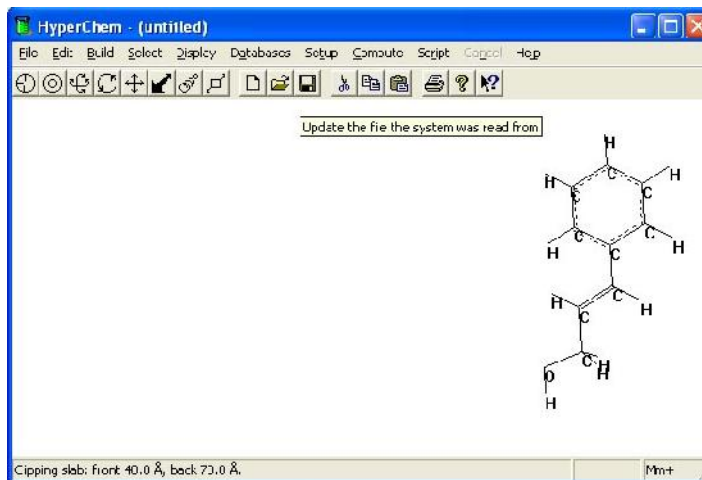


MENGGESER, MEMUTAR, DAN MENYEKALAKAN MOLEKUL

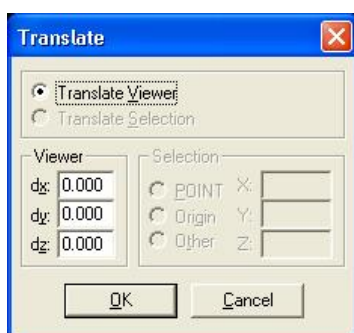
Pergeseran pada Bidang XY

Bukalah arsip *propena.hin*. Anda dapat melakukan translasi XY (geser kiri, kanan, atas, atau bawah) pada molekul 1-hidroksi-3-fenil-1-propena yang ada. Caranya, klik-kiri *XY translation tool*, lalu seret-kiri kursor (atau gunakan tombol-tombol panah pada papan ketik) ke posisi baru yang diinginkan, misalnya sampai menjadi seperti Gambar 26.



Gambar 26

Untuk melakukan pergeseran yang tertentu arah dan jaraknya, digunakan kotak dialog Translate (Gambar 27) yang dibuka dengan mengklik-kiri Edit-Translate atau mengklik-kiri dua kali *XY translation tool*.

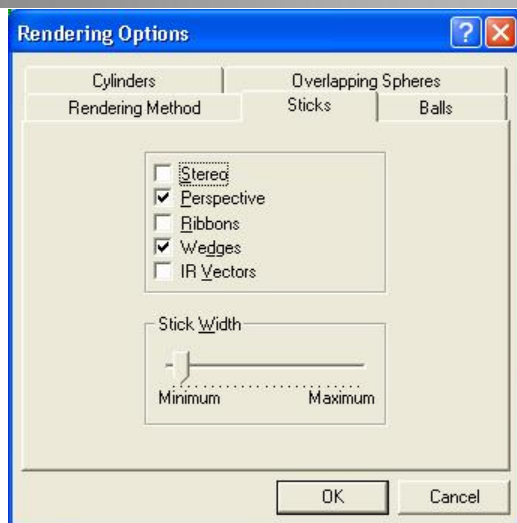


Gambar 27

Klik-kiri Translate Viewer, lalu pada kotak pilihan Viewer, masukkan berapa jauh pergeseran yang diinginkan. Sebagai contoh, jika Anda ingin menggeser molekul sejauh $5,0 \text{ \AA}$ ke kiri, pada kotak dx, dy, dan dz berturut-turut diisikan $-5,0$; $0,0$; dan $0,0$, sedangkan jika diinginkan pergeseran $5\sqrt{2} \text{ \AA}$ ke kanan atas, yang diisikan berturut-turut $5,0$; $5,0$; dan $0,0$.

Pergeseran pada Bidang Z

Anda juga dapat melakukan translasi Z (geser maju atau mundur). Agar pergeseran teramati (atom-atom yang lebih dekat pada Anda tampak lebih besar), terlebih dahulu klik-kiri Display-Rendering, lalu aktifkan Perspective pada 'tab' Sticks, dan klik-kiri OK (Gambar 28).



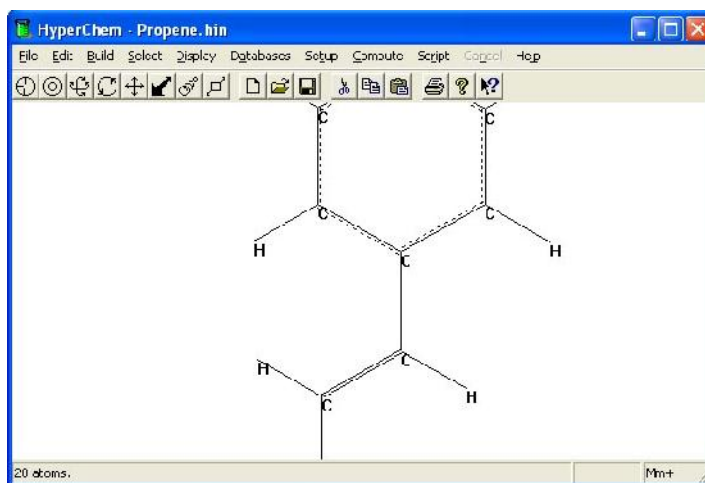
Gambar 28

Setelah itu, barulah klik-kiri *Z translation tool*, dan seret-kiri kursor secara perlahan-lahan menuju ke bawah untuk mendekatkan molekul pada Anda, atau ke atas untuk menjauhkannya kembali. (Anda juga dapat menggunakan tombol-tombol panah pada papan ketik.) Jika Anda menyeret terlalu jauh, molekul akan lenyap karena Anda membawanya keluar dari *Z clipping slab* (dijelaskan pada bagian berikut).

Seperti pada translasi XY, untuk melakukan pergeseran yang tertentu arah dan jaraknya, klik-kiri Edit-Translate atau klik dua kali *Z translation tool*, lalu klik-kiri Translate Viewer. Misalkan Anda ingin membuat molekul 10 Å lebih jauh dari Anda, maka isikan 0; 0; dan -10 berturut-turut pada kotak dx, dy, dan dz.

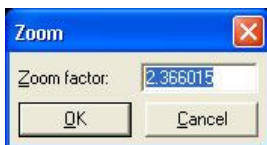
Memperbesar atau Memperkecil Molekul

Untuk memperbesar molekul, klik-kiri *Zoom tool*, lalu seret-kiri kursor secara perlahan-lahan menuju ke bawah atau tekan tombol Page Down. Hal sebaliknya, yaitu seret-kiri menuju ke atas atau tekan tombol Page Up, dilakukan untuk memperkecil molekul. Sepintas, perubahan yang terjadi mirip dengan translasi Z; coba temukan perbedaannya. Contoh hasil perbesaran 1-hidroksi-3-fenil-2-propena ditunjukkan pada Gambar 29.



Gambar 29

Anda juga dapat melakukan perbesaran atau pengecilan yang tertentu pada kotak dialog Zoom, yang dibuka dengan mengklik-kiri Edit-Zoom atau mengklik dua kali *Zoom tool* (Gambar 30). Pada kotak teks Zoom Factor dapat Anda isikan nilai perbesaran 0.01–50.



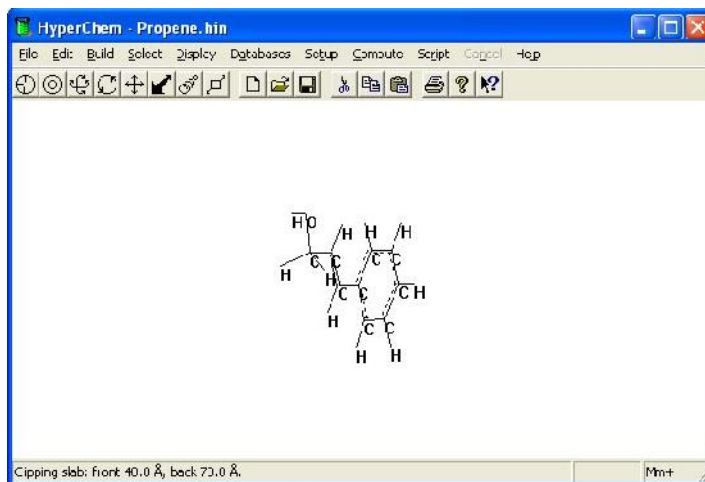
Gambar 30

Mengetengahkan dan Menyekalakan (*Centering dan Scaling*)

Ketika suatu sistem molekular pertama kali dibangun oleh Model Builder, ia akan ditempatkan tepat di tengah-tengah ruang kerja dengan ukuran standar. Setelah menggunakan *Translation tool* atau *Zoom tool*, Anda dapat mengembalikan molekul ke ukuran awalnya di tengah-tengah ruang kerja dengan cara klik-kiri Display-Scale to fit atau tekan tombol spasi pada papan ketik. Jika ingin mengembalikan molekul ke ukuran semula tanpa memindahkannya ke tengah-tengah ruang kerja, isikan angka 1 pada kotak Zoom Factor.

Perputaran pada Bidang-XY

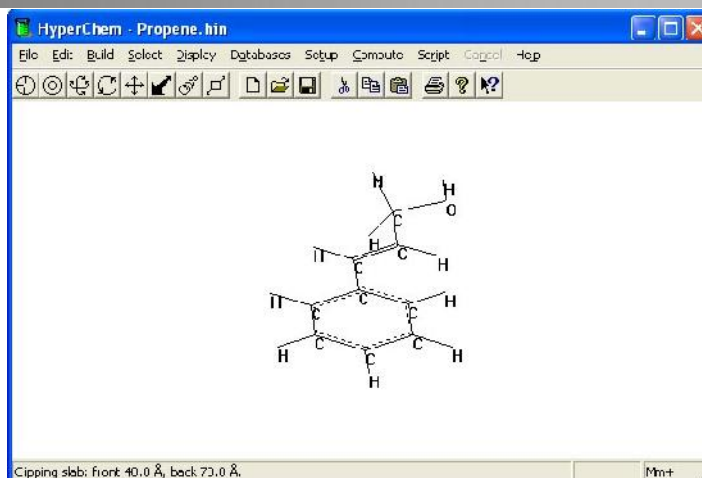
Untuk memutar molekul sepanjang sumbu x dan y , klik-kiri *XY rotation tool*. Setelah itu, seret-kiri kursor secara horizontal untuk memutar molekul mengelilingi sumbu- X , vertikal (mengelilingi sumbu- Y), atau diagonal (mengelilingi bidang- XY). (Anda juga dapat menggunakan tombol-tombol panah pada *papan ketik*.) Coba Anda klik Display-Scale to fit pada Gambar 29, lalu putar molekul 1-hidroksi-3-fenil-2-propena menjadi seperti pada Gambar 31.



Gambar 31

Perputaran pada Sumbu-Z

Untuk memutar molekul sepanjang sumbu z , klik-kiri *Z rotation tool*, lalu seret-kiri secara horizontal ke kanan untuk memutar searah jarum jam atau ke kiri untuk perputaran berlawanan arah jarum jam. Menyeret kiri secara vertikal tidak berpengaruh apa-apa. (Anda juga dapat menggunakan tombol-tombol panah pada *papan ketik*.) Coba Anda putar molekul pada Gambar 31 menjadi seperti pada Gambar 32.

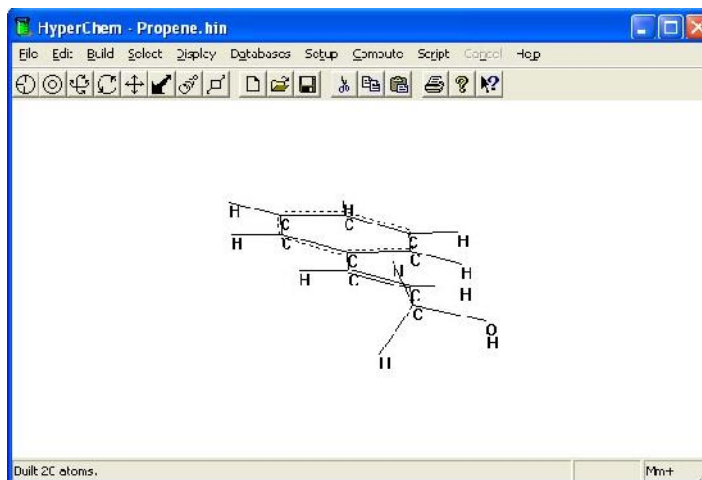


Gambar 32

Pemotongan-Z (*Z-clipping*)

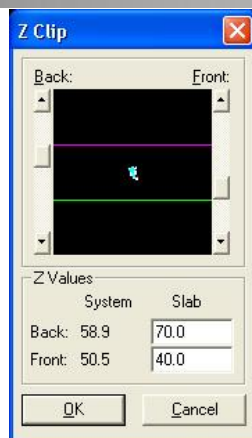
Suatu sistem molekular dapat diiris oleh 2 bidang potong yang saling sejajar dan sejajar pula dengan ruang kerja (bidang-XY). Hanya atom-atom dan ikatan-ikatan di antara kedua bidang itu yang tampak, dan bagian yang tampak ini disebut irisan (*clipping slab*).

Sebagai contoh, putarlah molekul 1-hidroksi-3-fenil-2-propena sehingga cincin benzena terorientasi menuju atau menjauhi bidang potong depan, seperti pada Gambar 33.



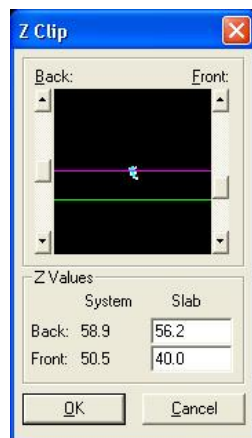
Gambar 33

Kemudian klik-kiri dua kali *Z clipping tool* untuk membuka kotak dialog Z Clip (Gambar 34). Kotak dialog ini menggambarkan irisan ditinjau dari atas sistem molekular. Posisi bidang-bidang potong yang membatasi bagian depan dan belakang irisan berturut-turut dinyatakan dengan garis hijau dan ungu. Pada tampilan patokan, posisi mereka diatur sedemikian rupa sehingga ditampilkan sistem molekular yang utuh pada ruang kerja. Anda dapat mengubahnya secara interaktif atau dengan memasukkan nilai-nilai tertentu yang baru untuk salah satu atau kedua bidang itu.

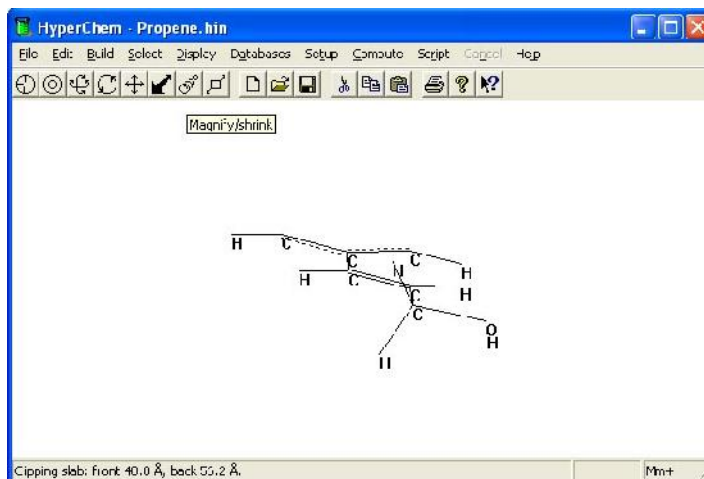


Gambar 34

Cobalah berlatih melakukan perubahan secara interaktif sebagai berikut. Seret-kiri kotak gulungan (*scroll box*) yang mengatur bidang potong belakang ke arah bawah sampai bagian belakang molekul teriris, yaitu saat nilai untuk Back: (Slab) lebih kecil daripada Back: (System), misalnya 56.2 (Gambar 35). Klik-kiri OK, maka muncul tampilan seperti pada Gambar 36.



Gambar 35



Gambar 36

Untuk memunculkan kembali potongan yang hilang, seret-kiri kotak gulungan tadi ke arah atas sampai bidang potong belakang kembali berada di belakang molekul (nilai untuk Back: (Slab) lebih besar daripada Back: (System)), lalu klik-kiri OK.

Pengubahan posisi bidang potong depan juga dapat dilakukan tanpa melalui kotak dialog Z clip. Caranya, klik-kiri *Z clipping tool*, lalu seret-kiri ke atas kursor (atau gunakan tombol panah ke atas) di dalam ruang kerja, maka pada baris status, nilai bidang potong depan akan meningkat. Lanjutkan sampai bagian depan molekul teriris, yaitu saat bidang potong depan mencapai sekitar 53\AA . Setelah itu, seret-kiri ke bawah kursor (atau gunakan tombol panah ke bawah) sampai keseluruhan molekul tampak lagi, yaitu saat bidang potong depan kembali berada di depan molekul.