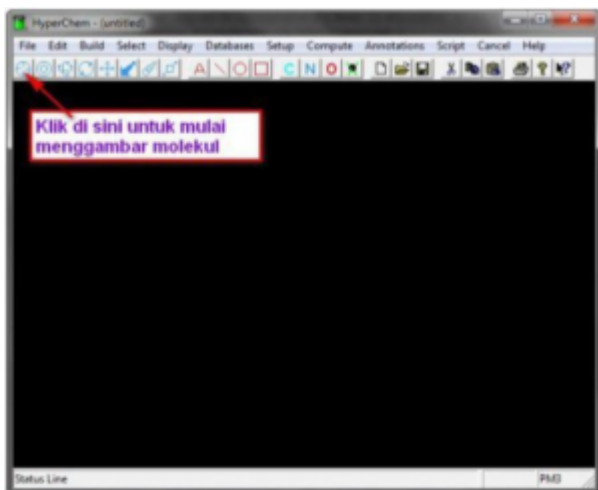


Tutorial Hyperchem

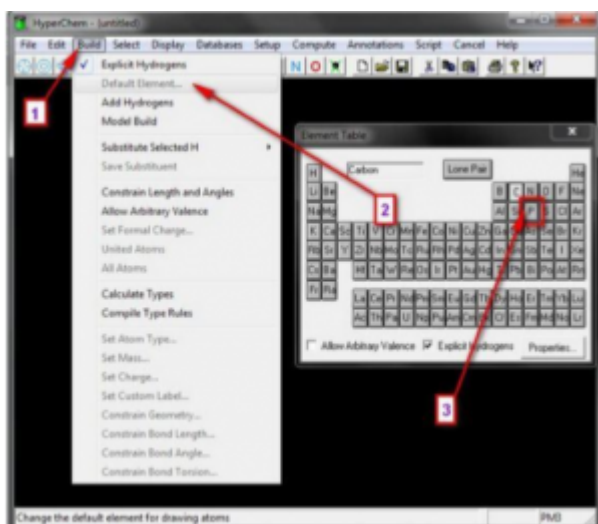
Membuat Bentuk Molekul dengan Hyperchem

HyperChem ialah suatu program simulasi dan pemodelan molekular yang memungkinkan perhitungan kimiawi yang kompleks. Software ini dapat digunakan untuk menggambar struktur kimia, optimasi geometri dengan berbagai macam model, study molecular dinamik dasar, study QSAR, dll. Berikut cara membuat molekul dengan Hyperchem:

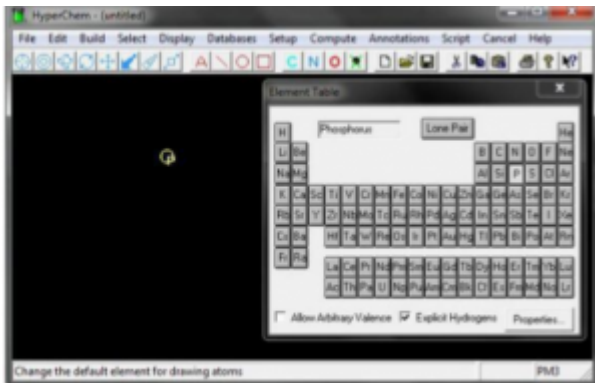
1. Dengan menggunakan Windows, kita mulai dari klik Start, All Program, Hyperchem Release x, Hyperchem.



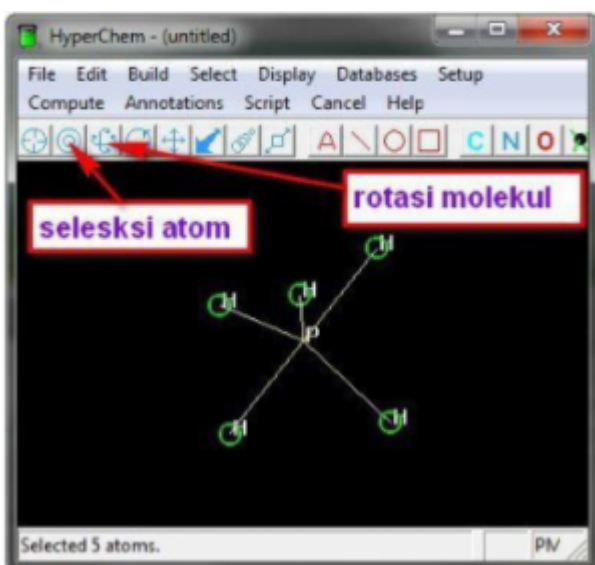
2. Selanjutnya ikuti langkah pada gambar berikut.



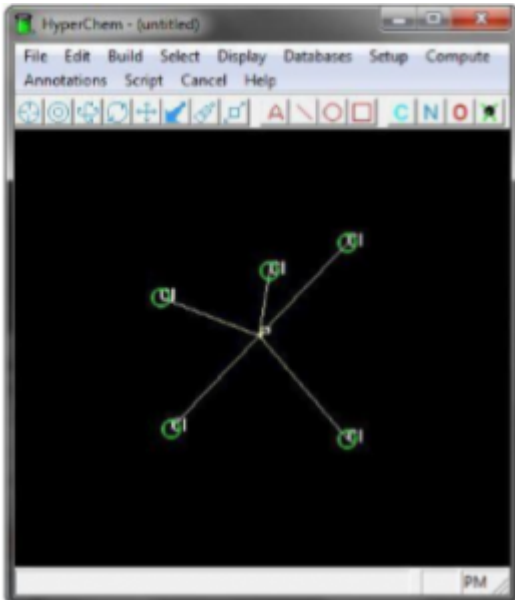
3. Ini hasilnya setelah dipilih Atom P dan di-klik-kan pada area kerja.



4. Berikutnya add hidrogen dari menu Build kemudian klik Add hidrogen untuk memunculkan atom H, meskipun atom H tampilannya bertumpuk kita bisa memutar dengan klik tool rotate out of plane sesuai langkah yang tertera pada gambar. Cara menyeleksi atom H yang akan diganti dengan Cl adalah dengan klik tool select hingga berubah warna.

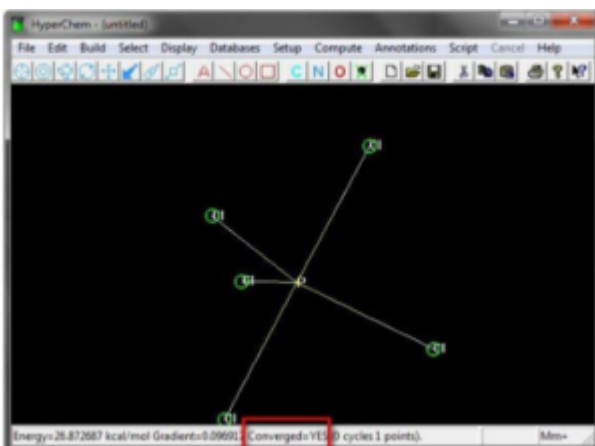


5. Selanjutnya ubah atom H dengan atom Cl hingga atom H menjadi Cl, caranya klik menu Build, Default Element (akan muncul semacam tabel periodik dan pilih Cl), klik-kan tepat di tengah bulatan seleksi atom H tadi, kalau sudah berubah menjadi Cl artinya sudah terganti H menjadi Cl. Lakukan pada semua H sebagaimana yang diinginkan.

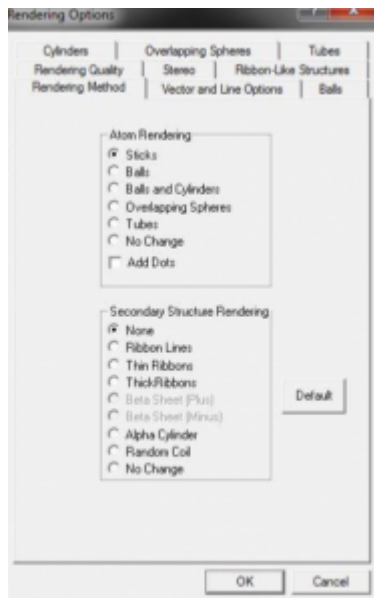


6. Lakukan optimasi geometri agar bentuk molekulnya menjadi benar secara kimia komputasi dengan standar hitungan dengan menggunakan salah satu metode, misalnya di sini saya gunakan metode Molecular Mechanic. Klik menu Setup pada menu bar. Klik Molecular Mechanic hingga tercentang terus klik Ok.

7. Selanjutnya kita lakukan optimasi geometri terhadap bentuk molekul yang kita buat. Klik menu Compute, Klik Geometry Optimization... dan klik Ok saja begitu menu pop-up muncul. Selanjutnya tunggu hingga proses optimasi selesai yang ditandai dengan Converged = YES. (ini ada pada bagian status bar, terletak dibagian bawah layar kerja Hyperchem.



8. Berikut kalau kita ingin menampilkan hasil dalam berbagai model, seperti yang ditawarkan pada menu Display, Rendering, pilih metode rendering yang kita inginkan.



9. Berikut tampilan beberapa hasil rendering:



Demikian cara menggambar bentuk molekul dengan menggunakan Hyperchem.