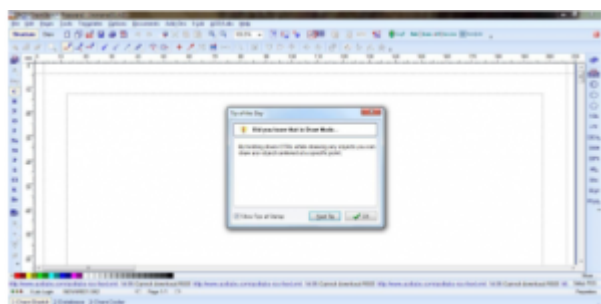


Tutorial Chemsketch (I)

Cara Menggambar Struktur Molekul dengan ChemSketch

ChemSketch adalah aplikasi yang berfungsi untuk menggambar dan memodelkan struktur kimia. Software ChemSketch dapat menggambar struktur kimia dalam bentuk 2D dan 3D. Program ini juga menyediakan struktur asam amino, alkaloid, karbohidrat, asam nukleat, DNA/RNA, lab kit (peralatan laboratorium kimia), orbital, senyawa fosfor, dll. Software ini juga menyediakan penggambaran kurva dan grafik. ChemSketch dikeluarkan oleh ACD/labs.com yang didownload secara gratis (freeware). Berikut cara menggambar struktur molekul dengan ChemSketch:

1. Jalankan program Chemsketch dengan mengklik Start > All Program > ACDLABS 12.0 > ChemSketch. Sehingga muncul tampilan seperti berikut:

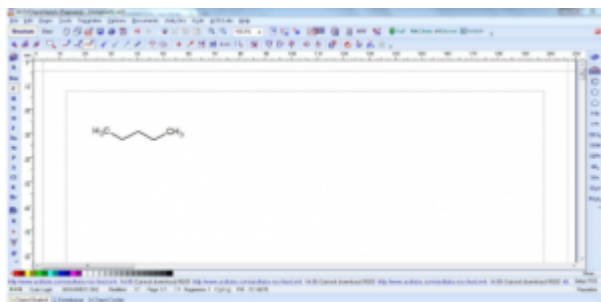


Klik OK agar kita sampai pada layar editor.

2. Mulailah menggambar! Untuk menggambar struktur kita bisa menggunakan template yang sudah ada atau kita bisa menggambar sendiri. Untuk kasus pertama, kita akan menggambar sendiri struktur pentanol, suatu senyawa dalam golongan alkohol yang

mengandung 5 atom karbon.

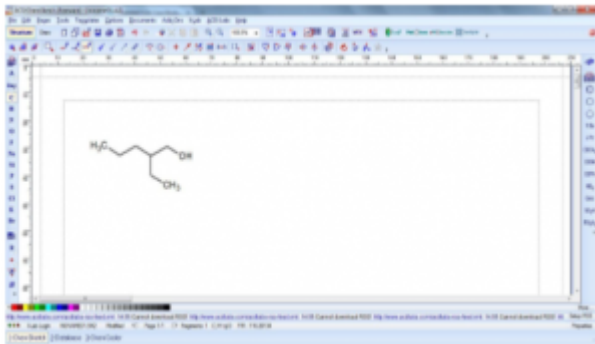
3. Aktifkan tombol Draw Chains atau yang di bagian kiri atas editor. Dalam editor klik dan tarik rantai sampai muncul tulisan C 5 pada ujung rantai sehingga diperoleh gambar rantai seperti berikut.



4. Selanjutnya kita akan menambahkan gugus -OH. Aktifkan tombol Oxygen yang ada di sebelah kiri editor, kemudian tambahkan gugus -OH pada ujung rantai dengan cara mengklik salah satu gugus -CH₃. Hasilnya adalah struktur pentanol seperti berikut.



5. Untuk menambahkan cabang, klik tombol Carbon pada bagian samping editor karena cabang akan ditambahkan adalah rantai karbon. Selanjutnya letakkan cursor pada sudut (-CH₂-) yang kita inginkan. Kemudian sambil diklik kiri tarik ke atas atau ke bawah untuk menambah rantai karbon sesuai keinginan. Pada contoh ini, kita menambah 2 atom karbon pada C nomor 2 dari kanan. Hasilnya terlihat seperti berikut.



6. Untuk mengetahui nama sistematis dari struktur yang kita gambar, kliklah menu Tools > Generate > Name for Structure atau ikon pada bagian atas kanan editor gunakan shortcut Ctrl+Shift+I. Nama senyawa akan muncul pada bagian bawah struktur.



Dalam Bahasa Indonesia padanan nama 2-ethylpentan-1-ol adalah 2-etil-1-pentanol.

7. Software ini juga menyediakan fitur untuk menghitung sifat-sifat fisika suatu senyawa. Untuk menggunakannya, klik ikon Select/Move atau kemudian pilih struktur yang telah kita buat.



Setelah itu pilih menu Tools > Calculate > All Properties dan sifat-sifat fisika senyawa pun muncul.

Calculation Results

Molecular Formula = C7H16O
Formula Weight = 116.20134
Composition = C(72.35%) H(13.88%) O(13.77%)
Molar Refractivity = 35.97 ± 0.3 cm³
Molar Volume = 141.9 ± 3.0 cm³
Parachor = 324.7 ± 4.0 cm³
Index of Refraction = 1.420 ± 0.02
Surface Tension = 27.3 ± 3.0 dyne/cm
Density = 0.818 ± 0.06 g/cm³
Dielectric Constant = Not available
Polarizability = 14.26 ± 0.5 10⁻²⁴cm³
Monoisotopic Mass = 116.120115 Da
Nominal Mass = 116 Da

Copy To Editor X Cancel ? Help