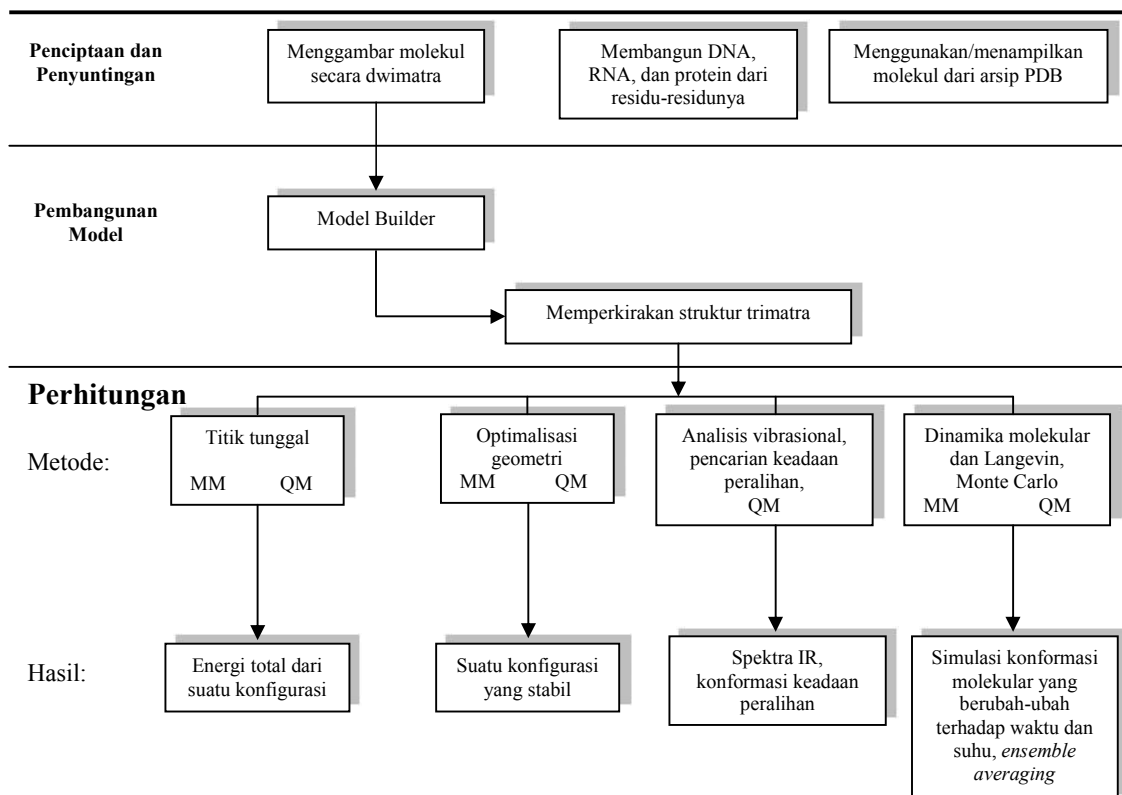
## MENGENAL HYPERCHEM

### Apa itu HyperChem?

HyperChem<sup>®</sup> ialah suatu program simulasi dan pemodelan molekular yang memungkinkan perhitungan kimiawi yang kompleks. HyperChem mencakup fungsi-fungsi berikut:

1. Membuat sketsa dwimatra (2D) molekul dari atom-atom penyusunnya, lalu mengubahnya menjadi model trimatra (3D) dengan HyperChem Model Builder.
2. Memilih residu-residu standar secara berurutan dari perpustakaan asam amino dan nukleotida HyperChem/Lite untuk membangun protein dan asam nukleat.
3. Membaca tipe atom dan koordinat molekular yang telah disimpan sebagai arsip HIN (masuk ke HyperChem yang dibuat sebelumnya) atau arsip ENT (mengambil dari sumber lain, yaitu Brookhaven Protein Data Bank/PDB)
4. Menata kembali molekul, misalnya dengan memutar atau menggesernya.
5. Mengubah kondisi tampilan, termasuk penampakan ruang, model molekular, dan label struktural.
6. Merancang dan melakukan perhitungan kimiawi, termasuk dinamika molekular. Tersedia berbagai metode mekanika molekular maupun mekanika kuantum (semiempiris atau *ab initio*). Perhitungan mekanika molekular menggunakan medan gaya MM+, AMBER, BIO+, atau OPLS, sedangkan mekanika kuantum semiempiris meliputi *extended* Hückel, CNDO, INDO, MINDO3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO/I, dan ZINDO/S.
7. Penetapan efek isotop dalam perhitungan analisis vibrasional untuk metode-metode SCF *ab initio* dan semiempiris.
8. Membuat grafik Excel dari hasil perhitungan kimiawi.
9. Mensolvasikan molekul dalam kotak periodik.

Ringkasan fungsi-fungsi utama HyperChem ditunjukkan pada Gambar 1.



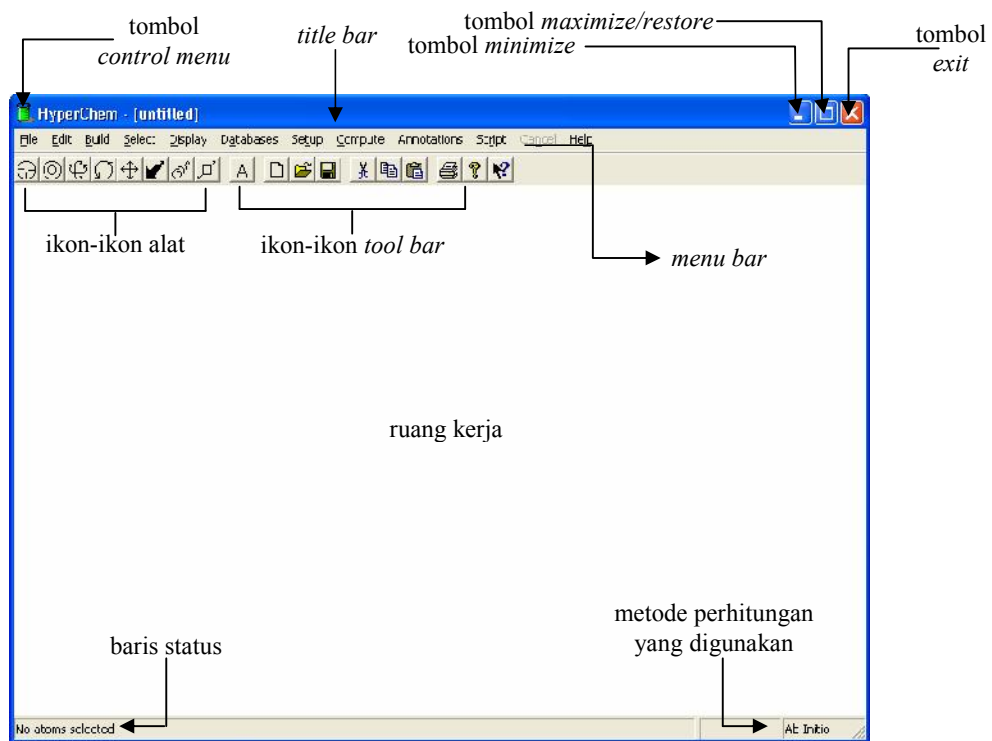
Gambar 1

### Jendela HyperChem 6.0

Untuk memulai HyperChem 6.0 minimal diperlukan program Windows 95. Klik-kiri Shortcut to HyperChem (Gambar 2), maka muncul tampilan awal jendela HyperChem seperti ditunjukkan pada Gambar 3.



Gambar 2



Gambar 3

Tiga bagian yang penting untuk Anda pahami adalah **Menu Bar**, **Tool Bar**, dan **baris status (status line)**. Deskripsi rinci dari ketiganya tidak dibahas di bab ini, dan akan dikupas satu per satu pada bab-bab selanjutnya.

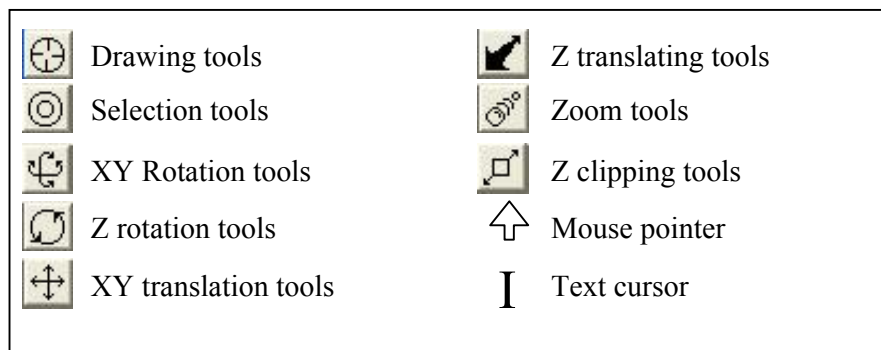
Pada *Menu Bar*, terdapat 12 menu, yaitu: File, Edit, Build, Select, Display, Databases, Setup, Compute, Annotations, Script, Cancel, dan Help. Untuk membuka menu atau *item* di dalam menu, Anda cukup mengklik-kiri menu atau *item* tersebut, atau menekan Alt+huruf yang bergaris bawah pada menu yang bersangkutan, lalu huruf yang bergaris bawah pada *item* yang diinginkan. Misalnya, menekan Alt+S lalu A berarti memilih *item* Atoms pada menu Select. HyperChem juga menyediakan beberapa jalan-pintas untuk membuka *item* tertentu, yang beberapa di antaranya disenaraikan pada Tabel 1.

Tabel 1.

Jalan-pintas	Item dalam menu	Jalan-pintas	Item dalam menu
Ctrl + N	File-New	Alt + F4	File-Exit
Ctrl + O	File-Open	Spacebar	Display-Scale to Fit
Ctrl + S	File-Save	F4	Display-Isosurface ...
Ctrl + X	Edit-Cut	F9	Edit-Copy Image
Ctrl + C	Edit-Copy	Esc	Cancel
Ctrl + V	Edit-Paste		

Ketika Anda memilih sebuah *item*, deskripsi ringkas *item* itu akan muncul pada baris status. Baris status juga menampilkan informasi-informasi seperti jumlah atom dalam molekul yang sedang ditampilkan pada ruang kerja, status perhitungan, atau nilai energi dan gradien.

Pada *Tool Bar*, terdapat 8 ikon alat yang berguna untuk menggambar, memilih, mengatur tampilan, serta menggerakkan atom dan molekul (Gambar 4).



Gambar 4

Apabila Anda mengklik-kiri salah satu ikon, maka bentuk kursor dalam ruang kerja akan menjadi seperti gambar pada ikon itu. Di sebelah kanan ikon alat, terdapat ikon *toolbar* yang menyediakan jalan-pintas untuk operasi-operasi seperti membaca dan menulis arsip (*file*), menggantung atau menyalin dan menempelkan struktur, serta menggunakan bantuan *on-line*.

### Warna Patokan (Default)

Secara patokan, ruang kerja HyperChem berwarna hitam, bukan putih seperti pada Gambar 3, maka menyulitkan untuk dicetak hitam-putih. Untuk mengubahnya, Anda klik-kiri *item* Preferences pada menu File, lalu pada kotak dialog Preferences, pilihlah salah satu warna (misalnya White) pada 'tab' Window Color. Serupa dengan itu, dengan menggunakan 'tab' Bond Color dan Selection Color, Anda dapat mengubah warna patokan, yaitu hitam dan hijau, berturut-turut untuk ikatan dan warna objek terpilih, menjadi warna lain atau garis tebal.

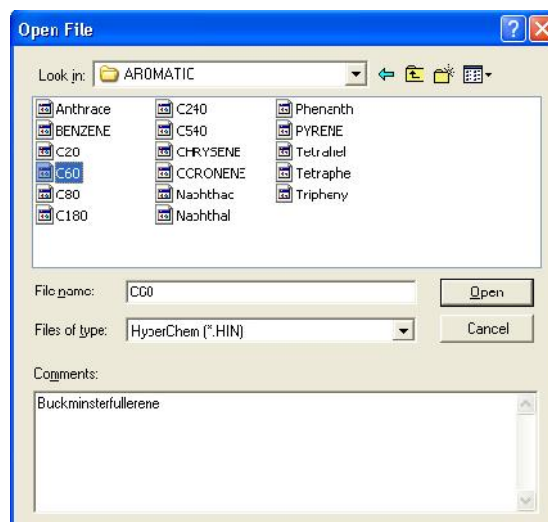
HyperChem juga memberikan warna patokan yang khas untuk setiap unsur. Daftar lengkap dapat Anda lihat dengan mengklik-kiri *item* Element Color pada menu Display. Beberapa yang penting disenaraikan pada Tabel 2.

Tabel 2.

Unsur	H, Cl, Al	C	N	O	F, P, S	Na
Warna	Putih	Cyan	Biru	Merah	Kuning	Ungu

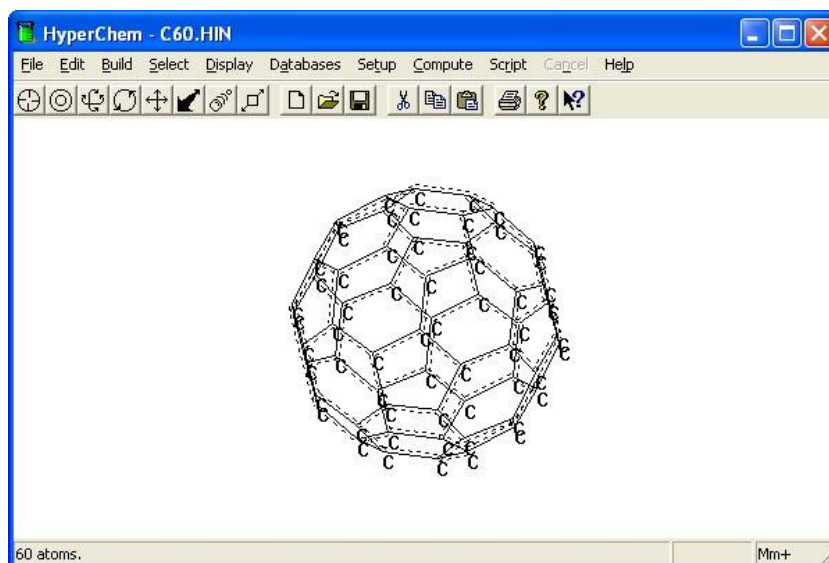
### Membuka Arsip HIN

1. Klik-kiri menu File. Perhatikan bahwa ada tanda elipsis (...) di depan beberapa *item*; ini berarti akan muncul kotak dialog jika *item* itu dibuka. Klik-kiri *item* Open ..., maka muncul kotak dialog Open File.
2. Pada kotak Files of type: cari HyperChem (\*.HIN) dan klik-kiri, lalu pada kotak Look in: cari direktori /SAMPLES/AROMATIC dan klik-kiri lagi.
3. Klik-kiri arsip C60.hin, dan pada kotak Comments akan tertulis 'Buckminsterfullerene' yang merupakan nama senyawa yang bersangkutan (Gambar 5).



Gambar 5

4. Klik-kiri sekali lagi atau klik-kiri tombol Open, maka pada ruang kerja akan muncul strukturnya, sedangkan pada baris status akan tertera jumlah atomnya (Gambar 6).



Gambar 6

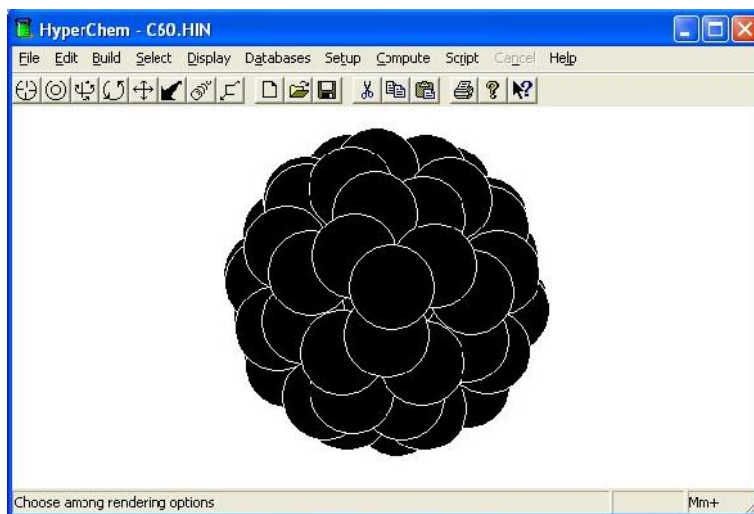
### Mengubah Model Molekul

Model molekul yang digunakan untuk tampilan pada Gambar 6 ialah model Sticks. Bergantung pada keperluan, kita dapat mengubah-ubah model yang digunakan. Caranya, klik-kiri Display-Rendering, lalu pada kotak dialog Rendering Options, klik-kiri “tab” Rendering Method. Ada 6 pilihan model molekul yang tersedia (Gambar 7).



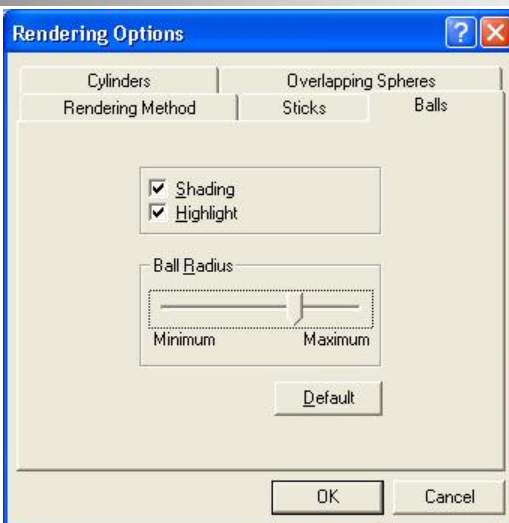
Gambar 7

1. Model Balls merupakan model pengisi-ruang yang kasar. Model ini digambarkan dengan lingkaran-lingkaran tidak berbayangan (*nonshaded*) yang tidak saling berpotongan (Gambar 8).



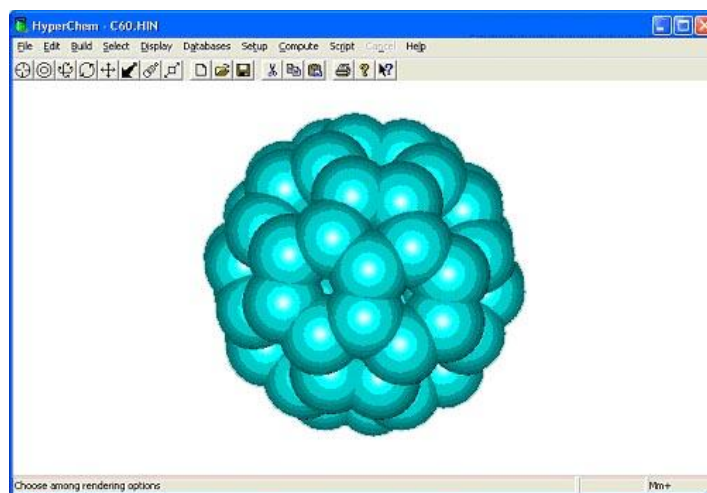
Gambar 8

Tampilan lingkaran seperti Shading, Highlight, atau jejari lingkaran dapat diatur pada lembar Balls Options (Gambar 9), yang dibuka dengan mengklik-kiri ‘tab’ Balls.



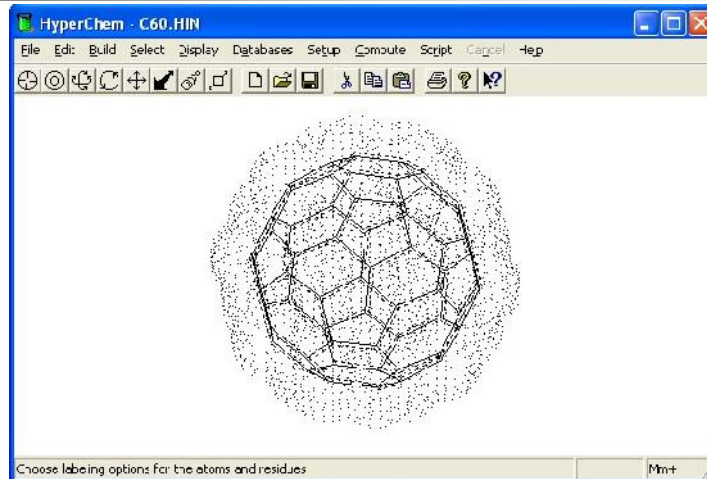
Gambar 9

2. Model Overlapping Spheres merupakan model pengisi ruang yang lebih halus dan realistis. Model ini digambarkan dengan bola-bola berbayangan (*shaded*), yang memperhitungkan perpotongan yang terjadi saat bola-bola itu berikatan (Gambar 10).



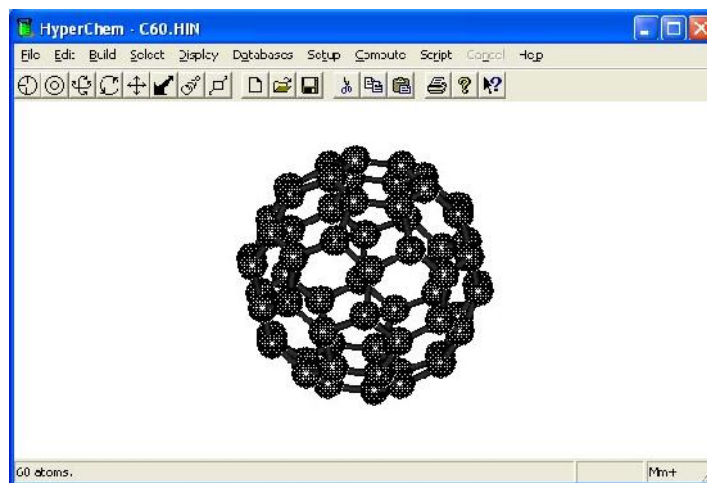
Gambar 10

3. Model Sticks & Dots memberikan gambaran yang lebih baik mengenai bentuk dan volume yang ditempati oleh molekul (Gambar 11). Jika Anda memilih model Dots, maka model Sticks dari Gambar 11 dihilangkan.



Gambar 11

4. Model Balls and Cylinders menghasilkan model bola dan tongkat (Gambar 12). Tampilan bola juga dapat diatur pada lembar Balls Options (Gambar 9).



Gambar 12

5. Untuk kembali ke model molekul yang digunakan sebelumnya, klik-kiri Display-Last Rendering atau tekan F2.

### Uji Mandiri

1. Bukalah arsip I3.HIN pada direktori /SAMPLES/VSEPR, lalu tampilkan dalam model Sticks. Dapatkah Anda menjelaskan distribusi elektron dan geometri molekulnya?
2. Bukalah arsip CAFFEINE.HIN pada direktori /SAMPLES/ORGANICS, lalu tampilkan dalam model Balls and Cylinders. Apakah nama IUPAC untuk molekul tersebut?
3. Bukalah arsip C180.HIN pada direktori /SAMPLES/AROMATIC, lalu tampilkan dalam model Balls. Apakah molekul itu termasuk kelompok senyawa fullerena?
4. Bukalah arsip CORONENE.HIN pada direktori/ SAMPLES/AROMATIC, lalu tampilkan dalam model Overlapping Spheres. Ada berapa cincin aromatik dalam molekul itu?