



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

**FORMULIR
RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)**

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER

Mata Kuliah : KIMIA KOMPUTASI	Semester: VI (ENAM)	sks: 3	Kode: D3114047				
Program Studi : KIMIA	Dosen Pengampu/Penangungjawab : Drs. Kasmui, M.Si						
Capaian Pembelajaran Lulusan	Setelah lulus mahasiswa dapat menerapkan konsep kimia komputasi untuk mendesain model molekul dengan benar di bidang farmasi (obat), nanomaterial dan bidang lainnya sehingga dapat mensintesis senyawa-senyawa baru yang lebih berdaya guna.						
Capaian Pembelajaran Matakuliah	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menjelaskan tentang beberapa metode kimia komputasi dan dapat membedakan keunggulan dan kelemahan setiap metode kimia komputasi sehingga dapat menerapkan dalam pemodelan molekul-molekul sederhana						
Deskripsi Matakuliah	Mata kuliah Kimia Komputasi mencakup pembelajaran tentang konsep dasar kimia komputasi yang menyangkut metode kimia komputasi dan penerapannya. Materi kuliah kimia komputasi meliputi ruang lingkup kimia komputasi dan pemodelan molekul, metode kimia komputasi yang meliputi metode mekanika molekular, semiempiris, ab initio. Hubungan Kuantitative struktur-aktivitas (QSAR) juga akan dibahas dalam matakuliah ini. Materi praktikum/demonstrasi perangkat lunak juga akan diberikan untuk dapat secara langsung mengetahui penggunaan kimia komputasi dalam menyelesaikan permasalahan kimia.						
Minggu ke -	Kemampuan yang diharapkan	Bahan Kajian	Metode Pembelajaran	Waktu	Evaluasi	Kriteria/ Indikator	Bobot
1	Setelah mengikuti kuliah ini, mahasiswa akan dapat mempersiapkan materi perkuliahan dan praktikum kimia komputasi	PENGANTAR PERKULIAHAN 1.1 Pengantar Perkuliahan secara umum 1.2 Referensi Materi Perkuliahan 1.3 Software Praktikum Kimia Komputasi	Ceramah, tanya jawab	160 menit	Penugasan terstruktur telusur referensi	Semua memiliki pustaka yang diperlukan	1
2	Setelah mengikuti kuliah ini, mahasiswa akan dapat menyebutkan ruang lingkup	MATERI PENGANTAR 2.1 Pengertian Pemodelan Molekul 2.2 Ruang Lingkup Kimia	Ceramah, tanya jawab	160 menit	penugasan penulisan arttikel	Kualitas artikel tulisan	1



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

FORMULIR

RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

	kimia komputasi dalam menentukan sifat suatu struktur senyawa secara teoritis	2.3 Bagaimana Melakukan Penelitian Di Bidang Kimia Komputasi ?			penerapan bidang kimia komputasi di masyarakat		
3	Setelah mengikuti mata kuliah ini, mahasiswa akan dapat membedakan penggunaan beberapa macam metode kimia komputasi untuk keperluan mendapatkan sifat dan energi suatu senyawa	METODE KIMIA KOMPUTASI 3.1 Perbandingan Metode Kimia Komputasi 3.2 Persamaan Schrödinger 3.3 Penyelesaian Persamaan Schrödinger Elektronik Hartree-Fock. Teori <i>Self-Consistent Field</i> (SCF) 3.4 Sifat yang Diturunkan dari Fungsi Gelombang	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1
4	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menyebutkan keunggulan dan keterbatasan metode mekanika molekular dalam pemodelan molekul	METODE MEKANIKA MOLEKUL 4.1 Pengertian Mekanika Molekular 4.2 Anatomi Mekanika Molekular 4.3 Optimisasi dalam MM 4.4 Jenis Medan Gaya	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

FORMULIR

RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

5	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menyebutkan keunggulan dan keterbatasan metode <i>ab initio</i> dan membandingkannya dengan perhitungan mekanika molekular dalam pemodelan molekul	METODE AB INITIO 5.1 Pendahuluan 5.2 Teori <i>Ab Initio</i> 5.3 Himpunan Basis 5.4 Perhitungan Energi 5.5 Kualitas Hasil Perhitungan <i>Ab Initio</i>	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1
6	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menyebutkan keunggulan dan keterbatasan metode semiempiris dan membandingkannya dengan perhitungan mekanika molekular dan <i>ab initio</i> dalam pemodelan molekul	METODE SEMIEMPIRIS 6.1 Pendahuluan 6.2 Complete Neglect of Differential Overlap (CNDO, Pople 1965) Juga Dikenal dengan ZDO (<i>Zero Differential Overlap</i>) 6.3 <i>Intermediate Neglect of Differential Overlap</i> (INDO, Pople 1967) 6.4 Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap (MINDO/3 Dewar, 1975) 6.5 <i>Neglect of Diatomic Differential Overlap</i> (NDDO, Pople 1965) 6.6 <i>Modified Neglect Of Diatomic</i>	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

**FORMULIR
RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)**

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

		<p align="center"><i>Overlap(MNDO)</i></p> <p>6.7 Austin Model 1 (AM1) 6.8 Parameterized Model 3 (PM3) 6.9 Kualitas dari Hasil Semiempiris</p>					
7	<p>Setelah mengikuti mata kuliah ini, mahasiswa akan dapat membedakan beberapa jenis perhitungan korelasi elektron sebagai koreksi terhadap metode perhitungan SCF</p> <p>Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menyebutkan keunggulan dan keterbatasan metode <i>Density Functional Theory</i> dan membanding-kannya dengan metode perhitungan lainnya dalam pemodelan molekul</p>	<p>METODE KORELASI ELEKTRON</p> <p>7.1 Pendahuluan 7.2 Metode Interaksi Konfigurasi (<i>Configuration Interaction, CI</i>) 7.3 Teori Perturbasi Møller-Plesset 7.4 MCSCF dan CASSCF 7.5 Teknik Pemodelan Sistem Kompleks</p> <p>METODE DENSITY FUNCTIONAL THEORY</p> <p>8.1 Dasar Konsep DFT 8.2 DFT Spin terpolarkan 8.3 Hasil dan Aplikasi DFT</p>	<p>Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab</p> <p>Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab</p>	<p>160 menit</p> <p>160 menit</p>	<p>Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur</p> <p>Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur</p>	<p>Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur</p> <p>Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur</p>	<p>1</p> <p>1</p>



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

**FORMULIR
RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)**

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

8	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat memberikan contoh penggunaan pemodelan molekul dalam menentukan hubungan struktur dan aktifitas obat dengan sifat suatu senyawa	HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS 8.1 Pendahuluan 8.2 Konsep Statistik 8.3 Pendekatan untuk Membuat QSAR 8.4 Menggunakan Diskriptor Teoritis dalam QSAR dan LFER	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1
9	MID SEMESTER						2
10	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menjelaskan kemampuan perangkat lunak HyperChem sebagai salah satu perangkat lunak pemodelan molekul	PROGRAM KIMIA KOMPUTASI HYPERCHEM 10.1 Kemampuan Hyperchem 10.2 Hasil Perhitungan dengan HyperChem 10.3 Metode Kimia Komputasi 10.4 Optimasi Struktur Molekul 10.5 Praktek Penggunaan Hyperchem	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1
11, 12, 13	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menjalankan perangkat lunak kimia komputasi Hyperchem untuk perhitungan sifat senyawa sederhana	PRAKTIKUM PEMODELAN MOLEKUL SEDERHANA MENGGUNAKAN HYPERCHEM 11.1 Analisis Sikloheksana 11.2 Stabilitas Karbokation	Praktikum dan diskusi	3 x 160 menit	Keaktifan diskusi, Kualitas kinerja praktikum dan laporan	Tingkat partisipasi dalam diskusi, Nilai kualitas	2



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

**FORMULIR
RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)**

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

		<p>dan Hiperkonjugasi</p> <p>11.3 Konformasi 1,3-Butadiena</p> <p>11.4 Substitusi Aromatik Elektrofilik</p> <p>11.5 Kesetimbangan Keto-Enol</p> <p>11.6 Dehidrasi 1-Butanol dan Stabilitas Relatif dari Alkena</p> <p>11.7 Diskusi hasil</p>			hasil praktikum	kinerja praktikum dan laporan hasil praktikum	
14	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menjelaskan kemampuan perangkat lunak Gaussian sebagai salah satu perangkat lunak pemodelan molekul	<p>PROGRAM KIMIA KOMPUTASI GAUSSIAN</p> <p>12.1 Kemampuan Gaussian</p> <p>12.2 Hasil Perhitungan dengan Gaussian</p> <p>12.3 Metode Kimia Komputasi</p> <p>12.4 Optimasi Struktur Molekul</p> <p>12.5 Praktek Penggunaan Gaussian</p>	Diskusi tugas sebelumnya, Ceramah, tanya jawab	160 menit	Keaktifan diskusi, Nilai Tugas terstruktur	Tingkat partisipasi dalam diskusi, nilai tugas terstruktur	1
15, 16	Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa akan dapat menjalankan perangkat lunak kimia komputasi	<p>PRAKTIKUM PEMODELAN MOLEKUL SEDERHANA MENGGUNAKAN</p>	Praktikum dan diskusi	2 x 160 menit	Keaktifan diskusi, Kualitas	Tingkat partisipasi dalam	2



**KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG (UNNES)**

Kantor: Komplek Simpang 5 Unnes Kampus Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229
Rektor: (024)8508081 Fax (024)8508082, Purek I: (024) 8508001
Website: www.unnes.ac.id - E-mail: unnes@unnes.ac.id



URS is a member of Registrar of Standards (Holdings) Ltd.

FORMULIR

RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)

No. Dokumen FM-01-AKD-05	No. Revisi 03	Hal 1 dari 2	Tanggal Terbit 29 Februari 2016
------------------------------------	-------------------------	------------------------	---

	Gaussian untuk perhitungan sifat senyawa sederhana	GAUSSIAN 13.1 Praktikum 1 13.2 Praktikum 2 13.3 Praktikum 3 13.4 Praktikum 4 13.5 Praktikum 5 13.6 Praktikum 6 13.7 Diskusi hasil			kinerja praktikum dan laporan hasil praktikum	diskusi, Nilai kualitas kinerja praktikum dan laporan hasil praktikum	
--	--	--	--	--	---	---	--

Daftar Referensi:

1. Harno Dwi Pranowo, 2011, Pengantar Kimia Komputasi, Bandung: CV. Lubuk Agung.
2. Frank Jensen, 1999, Introduction to Computational Chemistry, England: John Wiley & Sons Ltd.
3. Anonim, 2002, Hyperchem Manual, Hypercube, Inc.
4. James B. Foresman & Ellen Frisch, 1996, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Pttsburg: Gaussian, Inc.
5. Kasmui, 2013, Diktat Panduan Praktek Hyperchem dan Gaussian

Tugas mahasiswa dan penilaiannya:

1. Tugas terstruktur menjawab soal setiap akhir bab (pertemuan)
2. Tugas membuat makalah diskusi kelompok

Mengetahui Ketua Program Studi

Semarang, 24 Februari 2016

Dosen Pengampu/Penanggung jawab MK

Drs. Kasmui, M.Si