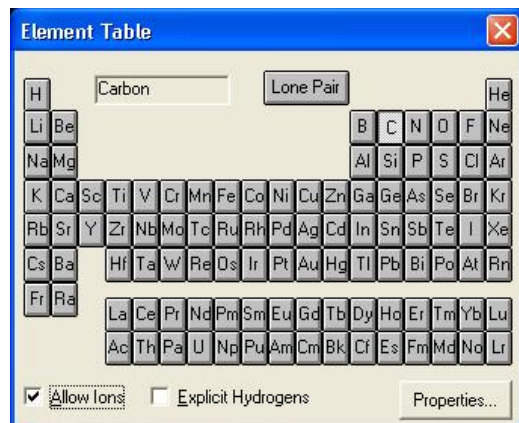


TEKNIK MENGGAMBAR DAN MENYUNTING

Menggambar Atom dan Ikatan

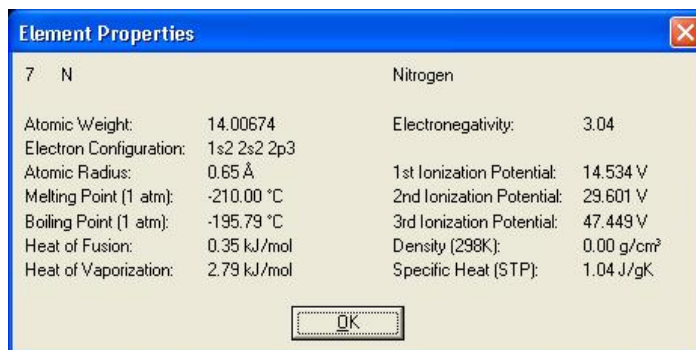
Dalam HyperChem, penggambaran suatu molekul secara dwimatra diawali dengan menggambar salah satu atom penyusunnya sebagai berikut:

1. Klik-kiri Build-Default Element atau klik-kiri dua kali *Drawing tool* sehingga tampil kotak dialog Element Table. Pada tabel periodik, unsur patokan yang secara otomatis terpilih ialah karbon (Gambar 13).



Gambar 13

2. Jika ingin memilih unsur lain, misalnya nitrogen, klik-kiri lambang unsurnya (N). Untuk melihat sifat-sifat unsur itu, klik-kiri tombol Properties atau tekan Shift dan klik-kiri lambang unsur itu untuk membuka kotak Element Properties (Gambar 14).

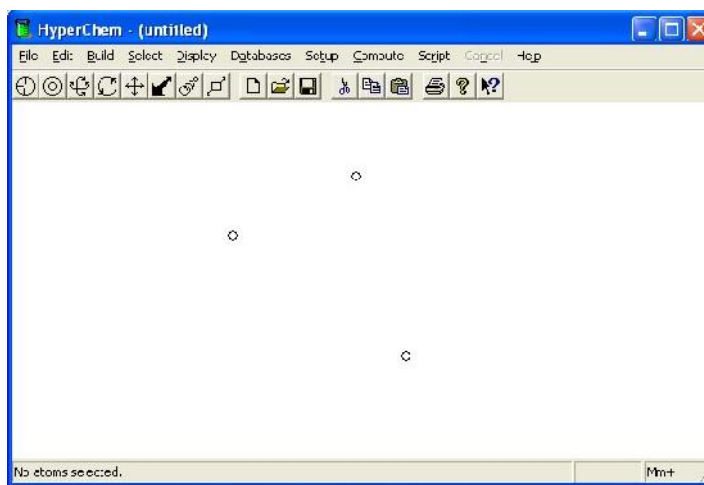


Gambar 14

Klik-kiri OK untuk menutupnya kembali.

3. Jika Allow Ions atau Explicit Hydrogens aktif (ditandai oleh tanda \checkmark), klik-kiri pilihan-pilihan ini untuk mematikannya, lalu tutup kotak dialog. Jika Allow Ions aktif, Anda dapat membuat ikatan dengan jumlah bebas dari sebuah atom. Dengan mematikannya, ikatan yang dapat digambar hanyalah sebanyak valensi atom itu, sebab Model Builder tidak mengakomodasi adanya muatan formal pada sistem molekular. Jika Explicit Hydrogens aktif, atom-atom hidrogen Anda tambahkan dalam jumlah tertentu, maka jumlahnya dapat kurang dari atau melebihi yang ditambahkan secara otomatis oleh Model Builder. Pengaktifan Allow Ions dan Explicit Hydrogens berguna dalam menggambar ion.
4. Klik-kiri *Drawing tool* dan gerakkan kursor ke daerah yang diinginkan pada ruang kerja.

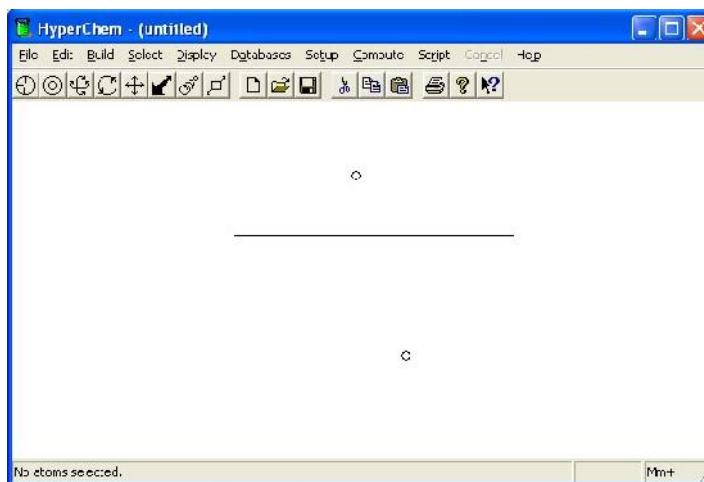
5. Klik-kiri untuk menggambar sebuah atom karbon (berupa lingkaran kecil). Sebagai latihan, coba Anda gambarkan 3 atom karbon seperti pada Gambar 15.



Gambar 15

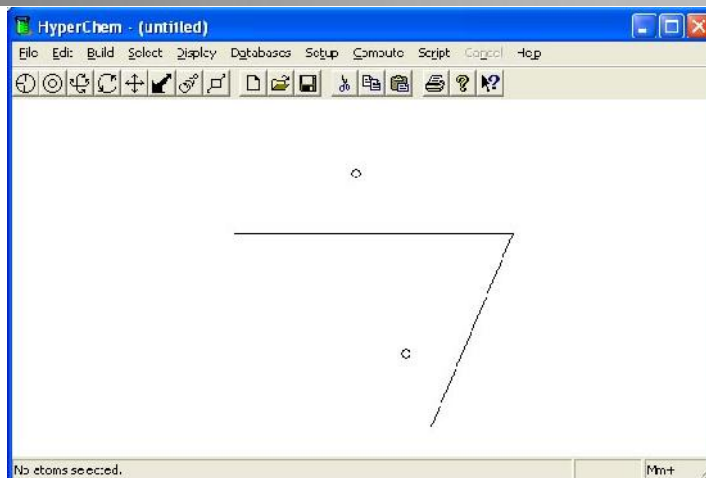
Tahap selanjutnya ialah menggambar ikatan dari atom itu:

1. Gerakkan kursor ke atas salah satu atom karbon, lalu seret (*drag*)-kiri sehingga terbentuk garis yang menggambarkan sebuah ikatan yang berawal dari atom karbon itu.
2. Lepaskan *mouse*; titik saat Anda melepaskannya merupakan atom karbon yang kedua (Gambar 16).



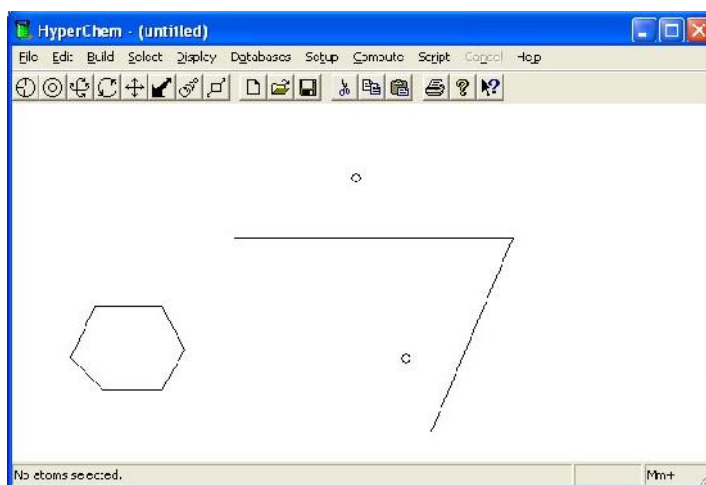
Gambar 16

3. Dengan prosedur serupa, Anda dapat membuat ikatan karbon-karbon lain berawal dari atom karbon yang terakhir ini (Gambar 17).



Gambar 17

4. Tidak hanya senyawa alifatik yang dapat Anda gambarkan. Sebagai contoh, Anda dapat menggambar 6 ikatan yang membentuk sebuah cincin (Gambar 18).

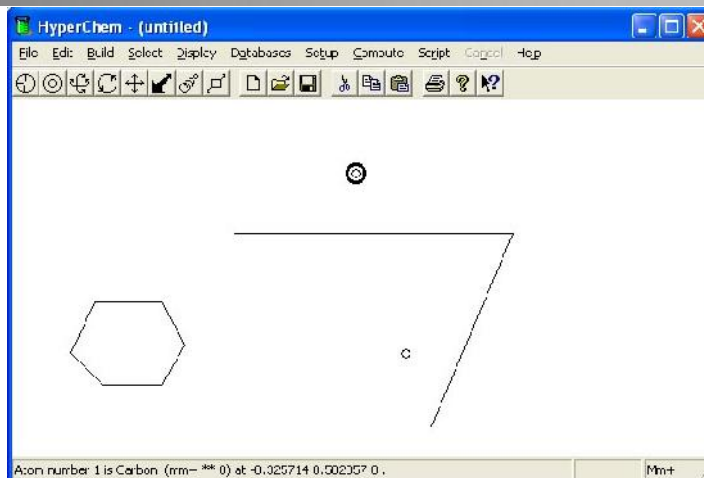


Gambar 18

Memilih Atom atau Ikatan

Untuk memilih atom atau ikatan pada ruang kerja digunakan prosedur berikut ini:

1. Klik-kiri Select-Atoms, dan pastikan bahwa *item* Multiple Selections tidak aktif, lalu klik-kiri *Selection tool*.
2. Untuk memilih sebuah atom, gerakkan kursor ke atas atom tersebut dan klik-kiri kembali. Terpilihnya atom ditandai oleh munculnya sorotan (*highlight*) di sekelilingnya (Gambar 19).

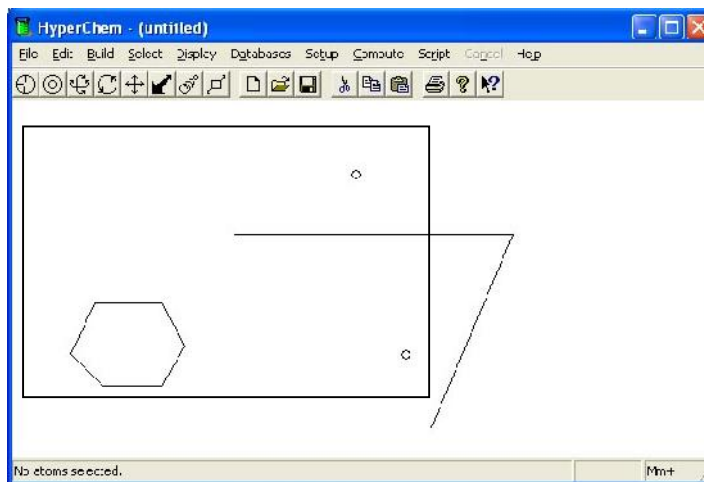


Gambar 19

- Untuk memilih sebuah ikatan, terdapat dua cara. Cara pertama ialah dengan mengklik-kiri pada tengah-tengah ikatan itu, sedangkan cara kedua ialah dengan mengaktifkan Multiple Selections, lalu mengklik-kiri kedua atom yang membentuk ikatan. *Item* Multiple Selections harus aktif supaya pilihan atas atom kedua ditambahkan pada pilihan atas atom pertama; jika tidak aktif, pilihan kedua akan membatalkan pilihan pertama. Sama seperti pada pemilihan atom, muncul *highlight* di sekeliling ikatan terpilih.
- Untuk membatalkan pilihan pada suatu atom atau ikatan, klik-kanan atom atau tengah-tengah ikatan terpilih. *Highlight* di sekeliling atom atau ikatan akan hilang.

Pemilihan juga dapat dilakukan sekaligus pada sekelompok atom atau ikatan dengan prosedur berikut:

- Pastikan bahwa *item* Select Sphere pada menu Select tidak aktif.
- Pilih satu titik sembarang lalu seret-kiri-kanan (klik-kiri lalu klik-kanan, tahan keduanya, kemudian geser) sehingga terbentuk daerah pemilihan berbentuk persegi panjang yang di dalamnya terdapat beberapa atom (Gambar 20).



Gambar 20

Lepaskan *mouse*, maka semua atom atau ikatan dalam daerah pemilihan diberi *highlight*.

- Dengan terlebih dahulu mengaktifkan Multiple Selections, Anda juga dapat membuat lebih dari satu daerah pemilihan.

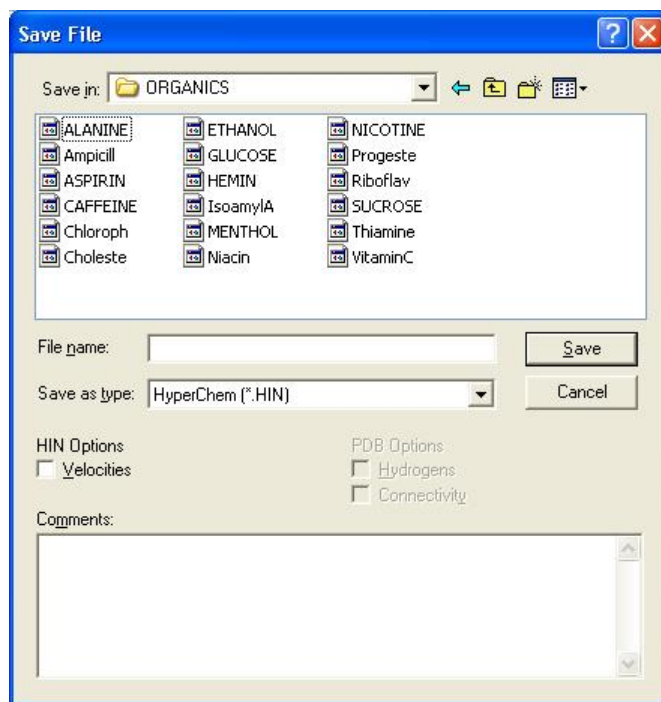
Untuk memilih sekaligus semua atom dan ikatan dalam ruang kerja, Anda klik-kiri pada daerah kosong, sedangkan untuk membatalkan semua pilihan sebelumnya, klik-kanan pada daerah kosong dalam ruang kerja.

Menghapus Atom atau Ikatan


Untuk menghapus atom atau ikatan tunggal, klik-kiri *Drawing tool*, lalu klik-kanan pada atom atau pada tengah-tengah ikatan itu. Jika lebih dari satu atom atau ikatan hendak dihapus sekaligus, pilihlah kelompok atom atau ikatan tersebut, lalu klik-kiri Edit-Clear-Yes.

Menyimpan Gambar

Untuk menyimpan gambar yang Anda buat, klik-kiri File-Save, sehingga muncul kotak dialog Save File. Pada kotak Saves as type: cari HyperChem (*.HIN) dan klik-kiri, lalu pada kotak Save in: cari direktori tempat Anda hendak menyimpan gambar, misalnya Organics (Gambar 21).



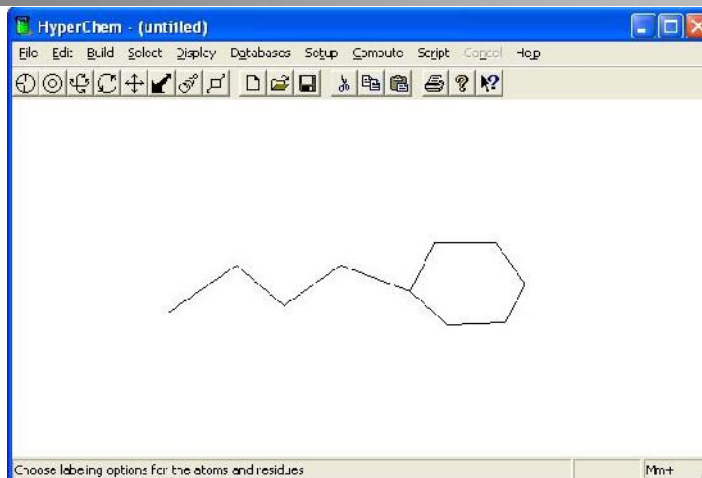
Gambar 21

Jika hendak membuat direktori baru, klik *icon*  lalu ketik nama direktori baru dan klik-kiri OK. Setelah itu, pada kotak File name: ketik nama arsip untuk gambar itu, dan klik-kiri Save. Nama arsip akan muncul pada *Title Bar*.

Dalam bab-bab berikut, Anda sering kali diminta memodifikasi isi sebuah arsip yang sudah ada dan menyimpannya dalam sebuah arsip baru. Dalam hal ini, **jangan** mengklik-kiri File-Save, sebab Anda akan kehilangan isi arsip lama, padahal masih Anda perlukan. Sebagai gantinya, klik-kiri File-Save As.

Latihan 1:

Bersihkan ruang kerja dengan klik-kiri File-New-No, lalu buatlah gambar berikut.



Simpanlah gambar itu dalam direktori Latihan dengan nama arsip propena.hin. Pada kotak Comments, tuliskan '1-hidroksi-3-fenil-2-propena'.

Menggambar 1-Hidroksi-3-fenil-2-propena

Mengubah Orde Ikatan. Untuk mengubah struktur dalam arsip propena.hin menjadi 1-hidroksi-3-fenil-2-propena, ikatan ketiga dari kiri harus diubah menjadi ikatan rangkap. Ada dua cara untuk mengubah ikatan tunggal menjadi rangkap, yaitu dengan menggambar ikatan kedua di antara atom-atom yang membentuk ikatan pertama, atau cukup dengan mengklik-kiri pada tengah-tengah ikatan tunggal itu (dengan *Drawing tool*).

Serupa dengan itu, ikatan rangkap dapat diubah menjadi ganda-tiga dengan menggambar ikatan ketiga di antara atom-atom yang membentuk ikatan rangkap, atau dengan mengklik-kiri pada tengah-tengah ikatan rangkap. Klik-kanan sekali pada ikatan ganda-tiga ini akan mengembalikannya menjadi ikatan rangkap, yang dengan klik-kanan sekali lagi akan menjadi ikatan tunggal.

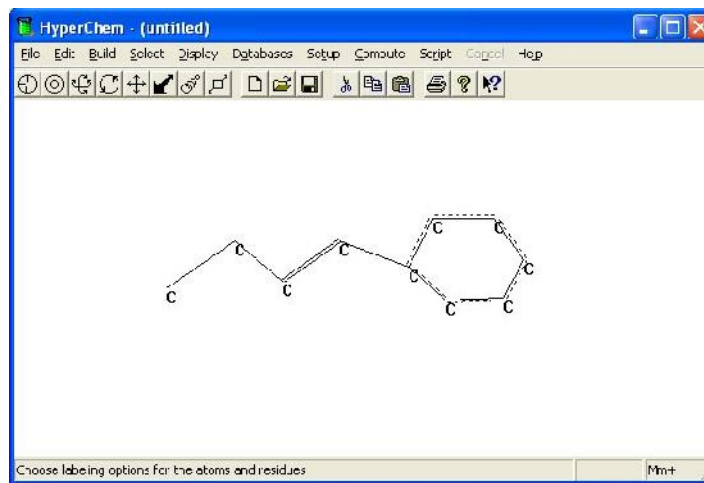
Membuat Cincin Aromatik. Untuk membuat 1-hidroksi-3-fenil-2-propena, cincin lingkaran-enam pada struktur yang sedang Anda buat harus diubah menjadi aromatik. Caranya, klik-kiri dua kali ikatan yang mana saja dalam cincin itu. Anda juga dapat mengklik-kiri dua kali ikatan tunggal yang berada di luar cincin untuk menggambarkan konjugasi ikatan. Aromatisasi maupun konjugasi ikatan ditunjukkan oleh terbentuknya ikatan yang putus-putus.

Memberi Label pada Atom. Untuk memberi label pada atom, klik-kiri Display-Labels, lalu pada kotak dialog Labels (Gambar 22) pilihlah label yang diinginkan dalam kotak pilihan Atoms.



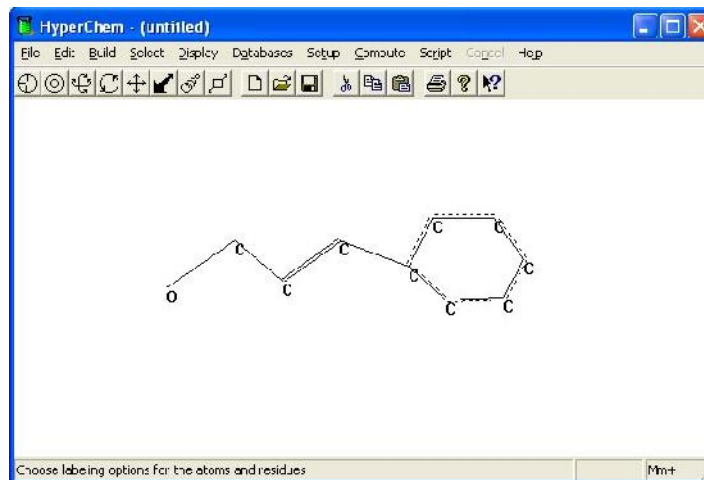
Gambar 22

Misalnya, jika Anda mengklik-kiri tombol radio Symbol, lalu OK, maka semua atom karbon dalam struktur yang sedang Anda buat akan dilabeli dengan C (Gambar 23).



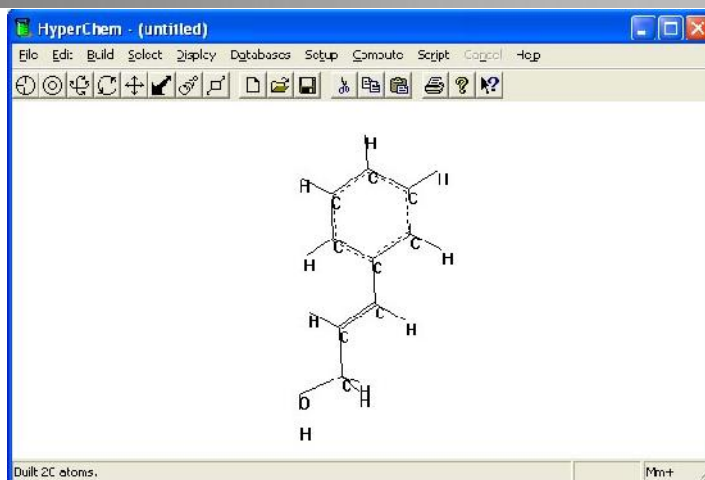
Gambar 23

Menyunting atom. Atom paling kiri pada 1-hidroksi-3-fenil-2-propena bukan C, melainkan O. Untuk mengubahnya, klik-kiri dua kali *Drawing tool*, lalu pilih O pada tabel periodik, dan tutup kotak dialog Element Table. Setelah itu klik-kiri atom C paling kiri tadi, maka atom C akan berubah menjadi O (Gambar 24), dan terjadi perubahan warna dari hijau-biru (*cyan*) menjadi merah.



Gambar 24

Mengubah sketsa dwimatra menjadi trimatra. Gambar 24 ialah sketsa dwimatra dari 1-hidroksi-3-fenil-2-propena. Untuk mengubahnya menjadi trimatra, klik-kiri Build-Add H & Model Build atau klik-kiri dua kali *Selection tool*. Pastikan bahwa *item* Explicit Hydrogens pada menu Build tidak aktif. Model Builder akan secara otomatis menampilkan gambaran trimatra molekul, lengkap dengan atom-atom hidrogennya (Gambar 25).

**Gambar 25**

Jika atom-atom H tidak muncul, klik-kiri Display>Show Hydrogens. Klik-kiri File-Save untuk menyimpan struktur trimatra ini pada arsip propena.hin.