
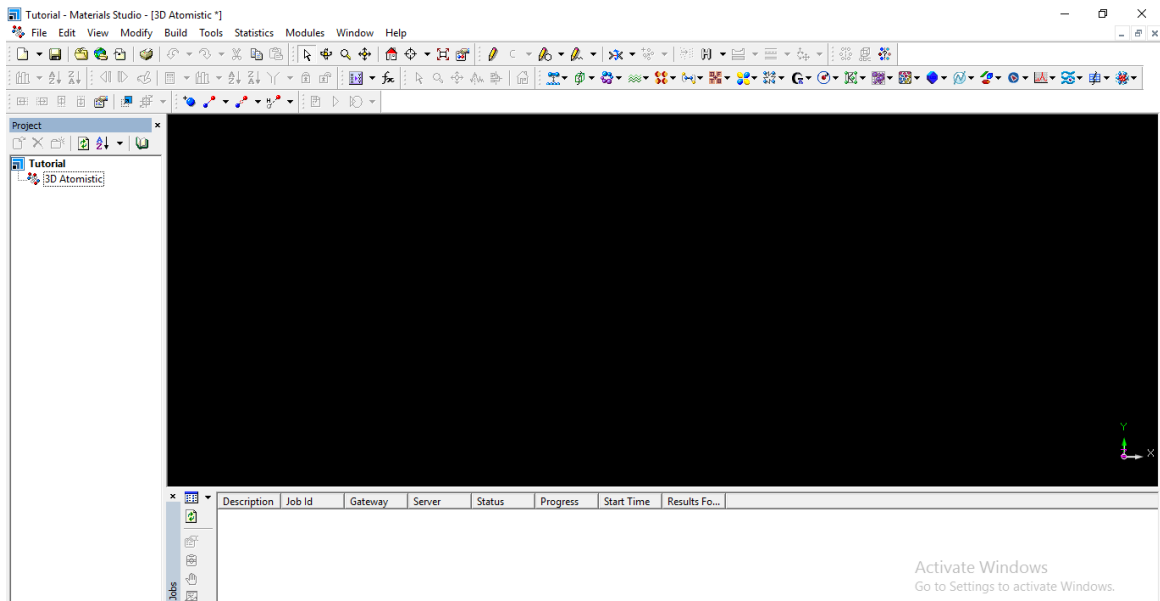


# PEMODELAN STRUKTUR MOLEKUL

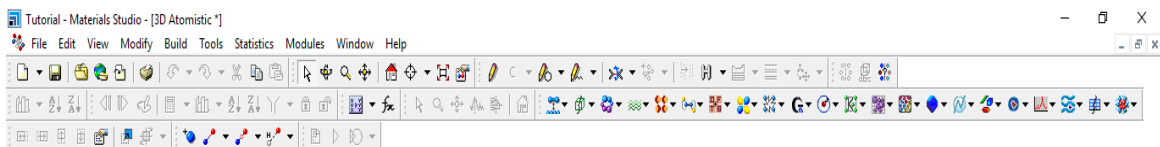
Pembuatan struktur 3D molekul menggunakan bantuan perangkat lunak Material Studio. Perangkat lunak tersebut dapat dioperasikan pada komputer/laptop. Berikut langkah-langkah pembuatan struktur molekul :


## 1. Buka software Material Studio

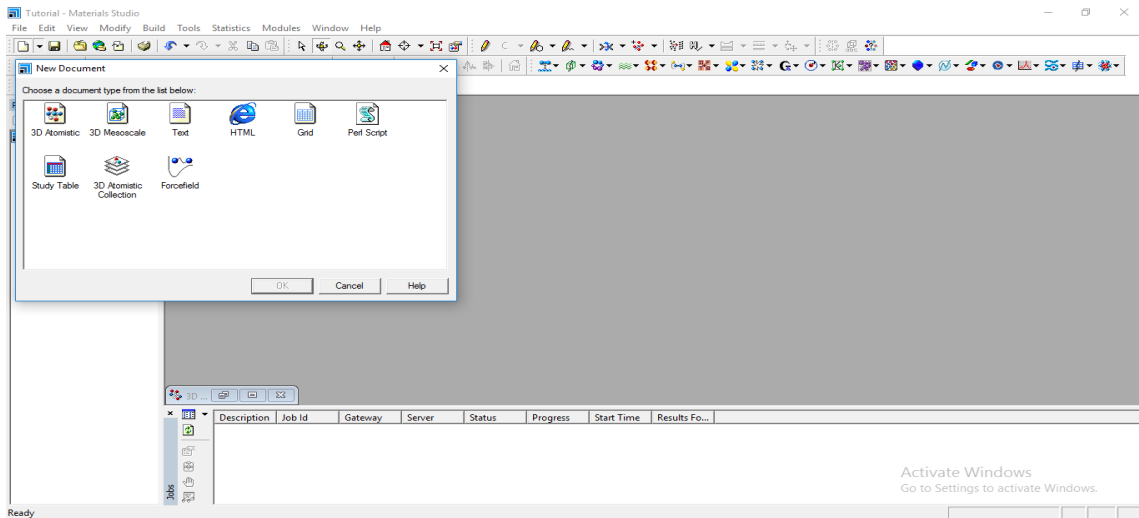
Double klik icon software Material Studio  sehingga muncul tampilan layar berikut :




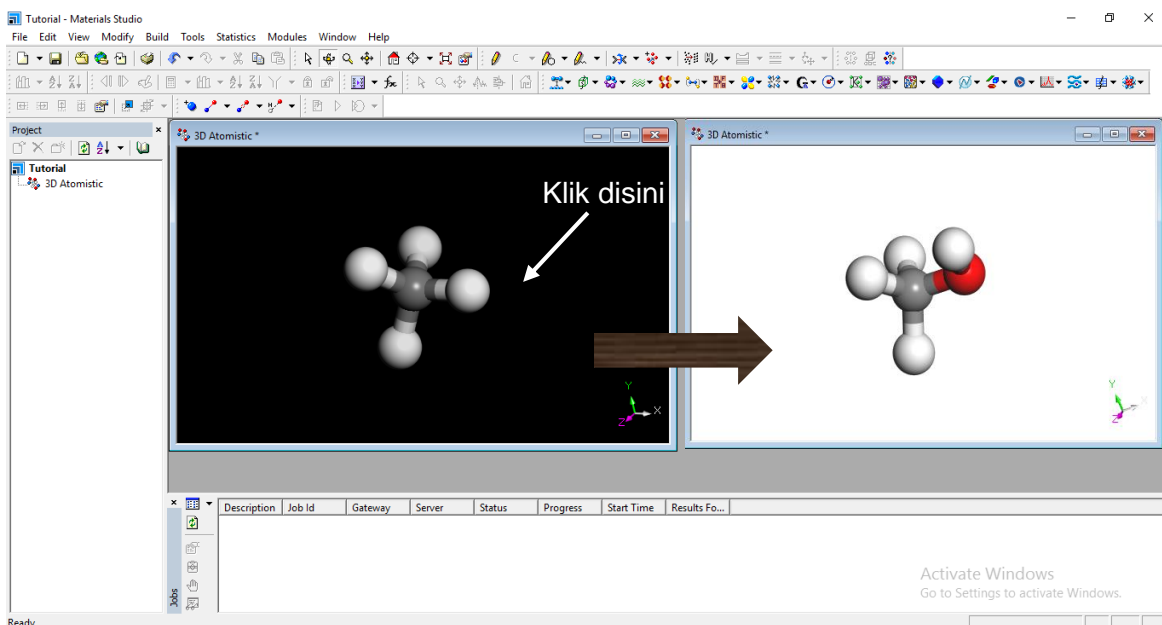
Gambar di bawah ini adalah *tools bar* Material Studio :







2. Sebelum menggambar molekul, klik icon  untuk mempersiapkan tempat untuk menggambar. Tampilan layar seperti berikut :

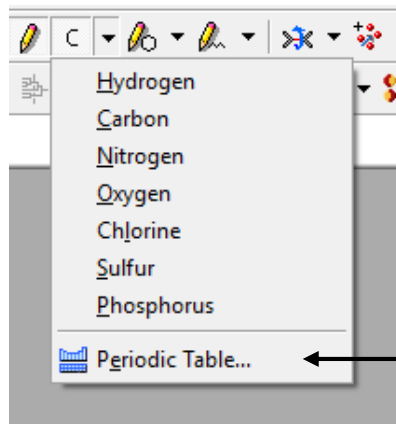


3. Pada *tools bar* pilih icon  untuk mulai menggambar molekul. Misal akan membuat molekul metana, dapat dilakukan dengan menggambar molekul metana ( $\text{CH}_4$ ) pada menu “Sketch Atom”. Struktur molekul metana yang sudah terbentuk, selanjutnya akan diubah menjadi molekul metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) dapat dilakukan dengan klik salah satu atom C, kemudian klik menu “Modify” untuk mengubah atom C menjadi atom O.

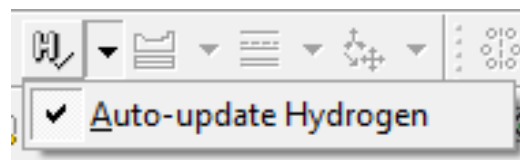


Keterangan :  = atom karbon     = atom hidrogen     = atom oksigen


- ❖ Icon  digunakan untuk menggambar molekul, ketika icon tersebut di klik akan tampil pengaturan gambar seperti berikut :



Untuk memilih atom apa yang ingin digambar



Untuk menambahkan atom hidrogen secara otomatis

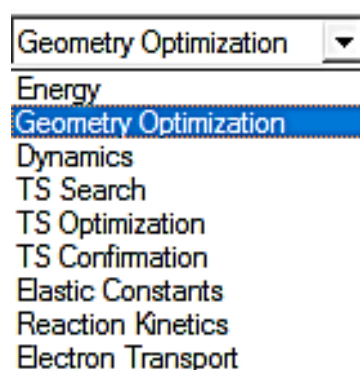
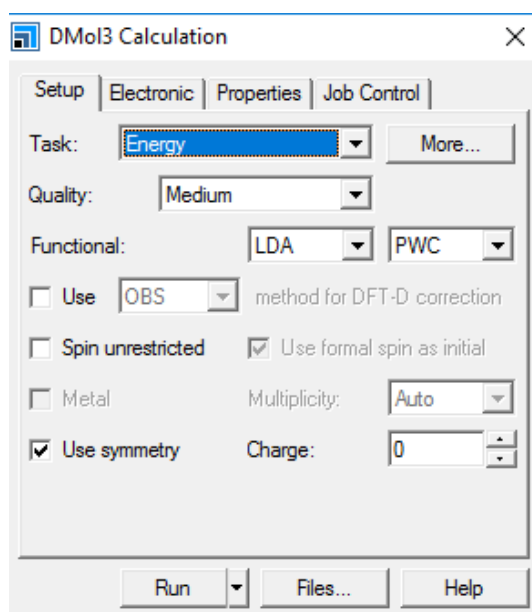
- ❖ Untuk memutar molekul, klik icon  dan putar molekul pada pada *menu bar*.

## OPTIMASI GEOMETRI STRUKTUR MOLEKUL

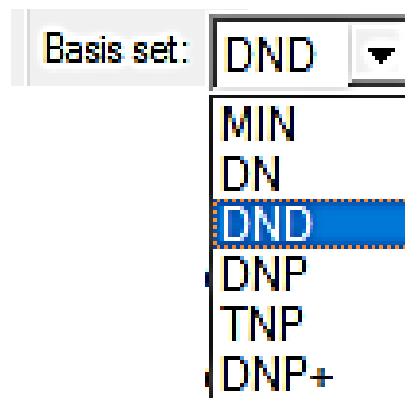
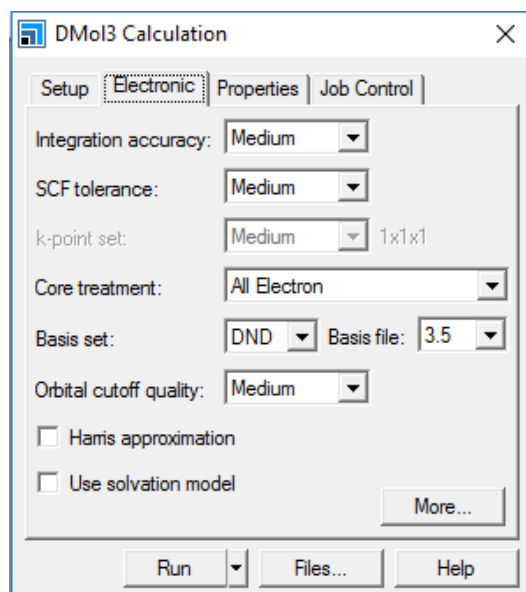
Optimasi geometri molekul dapat menggunakan **DMol<sup>3</sup> Tools**,

dilakukan dengan klik icon . Pada menu "Calculation" akan menampilkan seperti gambar berikut :

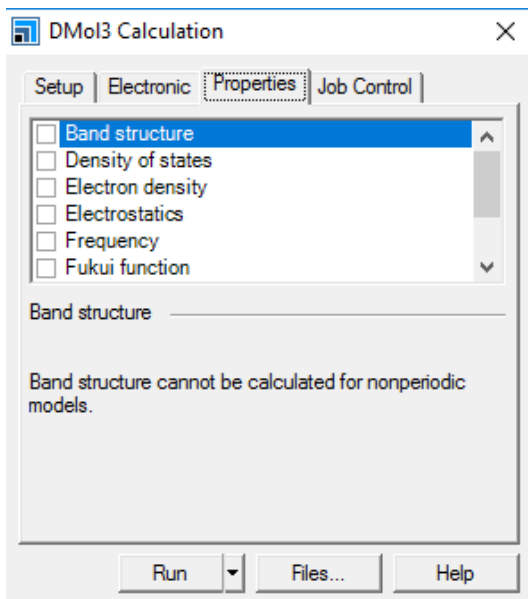
### DMol<sup>3</sup> - Calculation



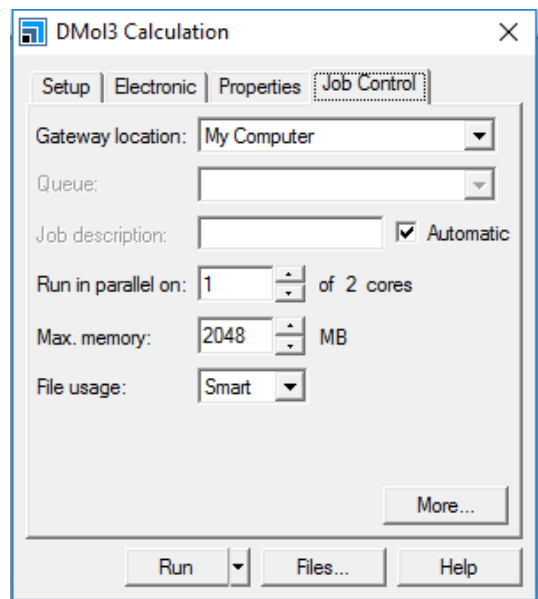
### DMol<sup>3</sup> – Electronic



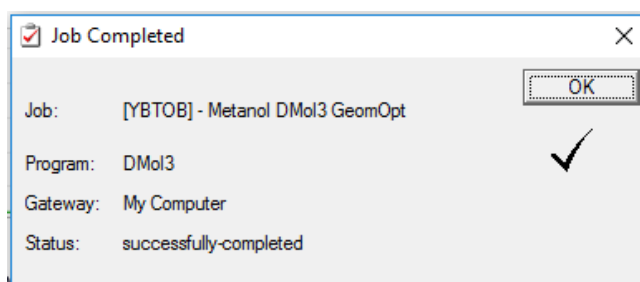
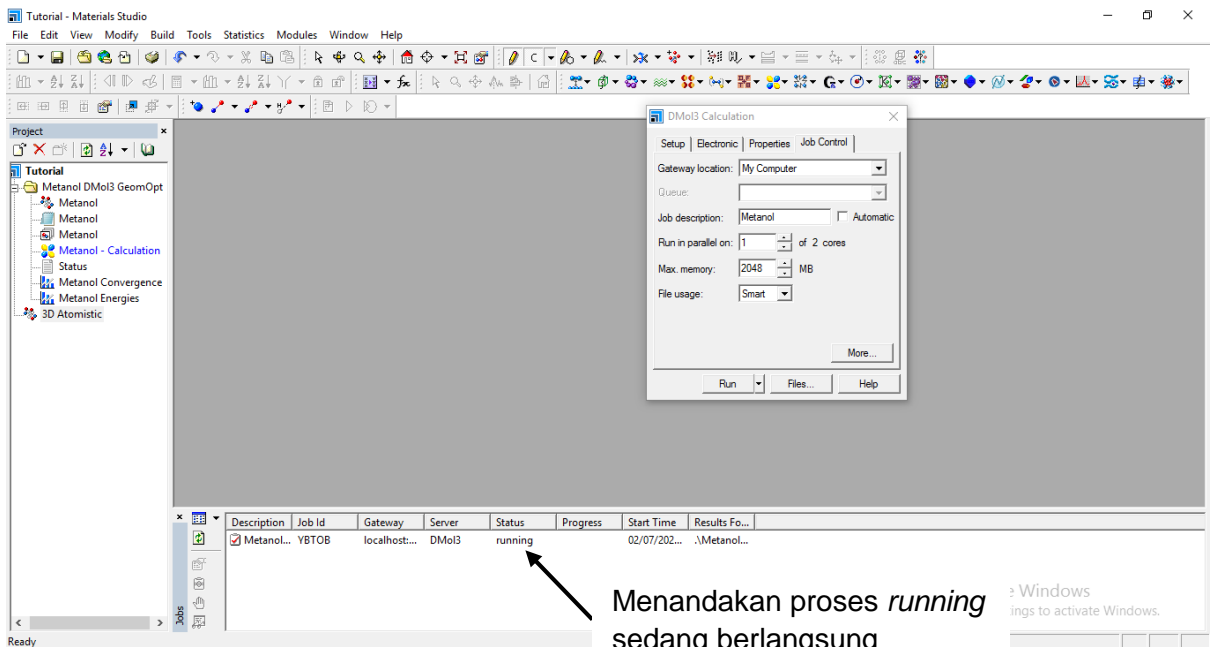
## DMol<sup>3</sup> – Properties



## DMol<sup>3</sup> – Job Control



Apabila pengaturan yang akan digunakan optimasi geometri sudah selesai, selanjutnya molekul *dirunning* dengan klik menu “Run”. Layar akan menampilkan proses *running* seperti gambar berikut :



Menandakan proses *running* sudah selesai