

Software QM Komputasi

V2.5.1

Panduan Lengkap, Praktis, dan Aplikatif
untuk Simulasi Kimia Kuantum



PySCF
(DFT, MP, HF)



ORCA
(DFT, TD-DFT)



MOPAC
(Semiempiris)



xTB
(Semiempiris)



RDKit
(Molekul & Properti)



**Research Complete
& ChatGPT Analysis**



QM Komputasi 2.5.1

Beranda

Molekul & Struktur

Metode & Basis

Setup Perhitungan

Jalankan

Hasil & Analisis

Visualisasi 3D

Properti Molekul

Spektrum

Research Complete

ChatGPT Analysis

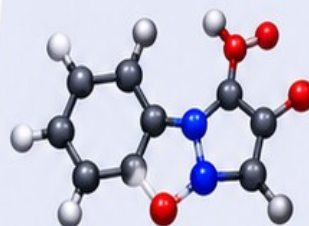
Bantuan

Struktur Molekul

Visualisasi 3D

Optimasi Geometri

Analisis Hasil



Properti Molekul

Rumus Molekul	$C_3H_9N_2O_4$
Berat Molekul	208.17 g/mol
Energi Total (DFT)	-615.4321 Ha
HOMO-LUMO Gap	4.21 eV
Momen Dipol	3.65 Debye

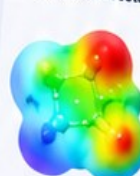
HOMO



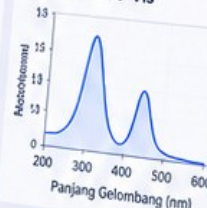
LUMO



Potensial Elektrostatik



Spektrum UV-Vis



DFT

MOLECULAR MODELING

QUANTUM CHEMISTRY

COMPUTATIONAL CHEMISTRY

KASMUI

SOFTWARE QM KOMPUTASI V2.5.1

*Panduan Pembelajaran, Penggunaan, Analisis Output, dan
Workflow Riset Kimia Komputasi*

Disusun berdasarkan source code QM Komputasi versi 2.5.1

<https://kasmui.cloud/qmkomputasi/>

**KASMUI
2026**

KATA PENGANTAR

Buku ini disusun untuk menjembatani dua kebutuhan yang sering terpisah dalam pembelajaran kimia komputasi: kemampuan menjalankan perangkat lunak dan kemampuan memahami arti ilmiah dari hasil yang dihasilkan. QM Komputasi V2.5.1 menyediakan antarmuka terpadu untuk menyiapkan struktur molekul, memilih metode, menjalankan backend komputasi, memantau proses, menyimpan keluaran, dan meninjau kembali hasil. Karena itu, buku ini tidak diposisikan sebagai panduan tombol demi tombol semata, melainkan sebagai pendamping belajar yang menempatkan setiap pilihan antarmuka ke dalam konteks konsep kimia kuantum dan praktik riset yang dapat dipertanggungjawabkan.

Tujuan utama penyusunan buku adalah membantu mahasiswa, dosen, peneliti pemula, dan pengguna laboratorium komputasi memahami alur kerja dari struktur awal sampai interpretasi akhir. Pembahasan dimulai dari arsitektur aplikasi dan persiapan struktur, kemudian berlanjut ke metode elektronik, basis set, optimasi, frekuensi, properti elektronik, add-on, deskriptor QSAR/QSPR, pengelolaan hasil, analisis berbantuan ChatGPT, serta workflow riset lanjutan. Setiap bagian berusaha menjelaskan bukan hanya apa yang dapat dipilih, tetapi mengapa suatu pilihan penting, apa konsekuensinya terhadap biaya komputasi, dan apa batas interpretasinya.

Sumber utama buku ini adalah kode program QM Komputasi V2.5.1 yang dilampirkan pengguna. Nama menu, metode, basis set, format input, jenis output, dan mekanisme penyimpanan hasil mengikuti implementasi tersebut. Referensi teori dan dokumentasi perangkat lunak digunakan sebagai pelengkap agar istilah teknis dapat ditempatkan pada kerangka ilmu yang tepat. Apabila suatu backend eksternal seperti MOPAC, xTB, DFTB+, Psi4, ORCA, Open Babel, atau OpenMM tidak tersedia pada sistem, buku ini tetap menjelaskan fungsinya tetapi menegaskan bahwa ketersediaan nyata bergantung pada instalasi lokal.

Buku juga menekankan validasi. Hasil numerik yang tampak rapi tidak otomatis benar secara ilmiah. Pengguna perlu memeriksa charge dan multiplicity, konvergensi SCF, kestabilan optimasi, frekuensi imajiner, kesesuaian geometri, kualitas basis set, model pelarut, serta konsistensi antar-metode. Untuk MOPAC, misalnya, aplikasi secara eksplisit membedakan panas pembentukan akhir dari energi elektronik total. Perbedaan seperti ini penting agar keluaran tidak dibaca di luar makna fisiknya.

Struktur buku dibuat bertahap. Bagian awal memberi orientasi dan dasar konsep; bagian tengah menjadi panduan operasional dan interpretasi; bagian lanjut membahas Research Complete dan pengelolaan data; bagian akhir menyediakan contoh riset, latihan, pembahasan, glosarium, dan daftar pustaka. Dengan susunan

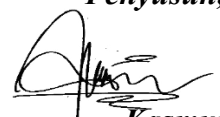
ini, pembaca dapat memakai buku secara linear untuk belajar atau secara selektif sebagai referensi ketika sedang menjalankan perhitungan tertentu.

Keterbatasan buku mengikuti keterbatasan implementasi aplikasi dan backend yang digunakan. Tidak semua metode menyediakan semua properti; tidak semua parser memiliki kedalaman yang sama; metode aproksimasi memiliki domain keandalan masing-masing; dan hasil yang baik tetap memerlukan penilaian kimia dari pengguna. Karena itu, buku ini mendorong pembaca untuk menyimpan log, mencatat konfigurasi, membandingkan metode bila perlu, dan menghindari kesimpulan yang melampaui data.

Terima kasih disampaikan kepada pengembang berbagai perangkat lunak ilmiah terbuka dan komunitas kimia komputasi yang menyediakan dokumentasi, metode, serta pustaka yang memungkinkan workflow terpadu seperti QM Komputasi dikembangkan. Semoga buku ini membantu pembaca membangun kebiasaan komputasi yang transparan, dapat direproduksi, dan berorientasi pada pertanyaan ilmiah, bukan sekadar pada keberhasilan menjalankan program.

September 2026

Penyusun,



Kasmui

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR	3
DAFTAR ISI.....	5
CARA MENGGUNAKAN BUKU INI.....	10
BAB 1. MENGENAL QM KOMPUTASI V2.5.1	11
1.1 Posisi aplikasi dalam pembelajaran dan riset	11
1.2 Cakupan fungsi versi 2.5.1	11
1.3 Prinsip penggunaan ilmiah	12
BAB 2. ARSITEKTUR PERANGKAT LUNAK, DEPENDENSI, DAN LINGKUNGAN.....	13
2.1 Lapisan antarmuka dan komputasi	13
2.2 Dependensi Python dan executable eksternal	13
2.3 Direktori data dan reproduktibilitas	14
BAB 3. DASAR KIMIA KOMPUTASI UNTUK MENGGUNAKAN APLIKASI	15
3.1 Model elektronik, metode, dan basis set	15
3.2 SCF dan konvergensi.....	15
3.3 Jenis job.....	16
3.4 Energi dan satuan	16
BAB 4. INPUT MOLEKUL DAN PERSIAPAN STRUKTUR.....	17
4.1 Lima jalur input utama	17
4.2 Geometri awal, ETKDG, MMFF94/UFF	17
4.3 Charge dan multiplicity	17
4.4 50 preset molekul	18
BAB 5. MEMILIH BACKEND, METODE, DAN BASIS SET	21
5.1 PySCF sebagai backend default	21
5.2 Basis set yang tersedia.....	21
5.3 Semiempirik, xTB, MOPAC, DFTB+, Psi4, dan ORCA.....	22

BAB 6. PENGATURAN KOMPUTASI DAN PENGENDALIAN JOB	24
6.1 Nama proyek dan provenance	24
6.2 Optimizer, SCF, grid, dan sumber daya	24
6.3 Menjalankan, memantau, dan menghentikan	24
BAB 7. MEMBACA ENERGI, ORBITAL, DIPOL, DAN MUATAN	26
7.1 Energi final dan energi relatif	26
7.2 HOMO, LUMO, dan gap	26
7.3 Momen dipol dan distribusi muatan	26
7.4 MEP dan cube	26
BAB 8. GEOMETRI, OPTIMASI, FREKUENSI, DAN TERMOKIMIA	27
8.1 Tabel geometri lengkap	27
8.2 Sejarah optimasi	27
8.3 Frekuensi dan sifat titik stasioner	27
8.4 Termokimia	27
BAB 9. ADD-ON SPEKTROSKOPI DAN DESKRIPTOR QSAR/QSPR	28
9.1 Pilihan Add-On	28
9.2 Deskriptor 2D/3D dan konseptual-DFT	28
BAB 10. PUSAT HASIL, FILE OUTPUT, DAN REPRODUKSIBILITAS	29
10.1 Struktur Pusat Hasil	29
10.2 File yang disimpan per molekul	29
10.3 Membaca summary.log dengan benar	30
BAB 11. ANALISIS CHATGPT TERINTEGRASI	31
11.1 Prinsip bundle otomatis	31
11.2 Batas penggunaan AI untuk interpretasi	31
11.3 Checklist sebelum mengirim analisis	31
BAB 12. RESEARCH COMPLETE DAN WORKFLOW RISET LANJUTAN	32
12.1 Doctor backend dan prinsip tidak ada fallback diam-diam	32
12.2 Ensemble konformer	32

12.3 DFTB+ dan parameter Slater–Koster	32
12.4 Psi4: solvasi, TS, IRC, BSSE, dan SAPT	32
12.5 OpenMM	33
12.6 Scientific Gate	33
BAB 13. INPUT TXT/GAUSSIAN-LIKE DAN OTOMASI PENGATURAN ...	34
13.1 Tujuan format input TXT	34
13.2 Template satu molekul	34
13.3 Template multi-molekul	35
BAB 14. DUA PULUH CONTOH RISET DALAM APLIKASI.....	36
01. Optimasi Geometri dan Ikatan O–H pada Air	36
02. Struktur Elektronik Amonia dan Momen Dipol.....	36
03. Energi dan Simetri Molekul Metana	37
04. Vibrasi Regang CO ₂ dan Karakter Molekul Linear.....	38
05. Gugus Karbonil Formaldehida: MEP dan HOMO–LUMO	38
06. Ikatan Hidrogen dan Polaritas Metanol.....	39
07. Konformer Etanol: Anti dan Gauche.....	39
08. Spektrum IR Aseton dan Karakter C=O.....	40
09. Asam Asetat: Konformasi dan Distribusi Muatan	40
10. Benzena: Delokalisasi π dan Orbital Frontier	41
11. Fenol: Pengaruh Gugus –OH pada Cincin Aromatik.....	42
12. Anilina: Donasi Pasangan Elektron N ke Sistem Aromatik.....	42
13. Piridina: Basa Aromatik dan Pusat Akseptor	43
14. Glisina: Pencarian Konformer Molekul Asam Amino	43
15. Alanina: Konformasi dan Stereokimia	44
16. Aspirin: MEP, HOMO–LUMO, dan Situs Reaktivitas.....	44
17. Kafeina: Descriptor Elektronik dan QSAR/QSPR.....	45
18. Ibuprofen: Ensemble Konformer dan Energi Relatif	46
19. Parasetamol: Pola Donor/Akseptor Ikatan Hidrogen	46

20. Urea: Resonansi, Planaritas, dan Ikatan C–N.....	47
BAB 15. TUTORIAL PRAKTIS BERTAHAP.....	48
15.1 Tutorial pertama: H ₂ O	48
Pilih Water	48
Program QM	48
Job.....	48
Metode/basis	48
Charge/multiplicity	48
Sumber daya	48
Jalankan	48
Validasi	48
Analisis	48
Ekspor.....	48
15.2 Tutorial kedua: piridina	49
15.3 Tutorial ketiga: glisina dan konformer	49
15.4 Tutorial keempat: aspirin atau parasetamol.....	49
BAB 16. TROUBLESHOOTING, VALIDASI, DAN PRAKTIK BAIK	50
16.1 Backend tidak ditemukan	50
16.2 SCF tidak konvergen	50
16.3 Optimasi tidak selesai.....	50
16.4 Frekuensi imajiner	50
16.5 Checklist sebelum membuat kesimpulan	50
BAB 17. LATIHAN, PEMBAHASAN, DAN PENGEMBANGAN	51
17.1 Dua puluh soal latihan	51
Soal 1	51
Soal 2	51
Soal 3	51
Soal 4	51

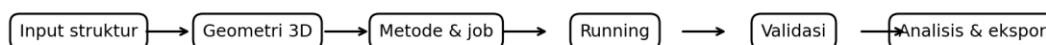
Soal 5	51
Soal 6	51
Soal 7	52
Soal 8	52
Soal 9	52
Soal 10	52
Soal 11	52
Soal 12	52
Soal 13	52
Soal 14	53
Soal 15	53
Soal 16	53
Soal 17	53
Soal 18	53
Soal 19	53
Soal 20	54
17.2 Soal pengembangan.....	54
GLOSARIUM	55
LAMPIRAN A. DAFTAR METODE DAN BASIS SET RINGKAS	57
LAMPIRAN B. CHECKLIST PELAPORAN PENELITIAN	58
DAFTAR PUSTAKA	59
CATATAN AKHIR	60

CARA MENGGUNAKAN BUKU INI

Pembaca yang baru mengenal kimia komputasi disarankan membaca Bab 1 sampai Bab 4 sebelum menjalankan kasus sendiri. Pembaca yang telah memahami dasar HF/DFT dapat langsung menuju Bab 5 dan Bab 6 untuk mempelajari pengaturan aplikasi dan backend. Ketika perhitungan selesai, gunakan Bab 7 sampai Bab 10 untuk menilai kualitas hasil, membaca tabel, dan mengelola data. Bab Research Complete dan contoh riset dapat dipakai sebagai jembatan menuju proyek skripsi atau penelitian mandiri.

- Gunakan contoh H₂O untuk memastikan instalasi dan alur dasar berfungsi sebelum mencoba molekul besar.
- Simpan nama proyek yang deskriptif agar riwayat run mudah dilacak.
- Jangan menaikkan kualitas metode, basis, grid, dan jumlah analisis sekaligus tanpa memahami biaya komputasinya.
- Baca log dan indikator konvergensi sebelum menafsirkan energi atau properti.
- Gunakan hasil dari metode berbeda sebagai pembandingan ilmiah, bukan sebagai perlombaan mencari angka tertentu.

Alur Utama QM Komputasi 2.5.1



Gambar 1. Alur utama penggunaan QM Komputasi V2.5.1.

BAB 1. MENGENAL QM KOMPUTASI V2.5.1

1.1 Posisi aplikasi dalam pembelajaran dan riset

QM Komputasi V2.5.1 adalah aplikasi antarmuka berbasis Streamlit yang menggabungkan persiapan struktur, pemilihan backend, pengaturan komputasi, eksekusi job, pemantauan, penyimpanan, dan peninjauan hasil. Dalam source code, tujuan aplikasi dirumuskan sebagai satu antarmuka untuk menyiapkan struktur molekul nyata, menjalankan perhitungan kimia kuantum atau semiempirik, memantau proses, dan menyajikan hasil dalam format yang mudah dianalisis serta diekspor. Orientasi ini menjadikan aplikasi relevan untuk kelas, praktikum, eksplorasi awal penelitian, dan dokumentasi workflow.

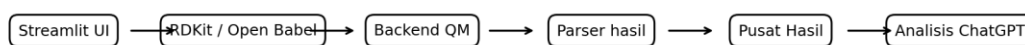
Aplikasi tidak menggantikan teori kimia kuantum. Sebaliknya, ia menyatukan banyak langkah teknis sehingga pembelajar dapat lebih cepat melihat hubungan antara pilihan model dan konsekuensi hasil. Contohnya, pengguna dapat menjalankan geometri air dengan B3LYP/STO-3G untuk uji cepat, kemudian mengulang dengan def2-SVP untuk melihat dampak basis set. Perbandingan semacam ini lebih edukatif daripada menganggap satu setelan sebagai jawaban universal.

1.2 Cakupan fungsi versi 2.5.1

Versi ini mempertahankan workflow inti sambil memperluas jalur input, hasil, dan riset. Di sisi input tersedia 50 molekul preset, SMILES, InChI, file lokal, upload struktur, editor JSME 2D, serta input deck TXT/Gaussian-like yang dapat menyimpan struktur dan pengaturan komputasi sekaligus. Di sisi backend terdapat PySCF, semiempirik PySCF, MOPAC CLI, xTB CLI, DFTB+ CLI, Psi4 CLI, dan ORCA CLI. Beberapa fungsi Research Complete menambahkan ensemble konformer, workflow interaksi, TS/IRC, serta OpenMM dengan syarat parameterisasi eksplisit.

Di sisi hasil, aplikasi menyimpan energi, koordinat, orbital, muatan, frekuensi, geometri lengkap, sejarah optimasi, deskriptor, hasil add-on, file struktur, JSON, log, dan arsip proyek. Pusat Hasil memindai run lama dan baru secara folder-first sehingga pengguna dapat meninjau kembali pekerjaan yang tidak lagi merupakan run terbaru. Integrasi Analisis ChatGPT membaca satu folder run dan menyusun bundle data tanpa meminta pengguna memilih file keluaran satu per satu.

Arsitektur Fungsional Aplikasi



Gambar 2. Arsitektur fungsional QM Komputasi V2.5.1.

1.3 Prinsip penggunaan ilmiah

Tiga prinsip sebaiknya dipertahankan. Pertama, setiap angka harus dikaitkan dengan metode, basis, charge, multiplicity, dan kondisi perhitungan. Kedua, konvergensi dan validasi struktur harus diperiksa sebelum membahas properti. Ketiga, semua kesimpulan perlu dibatasi oleh apa yang benar-benar dihitung. Gap HOMO–LUMO, misalnya, dapat menjadi deskriptor elektronik berguna, tetapi tidak otomatis identik dengan band gap eksperimen atau energi eksitasi optik.

Prinsip penting — Aplikasi membantu otomatisasi teknis, tetapi keputusan ilmiah tetap berada pada pengguna. Nilai komputasi harus ditafsirkan sesuai model dan kualitas konvergensinya.

BAB 2. ARSITEKTUR PERANGKAT LUNAK, DEPENDENSI, DAN LINGKUNGAN

2.1 Lapisan antarmuka dan komputasi

Antarmuka utama dibangun dengan Streamlit. RDKit berperan pada identitas kimia, konektivitas, geometri awal, visualisasi, serta sejumlah deskriptor. PySCF menjadi backend internal utama untuk HF, DFT, MP2, orbital, muatan, dan berbagai properti yang dapat dihitung langsung. Backend CLI eksternal dipanggil melalui proses sistem, lalu keluarannya diparsing kembali ke struktur hasil umum agar dapat ditampilkan dalam Pusat Hasil.

Pemisahan antara antarmuka dan backend penting untuk dipahami. Jika Streamlit berjalan tetapi executable ORCA tidak ada pada PATH, menu ORCA tetap dapat muncul tetapi job tidak dapat dieksekusi. Demikian juga DFTB+ memerlukan parameter Slater–Koster yang disediakan pengguna; aplikasi tidak mengunduh atau mengganti parameter secara diam-diam. Sikap eksplisit ini mencegah pengguna mendapatkan hasil yang tampak sah padahal berasal dari fallback yang tidak disadari.

2.2 Dependensi Python dan executable eksternal

Kode versi 2.5.1 melakukan bootstrap untuk NumPy, pandas, Streamlit, RDKit, dan PySCF. Streamlit dipastikan berada pada versi yang menyediakan API iframe yang diperlukan aplikasi. Dependensi runtime lain diperiksa melalui fungsi status backend dan installer terkontrol. Namun executable sistem seperti ORCA, MOPAC, xTB, DFTB+, Psi4, dan Open Babel tidak dapat dipaksakan melalui pip apabila paketnya memang membutuhkan instalasi khusus.

Tabel 1. Komponen dan fungsi utamanya.

Komponen	Peran dalam aplikasi	Catatan
Streamlit	Antarmuka web lokal, widget, navigasi, hasil	Versi aplikasi memerlukan API Streamlit modern.
RDKit	SMILES/InChI, konektivitas, 2D/3D, geometri awal, deskriptor	Bukan pengganti backend energi QM.
PySCF	HF, DFT, MP2 dan properti elektronik	Backend default aplikasi.
Open Babel	Konversi format struktur tambahan	Dipakai bila RDKit tidak membaca format secara langsung.
MOPAC/xTB/DFTB+/Psi4/ORCA	Backend eksternal	Harus tersedia secara nyata pada sistem.
OpenMM	Molecular dynamics pada Research Complete	Memerlukan PDB dan System XML yang sudah diparameterisasi.

2.3 Direktori data dan reproduktibilitas

Data runtime ditempatkan pada direktori yang dapat ditulis pengguna, secara default di `~/.local/share/qm-komputasi`. Pemisahan ini penting ketika aplikasi dipasang melalui paket Debian di lokasi read-only seperti `/opt`. Direktori run menyimpan pekerjaan secara persisten, sedangkan katalog molekul pengguna disimpan dalam JSON. Dengan desain tersebut, pembaruan aplikasi tidak seharusnya menghapus riwayat komputasi pengguna.

Reproduksibilitas bukan hanya menyimpan file akhir. Konfigurasi job, log, metode, basis, toleransi SCF, thread, memori, add-on, dan struktur awal/final perlu dipertahankan. Buku ini menyarankan pengguna menganggap satu folder run sebagai unit bukti komputasi: jangan memisahkan tabel energi dari log dan konfigurasi yang menjelaskan bagaimana angka itu diperoleh.

BAB 3. DASAR KIMIA KOMPUTASI UNTUK MENGGUNAKAN APLIKASI

3.1 Model elektronik, metode, dan basis set

Perhitungan struktur elektronik mengganti persoalan banyak partikel dengan model matematis yang dapat diselesaikan secara numerik. Pada Hartree–Fock, elektron diperlakukan dalam medan rata-rata determinan tunggal. DFT menggunakan kerapatan elektron sebagai besaran sentral dan memasukkan pertukaran-korelasi melalui fungsional. MP2 menambahkan korelasi elektron sebagai koreksi perturbatif terhadap referensi HF. Metode semiempirik menggunakan aproksimasi dan parameterisasi yang jauh lebih agresif untuk memperoleh kecepatan yang lebih tinggi.

Basis set menentukan fungsi matematika yang digunakan untuk membentuk orbital molekul. Basis minimal seperti STO-3G murah tetapi kurang fleksibel; basis split-valence dan keluarga def2 atau correlation-consistent memberi representasi yang lebih kaya dengan biaya komputasi lebih besar. Karena itu, peningkatan basis bukan sekadar pilihan kosmetik. Jumlah fungsi basis memengaruhi waktu SCF, kebutuhan memori, stabilitas optimasi, dan kualitas properti yang dihitung.

3.2 SCF dan konvergensi

HF dan DFT umumnya memerlukan prosedur self-consistent field. Iterasi dimulai dari tebakan kerapatan, membangun operator efektif, menyelesaikan orbital, memperbarui kerapatan, lalu mengulang sampai perubahan energi dan kerapatan memenuhi toleransi. Kegagalan konvergensi dapat disebabkan oleh struktur awal buruk, keadaan elektronik sulit, basis terlalu menantang, multiplicity tidak tepat, atau strategi SCF yang tidak cocok. Karena itu, “job selesai” tidak boleh disamakan dengan “hasil valid”.

Aplikasi menyediakan toleransi konvergensi SCF dan batas siklus. Toleransi lebih ketat dapat meningkatkan konsistensi properti, tetapi menambah iterasi dan kadang memperumit konvergensi. Untuk pembelajaran, nilai 10^{-7} sampai 10^{-9} sering cukup untuk menunjukkan pengaruh kriteria konvergensi; untuk riset, kebutuhan harus mengikuti tujuan, metode, dan sensitivitas properti.

3.3 Jenis job

Tabel 2. Jenis job inti dalam QM Komputasi 2.5.1.

Job	Tujuan	Interpretasi utama
Single Point	Energi dan properti pada geometri tetap	Tidak mengubah geometri input.
Single Point + Gradient	Energi dan gradien pada geometri tetap	Menilai gaya atau kemiringan permukaan energi.
Geometry Optimization	Mencari geometri stasioner energi rendah	Perlu validasi frekuensi bila ingin memastikan minimum.
Geometry Optimization + Final Gradient	Optimasi lalu gradien akhir	Mengecek sisa gaya setelah optimasi.
Frequency Analysis	Menghitung mode vibrasi pada geometri saat ini	Frekuensi imajiner memberi informasi tentang sifat titik stasioner.
Geometry Optimization + Frequency	Optimasi kemudian analisis frekuensi	Workflow umum untuk validasi minimum dan data termokimia bila tersedia.

3.4 Energi dan satuan

Energi elektronik sering dinyatakan dalam hartree (Eh). Aplikasi juga mengonversi ke eV, kJ mol⁻¹, kcal mol⁻¹, dan cm⁻¹ untuk memudahkan perbandingan konteks. Konversi satuan tidak mengubah makna energi. Hal yang lebih penting adalah memastikan jenis energi yang dibandingkan sama: energi elektronik total, energi bebas Gibbs, entalpi, atau panas pembentukan bukan besaran yang dapat dipertukarkan tanpa definisi.

Hubungan sederhana yang sering dipakai dalam aplikasi adalah $\Delta E_{\text{gap}} = \epsilon_{\text{LUMO}} - \epsilon_{\text{HOMO}}$. Nilai ini adalah perbedaan energi orbital frontier pada model yang dihitung. Ia dapat berguna sebagai descriptor, tetapi tidak boleh diberi makna eksperimental yang lebih luas tanpa dasar teori dan perbandingan yang tepat.

BAB 4. INPUT MOLEKUL DAN PERSIAPAN STRUKTUR

4.1 Lima jalur input utama

Aplikasi menerima molekul dari preset, SMILES, InChI, file lokal, dan upload. Selain itu tersedia JSME 2D serta input TXT/Gaussian-like. Setiap jalur pada akhirnya dinormalisasi menjadi objek molekul dengan identitas, charge, multiplicity, konektivitas, dan koordinat 3D bila tersedia. Strategi ini membuat backend komputasi menerima representasi yang konsisten meskipun sumber input berbeda.

Tabel 3. Format struktur yang dibaca langsung atau melalui konverter.

Format	Ekstensi/contoh	Mekanisme
SDF	*.sdf, *.sd	RDKit supplier
MOL/MDL	*.mol, *.mdl	RDKit Mol block
MOL2	*.mol2	RDKit Mol2 block
PDB	*.pdb, *.ent	RDKit PDB block
XYZ	*.xyz	RDKit + inferensi ikatan
SMILES	*.smi, *.smiles, *.can	SMILES baris pertama
InChI	*.inchi	InChI baris pertama
TXT sederhana	*.txt	SMILES atau InChI pada baris pertama
Format lain	bergantung Open Babel	Dikonversi ke SDF bila Open Babel tersedia

4.2 Geometri awal, ETKDG, MMFF94/UFF

SMILES dan InChI tidak selalu membawa koordinat 3D. RDKit digunakan untuk menambahkan hidrogen, membangkitkan konformer 3D, dan bila diaktifkan melakukan pre-optimasi MMFF94 atau UFF. Tahap ini harus dipahami sebagai persiapan struktur, bukan sebagai pengganti optimasi QM. Tujuannya adalah memberikan geometri awal yang masuk akal sehingga backend elektronik tidak memulai dari struktur yang sangat buruk.

Untuk molekul fleksibel, satu geometri awal tidak selalu mewakili minimum global. Research Complete menyediakan ensemble konformer dan ranking sehingga beberapa kandidat energi rendah dapat dibawa ke optimasi tingkat lebih tinggi. Pendekatan ini lebih aman daripada mengoptimasi satu konformer arbitrer lalu menganggapnya sebagai struktur paling stabil.

4.3 Charge dan multiplicity

Charge adalah jumlah muatan formal keseluruhan, sedangkan multiplicity berhubungan dengan spin total melalui $2S+1$. Molekul netral closed-shell umum memakai charge 0 dan multiplicity 1. Radikal atau ion dapat membutuhkan

multiplicity berbeda. Kesalahan pada dua parameter ini dapat membuat perhitungan menggambarkan spesies elektronik yang bukan target penelitian. Aplikasi memungkinkan nilai tersimpan pada molekul atau override dari sidebar, sehingga pengguna harus sadar apakah setelan diterapkan individual atau serentak.

4.4 50 preset molekul

Preset mempercepat pembelajaran karena pengguna tidak perlu menulis identifier dari awal. Daftarnya mencakup molekul kecil, aromatik, biomolekul, produk alam, obat, dan beberapa senyawa antikanker. Preset bukan rekomendasi metode; ia hanya menyediakan struktur/identifier awal.

Tabel 4. Lima puluh preset molekul yang tersedia dalam source code.

No.	Nama	Formula	Kategori	SMILES
1	Benzene	C ₆ H ₆	Preset awal	<chem>c1ccccc1</chem>
2	Toluene	C ₇ H ₈	Preset awal	<chem>Cc1ccccc1</chem>
3	Phenol	C ₆ H ₆ O	Preset awal	<chem>Oc1ccccc1</chem>
4	Water	H ₂ O	Small molecule	<chem>O</chem>
5	Methane	CH ₄	Small molecule	<chem>C</chem>
6	Ethane	C ₂ H ₆	Small molecule	<chem>CC</chem>
7	Ammonia	NH ₃	Small molecule	<chem>N</chem>
8	Methanol	CH ₄ O	Small molecule	<chem>CO</chem>
9	Ethanol	C ₂ H ₆ O	Small molecule	<chem>CCO</chem>
10	Acetone	C ₃ H ₆ O	Small molecule	<chem>CC(=O)C</chem>
11	Acetic acid	C ₂ H ₄ O ₂	Small molecule	<chem>CC(=O)O</chem>
12	Formaldehyde	CH ₂ O	Small molecule	<chem>C=O</chem>
13	Urea	CH ₄ N ₂ O	Small molecule	<chem>NC(N)=O</chem>
14	Acetonitrile	C ₂ H ₃ N	Small molecule	<chem>CC#N</chem>
15	Nitrobenzene	C ₆ H ₅ NO ₂	Aromatic	<chem>[O-][N+](=O)c1ccccc1</chem>
16	Aniline	C ₆ H ₇ N	Aromatic	<chem>Nc1ccccc1</chem>
17	Pyridine	C ₅ H ₅ N	Heteroaromatic	<chem>n1ccccc1</chem>
18	Naphthalene	C ₁₀ H ₈	Aromatic	<chem>c1ccc2ccccc2c1</chem>
19	Caffeine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	Bioactive	<chem>Cn1c(=O)c2c(ncn2C)n(C)c1=O</chem>
20	Paracetamol	C ₈ H ₉ NO ₂	Drug	<chem>CC(=O)NC1=CC=C(O)C=C1</chem>
21	Aspirin	C ₉ H ₈ O ₄	Drug	<chem>CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)O</chem>
22	Ibuprofen	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	Drug	<chem>CC(C)Cc1ccc(cc1)[C@@H](C)C(=O)O</chem>
23	Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	Drug	<chem>COc1ccc2cc([C@@H](C)C(=O)O)ccc2c1</chem>
24	Glucose	C ₆ H ₁₂ O ₆	Biomolecule	<chem>OC[C@H]1O[C@@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]1O</chem>

No.	Nama	Formula	Kategori	SMILES
25	Curcumin	C ₂₁ H ₂₀ O ₆	Natural product	<chem>COc1cc(/C=C/C(=O)C C(=O)/C=C/c2ccc(O)c (OC)c2)ccc1O</chem>
26	Quercetin	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	Natural product	<chem>O=c1c(O)c(- c2ccc(O)c(O)c2)oc2cc (O)cc(O)c12</chem>
27	Resveratrol	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	Natural product	<chem>Oc1ccc(/C=C/c2cc(O) cc(O)c2)cc1</chem>
28	Tamoxifen	C ₂₆ H ₂₉ NO	Breast cancer	<chem>CC/C(=C(\c1cccc1)c 2ccc(OCCN(C)C)cc2)/ c3cccc3</chem>
29	Letrozole	C ₁₇ H ₁₁ N ₅	Breast cancer	<chem>N#Cc1ccc(cc1)C(c2cc c(C#N)cc2)n3cncn3</chem>
30	Anastrozole	C ₁₇ H ₁₉ N ₅	Breast cancer	<chem>CC(C)(C#N)c1cc(cc(c 1)C(C)(C)C#N)Cn2cn cn2</chem>
31	Exemestane	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	Breast cancer	<chem>C[C@]12CC[C@H]3[C@H]([C@@H]1CC C2=O)CC(=C)C4=CC (=O)C=C[C@]34C</chem>
32	Methotrexate	C ₂₀ H ₂₂ N ₈ O ₅	Anticancer	<chem>CN(CC1=CN=C2C(= N1)C(=NC(=N2)N)N) C3=CC=C(C=C3)C(= O)N[C@@H](CCC(= O)O)C(=O)O</chem>
33	Cyclophosphamide	C ₇ H ₁₅ Cl ₂ N ₂ O ₂ P	Anticancer	<chem>O=P1(N(CCCl)CCCl) OCCCN1</chem>
34	5-Fluorouracil	C ₄ H ₃ FN ₂ O ₂	Anticancer / skin	<chem>O=c1[nH]cc(F)c(=O)[nH]1</chem>
35	Lapatinib	C ₂₉ H ₂₆ ClFN ₄ O ₄ S	Breast cancer	<chem>CS(=O)(=O)CCNCC1 =CC=C(O1)C2=CC3= C(C=C2)N=CN=C3N C4=CC(=C(C=C4)OC C5=CC(=CC=C5)F)Cl</chem>
36	Olaparib	C ₂₄ H ₂₃ FN ₄ O ₃	Breast / ovarian cancer	<chem>C1CC1C(=O)N2CCN(CC2)C(=O)C3=C(C= CC(=C3)CC4=NNC(= O)C5=CC=CC=C54)F</chem>
37	Sunitinib	C ₂₂ H ₂₇ FN ₄ O ₂	Kidney cancer	<chem>CCN(CC)CCNC(=O) C1=C(NC(=C1C)/C= C\2/C3=C(C=CC(=C3)F)NC2=O)C</chem>
38	Sorafenib	C ₂₁ H ₁₆ ClF ₃ N ₄ O ₃	Kidney cancer	<chem>CNC(=O)c1cc(Oc2ccc (NC(=O)Nc3ccc(Cl)c(C(F)(F)F)c3)cc2)ccn1</chem>

No.	Nama	Formula	Kategori	SMILES
39	Axitinib	C22H18N4OS	Kidney cancer	<chem>CNC(=O)C1=CC=CC=C1SC2=CC3=C(C=C2)C(=NN3)/C=C/C4=CC=CC=N4</chem>
40	Cabozantinib	C28H24FN3O5	Kidney cancer / medium-large	<chem>COC1=CC2=C(C=CN=C2C=C1OC)OC3=C(C=C(C=C3)NC(=O)C4(CC4)C(=O)NC5=C(C=C(C=C5)F</chem>
41	Vismodegib	C19H14Cl2N2O3S	Skin cancer	<chem>CS(=O)(=O)C1=CC(=C(C=C1)C(=O)NC2=CC(=C(C=C2)Cl)C3=CC=CC=N3)Cl</chem>
42	Vemurafenib	C23H18ClF2N3O3S	Melanoma / skin cancer	<chem>CCCS(=O)(=O)NC1=C(C(=C(C=C1)F)C(=O)C2=CNC3=C2C=C(C=N3)C4=CC=C(C=C4)Cl)F</chem>
43	Dabrafenib	C23H20F3N5O2S2	Melanoma / skin cancer	<chem>CC(C)(C)C1=NC(=C(S1)C2=NC(=NC=C2)N)C3=C(C(=CC=C3)NS(=O)(=O)C4=C(C=CC=C4F)F)F</chem>
44	Dacarbazine	C6H10N6O	Melanoma anticancer /	<chem>CN(C)N=Nc1[nH]cnc1C(N)=O</chem>
45	Temozolomide	C6H6N6O2	Anticancer	<chem>CN1C(=O)N2C=NC(=C2N=N1)C(N)=O</chem>
46	Erlotinib	C22H23N3O4	Anticancer	<chem>COCCOc1cc2ncnc(Nc3cccc(C#C)c3)c2cc1OCCOC</chem>
47	Gefitinib	C22H24ClFN4O3	Anticancer	<chem>COc1cc2ncnc(Nc3ccc(F)c(Cl)c3)c2cc1OCCCN1CCOCC1</chem>
48	Imatinib	C29H31N7O	Anticancer / large	<chem>Cc1ccc(cc1Nc2cccc(n2)c3ccnc3)NC(=O)c4ccc(CN5CCN(C)CC5)cc4</chem>
49	Hydroxyurea	CH4N2O2	Anticancer	<chem>NC(=O)NO</chem>
50	Estradiol	C18H24O2	Hormone / breast-cancer reference	<chem>CC12CCC3C(C1CCC2O)CCC4=CC(O)=CC=C34</chem>

BAB 5. MEMILIH BACKEND, METODE, DAN BASIS SET

5.1 PySCF sebagai backend default

Setelan default aplikasi menempatkan PySCF sebagai backend utama dengan B3LYP, def2-SVP, dan geomeTRIC. Pilihan ini masuk akal sebagai titik awal karena PySCF terintegrasi langsung dalam Python, memungkinkan akses lebih kaya ke matriks orbital, muatan, gradien, cube, dan data lain. Namun default bukan berarti selalu terbaik. Molekul, properti, unsur, keadaan spin, dan tujuan penelitian harus menentukan metode final.

Tabel 5. Metode PySCF yang ditampilkan aplikasi.

Metode	Keluarga	Fungsional/xc	Optimasi melalui jalur aplikasi
HF	HF	-	Ya
RHF	HF	-	Ya
ROHF	HF	-	Ya
UHF	HF	-	Ya
LDA (SVWN)	DFT	SVWN	Ya
PBE	DFT	PBE	Ya
BP86	DFT	BP86	Ya
BLYP	DFT	BLYP	Ya
B3LYP	DFT	B3LYP	Ya
B3LYP-D3BJ	DFT	B3LYP-D3BJ	Ya
PBE0	DFT	PBE0	Ya
PBE0-D3BJ	DFT	PBE0-D3BJ	Ya
TPSS	DFT	TPSS	Ya
TPSSh	DFT	TPSSh	Ya
M06-L	DFT	M06-L	Ya
M06-2X	DFT	M06-2X	Ya
CAM-B3LYP	DFT	CAM-B3LYP	Ya
ω B97X-D3BJ	DFT	WB97X-D3BJ	Ya
SCAN	DFT	SCAN	Ya
MP2	MP2	-	Tidak

5.2 Basis set yang tersedia

Tabel 6. Basis set dalam aplikasi.

Kelompok ukuran praktis	Basis set
Small	STO-3G
Small	3-21G
Small	6-31G
Small	6-31G*
Small	6-31G**
Small	def2-SV(P)
Small	def2-SVP

Kelompok ukuran praktis	Basis set
Small	cc-pVDZ
Small	pcseg-0
Medium	6-311G
Medium	6-311G*
Medium	6-311G**
Medium	def2-SVPD
Medium	def2-TZVP
Medium	def2-TZVPP
Medium	cc-pVTZ
Medium	aug-cc-pVDZ
Medium	pcseg-1
Large	def2-TZVPD
Large	def2-TZVPPD
Large	def2-QZVP
Large	cc-pVQZ
Large	aug-cc-pVTZ
Large	pcseg-2
Very large	def2-QZVPP
Very large	def2-QZVPD
Very large	def2-QZVPPD
Very large	aug-cc-pVQZ
Very large	pcseg-3

Pengelompokan Small, Medium, Large, dan Very large adalah pengelompokan praktis antarmuka, bukan klasifikasi universal kualitas basis. Kebutuhan basis ditentukan oleh jenis unsur dan properti. Basis diffuse dapat penting untuk anion, keadaan tereksitasi, atau distribusi elektron yang luas; fungsi polarisasi penting untuk fleksibilitas bentuk orbital; basis besar menaikkan biaya dengan cepat.

5.3 Semiempirik, xTB, MOPAC, DFTB+, Psi4, dan ORCA

Tabel 7. Ringkasan backend non-default.

Backend	Metode/kapabilitas yang diekspos	Catatan operasional
PySCF Semiempirical	MINDO/3, AM1	Tersedia melalui ekstensi semiempirik; recovery SCF diterapkan.
MOPAC CLI	MNDO, AM1, PM3, RM1, MNDOD, PM6, PM6-D3, PM6-DH+, PM6-DH2, PM6-D3H4, PM6-DH2X, PM6-D3H4X, PM7	Menghasilkan panas pembentukan; perlu MOPAC pada PATH.
xTB CLI	GFN2-xTB, GFN1-xTB, GFN0-xTB	Cocok untuk screening, geometri, dan konformer.
DFTB+ CLI	DFTB2/SCC, DFTB3	Memerlukan Slater–Koster yang dipilih pengguna.

Backend	Metode/kapabilitas yang diekspos	Catatan operasional
Psi4 CLI	HF, B3LYP, PBE0, M06-2X, wB97X-D, MP2, SAPT0	Mendukung workflow Standard, TS, IRC, Counterpoise BSSE, SAPT0.
ORCA CLI	HF, RHF, ROHF, UHF, B3LYP, PBE, PBE0, BP86, M06-2X, CAM-B3LYP	Executable eksternal; kemampuan aktual bergantung instalasi ORCA.

Tidak ada satu backend yang unggul untuk seluruh kebutuhan. Metode cepat seperti xTB dapat berguna untuk menyaring puluhan konformer sebelum optimasi DFT. DFTB+ dapat memberi kompromi biaya-akurasi bila parameter yang tepat tersedia. Psi4 berguna untuk workflow interaksi dan titik stasioner tertentu. ORCA menyediakan ekosistem elektronik yang luas tetapi aplikasinya di sini tergantung adapter yang ditulis dalam source code.

BAB 6. PENGATURAN KOMPUTASI DAN PENGENDALIAN JOB

6.1 Nama proyek dan provenance

Nama proyek bukan detail administratif. Aplikasi membuat salinan file dengan prefiks proyek sehingga keluaran dari eksperimen yang mirip dapat dibedakan. Gunakan nama yang menyatakan sistem, metode, dan tujuan, misalnya Pyridine_B3LYP_def2SVP_OptFreq. Hindari nama generik “test” untuk pekerjaan yang akan dipakai dalam laporan atau publikasi.

6.2 Optimizer, SCF, grid, dan sumber daya

Tabel 8. Parameter penting yang tersedia pada sidebar.

Parameter	Arti	Pertimbangan
Optimizer	geomeTRIC melalui PySCF, PyBerny melalui PySCF, ASE-BFGS melalui PySCF (opsional)	Algoritme geometri; dukungan bergantung paket tambahan.
SCF tolerance	Kriteria konvergensi energi/SCF	Terlalu longgar dapat mengganggu properti; terlalu ketat menambah biaya.
DFT grid level	Kerapatan grid integrasi DFT	Grid lebih tinggi dapat meningkatkan stabilitas numerik.
Max optimization steps	Batas langkah optimasi	Batas terlalu rendah dapat menghentikan optimasi prematur.
Max SCF cycles	Batas iterasi SCF	Naikkan dengan alasan, bukan untuk menyembunyikan masalah model.
CPU threads	Paralelisme CPU	Sesuaikan jumlah core fisik/logis dan beban sistem.
GPU / GPU4PySCF	Akselerasi bila tersedia	Tidak semua operasi mendapat keuntungan yang sama.
Memory MB	Batas memori	Jangan melebihi RAM efektif sistem.
Density fitting / RI	Aproksimasi untuk mempercepat perhitungan	Validasi kecocokan dengan metode.
Cube grid	Resolusi file MEP/HOMO/LUMO	Grid tinggi memperbesar file dan waktu.

6.3 Menjalankan, memantau, dan menghentikan

Job dijalankan di worker terpisah agar antarmuka tetap responsif. Aplikasi menampilkan status dan progress log. Tombol Stop tidak mematikan proses secara acak; penghentian dilakukan pada checkpoint aman untuk SCF/optimasi dan proses eksternal dapat diterminasi. Hasil molekul yang sudah selesai tetap disimpan

walaupun run dihentikan. Perilaku ini penting untuk eksperimen multi-molekul karena data parsial tidak otomatis hilang.

Ketika job selesai, antarmuka harus kembali aktif dan ringkasan hasil tampil. Pusat Hasil memungkinkan pengguna berpindah dari mode monitoring ke riwayat tanpa kehilangan run lama. Dalam praktik laboratorium, sebaiknya salin atau arsipkan folder run setelah milestone penting, terutama sebelum memperbarui versi aplikasi atau mengubah dependensi besar.

BAB 7. MEMBACA ENERGI, ORBITAL, DIPOL, DAN MUATAN

7.1 Energi final dan energi relatif

Energi total paling berguna ketika dibandingkan antar-struktur yang dihitung dengan definisi metode dan basis yang konsisten. Energi absolut dari dua metode berbeda tidak boleh dibandingkan sebagai ukuran stabilitas langsung. Untuk konformer, gunakan energi relatif terhadap struktur terendah pada level teori yang sama. Untuk reaksi, pastikan komposisi atom seimbang dan pertimbangkan koreksi termokimia bila yang dicari adalah entalpi atau energi bebas.

7.2 HOMO, LUMO, dan gap

HOMO adalah orbital terisi tertinggi dan LUMO adalah orbital kosong terendah pada representasi orbital yang digunakan. Aplikasi menampilkan tabel orbital dan dapat membangun cube frontier orbital untuk PySCF. Visualisasi warna dua fase orbital tidak berarti muatan positif dan negatif; warna menunjukkan tanda/fase fungsi gelombang. Kesalahan interpretasi fase sebagai peta muatan merupakan salah satu miskonsepsi yang perlu dihindari.

Gap orbital dihitung dalam eV. Nilai yang lebih kecil sering dikaitkan secara kualitatif dengan kemudahan eksitasi atau polarizabilitas yang lebih besar, tetapi hubungan tersebut bukan hukum universal. Untuk spektrum UV-Vis, gunakan metode eksitasi yang memang menghitung keadaan tereksitasi, bukan hanya mengubah gap Kohn–Sham menjadi panjang gelombang tanpa justifikasi.

7.3 Momen dipol dan distribusi muatan

Aplikasi menampilkan vektor dan besar momen dipol bila backend menyediakan. Dipol bergantung pada distribusi muatan dan geometri, sehingga perubahan konformer dapat mengubah nilainya walaupun rumus molekul sama. Muatan Mulliken berguna untuk melihat tren internal dalam satu protokol, tetapi sensitif terhadap basis set dan definisi populasi. Jangan memperlakukan muatan atom sebagai observable tunggal yang bebas model.

7.4 MEP dan cube

File cube kerapatan, MEP, HOMO, dan LUMO dapat digunakan untuk visualisasi tiga dimensi. MEP membantu mengidentifikasi daerah relatif kaya atau miskin potensial elektrostatik dan sering dipakai untuk membahas donor/akseptor interaksi. Namun interpretasi harus mempertimbangkan permukaan tempat MEP dipetakan, konformasi, serta level teori.

BAB 8. GEOMETRI, OPTIMASI, FREKUENSI, DAN TERMOKIMIA

8.1 Tabel geometri lengkap

Aplikasi menghitung semua panjang ikatan berdasarkan konektivitas, sudut untuk pasangan tetangga di sekitar atom pusat, serta dihedral unik di sekitar ikatan. Data ini disimpan sebagai CSV sehingga pengguna dapat melakukan analisis statistik, membandingkan metode, atau menyusun tabel skripsi tanpa menyalin angka dari layar. Struktur akhir juga diekspor sebagai XYZ, MOL, SDF, dan PDB.

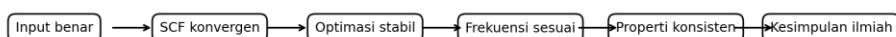
8.2 Sejarah optimasi

Optimasi adalah lintasan menuju titik stasioner pada permukaan energi potensial. Aplikasi menyimpan sejarah energi dan, bila tersedia, geometri pada langkah optimasi. Jangan hanya melihat energi akhir; pola penurunan energi, perubahan gradien, dan kemungkinan osilasi dapat memberikan petunjuk tentang kualitas geometri awal atau masalah optimizer.

8.3 Frekuensi dan sifat titik stasioner

Analisis frekuensi harmonik dipakai untuk mengkarakterisasi geometri. Minimum lokal idealnya tidak memiliki frekuensi imajiner yang bermakna. Transition state orde pertama idealnya memiliki tepat satu mode imajiner signifikan, dan mode tersebut harus mengikuti koordinat reaksi yang diharapkan. Untuk mekanisme, IRC dapat digunakan untuk memeriksa apakah TS menghubungkan dua minimum yang relevan.

Hierarki Validasi Hasil



Gambar 3. Urutan validasi dari input sampai kesimpulan ilmiah.

8.4 Termokimia

Add-on Thermodynamics menyajikan besaran termokimia berdasarkan data vibrasi dan parameter yang tersedia. Suhu default dalam kode adalah 298,15 K dan tekanan 101325 Pa, tetapi antarmuka memungkinkan perubahan. Nilai entalpi dan energi bebas hanya bermakna bila model frekuensi dan kondisi yang digunakan sesuai dengan tujuan. Mode frekuensi sangat rendah dapat memberi kontribusi entropi yang sensitif, terutama untuk molekul fleksibel.

BAB 9. ADD-ON SPEKTROSKOPI DAN DESKRIPTOR QSAR/QSPR

9.1 Pilihan Add-On

Tabel 9. Add-On yang terdapat pada versi 2.5.1.

Add-On	Tujuan pembelajaran/analisis	Catatan
IR	Mengaitkan frekuensi dengan intensitas vibrasi	Memerlukan job/metode yang mendukung turunan yang diperlukan.
Thermodynamics	Koreksi termal, entalpi, energi bebas	Bergantung pada frekuensi dan kondisi T/P.
UV-Vis	Keadaan tereksitasi dan transisi	Jumlah excited states dapat diatur.
NMR	Shielding/parameter NMR melalui jalur yang tersedia	Kemampuan bergantung backend.
Raman	Aktivitas Raman melalui ORCA add-on	Memerlukan ORCA untuk jalur ini.
ΔH_f (g3mp2)	Jalur komputasi G3MP2 tertentu	Biaya tinggi dan dukungan harus diperiksa.
NBO (def2-tzpp)	Analisis NBO melalui backend yang tersedia	Jangan mengklaim NBO bila program eksternal tidak benar-benar menghasilkan data.

9.2 Deskriptor 2D/3D dan konseptual-DFT

Aplikasi menggabungkan descriptor RDKit dengan properti QM. Descriptor struktur seperti massa molekul, logP, luas permukaan polar topologis, donor/akseptor ikatan hidrogen, dan ukuran molekul dapat digabung dengan gap, dipol, dan besaran elektronik. Kombinasi ini dapat menjadi bahan eksplorasi QSAR/QSPR, tetapi model prediktif memerlukan dataset, validasi, pemisahan train/test, dan evaluasi statistik yang tidak otomatis diselesaikan hanya dengan menghitung descriptor.

Descriptor konseptual-DFT yang diturunkan dari energi orbital harus diperlakukan sebagai aproksimasi. Ketika dipakai untuk membandingkan seri molekul, gunakan protokol yang sama dan nyatakan definisi matematisnya. Hindari menghubungkan satu descriptor ke aktivitas biologis tanpa model, data eksperimen, atau mekanisme yang mendukung.

BAB 10. PUSAT HASIL, FILE OUTPUT, DAN REPRODUKSIBILITAS

10.1 Struktur Pusat Hasil

Pusat Hasil membagi informasi menjadi ringkasan, hasil per molekul, energi/metode, elektronik, geometri/optimasi, frekuensi/termokimia, add-on, QSAR/QSPR, file output, log, dan provenance. Pembagian ini mengurangi kebutuhan membuka puluhan file manual, tetapi file mentah tetap dipertahankan sebagai sumber audit.



Gambar 4. Kategori informasi di Pusat Hasil Pekerjaan.

10.2 File yang disimpan per molekul

Tabel 10. Keluaran utama yang ditulis aplikasi.

Pola file	Isi
*_final.xyz	Koordinat final tanpa tabel ikatan eksplisit
*_final.mol	Struktur final dengan konektivitas
*_final.sdf	Struktur final SDF
*_final.pdb	Struktur final PDB
*_coordinates.csv	Koordinat atom
*_orbitals.csv	Energi dan okupansi orbital bila tersedia
*_mulliken.csv	Muatan Mulliken
*_frequencies.csv	Mode vibrasi
*_all_bond_lengths.csv	Semua panjang ikatan
*_all_bond_angles.csv	Semua sudut
*_all_dihedral_angles.csv	Semua dihedral unik
*_optimization_geometry_energies.csv	Geometri + energi per langkah
*_optimization_energy_history.csv	Riwayat energi optimasi
*_qsar_qspr_descriptors.csv	Deskriptor QSAR/QSPR
*_addon_results.csv	Hasil add-on
*_thermochemistry.csv	Termokimia
*_result.json	Ringkasan hasil terstruktur
summary.log	Ringkasan run dan error

10.3 Membaca summary.log dengan benar

Summary.log mencatat waktu, proyek, backend, metode, basis, job, optimizer, add-on, toleransi SCF, thread, status GPU, dan apakah run dihentikan. Untuk setiap molekul disimpan formula, identifier, energi, gap, dipol, RMS gradien, dan jumlah mode frekuensi. Jika terjadi error, bagian ERRORS mencatat molekul dan pesan kegagalannya. File ini berguna sebagai indeks cepat, tetapi analisis rinci tetap harus kembali ke result JSON, CSV, dan log backend.

Peringatan MOPAC — Dalam summary.log aplikasi membedakan “Final heat of formation” dari “total electronic energy”. Jangan mencampur panas pembentukan MOPAC dengan energi elektronik total dari PySCF atau backend lain.

BAB 11. ANALISIS CHATGPT TERINTEGRASI

11.1 Prinsip bundle otomatis

Versi 2.5.1 mengintegrasikan alur logchatgpt secara read-only. Pengguna memilih satu folder run; aplikasi memindai file yang relevan secara otomatis dan menyusun digest untuk analisis. Dengan pendekatan ini, pengguna tidak perlu mengunggah summary.log, result JSON, CSV orbital, dan file lain satu per satu. Hal ini mengurangi risiko memilih file dari run yang berbeda.

11.2 Batas penggunaan AI untuk interpretasi

AI sebaiknya dipakai sebagai alat bantu analisis, bukan pengganti data. Prompt master aplikasi menekankan penggunaan angka, parameter, struktur, log, tabel, dan gambar yang benar-benar tersedia. Klaim spesifik harus dapat ditelusuri ke bundle. Bila frekuensi tidak dihitung, misalnya, AI tidak boleh menyimpulkan geometri pasti minimum hanya dari energi optimasi. Bila data cube tidak tersedia, distribusi orbital tiga dimensi tidak boleh direka dari nama molekul.

Cara paling produktif adalah meminta AI membedakan fakta data, interpretasi teoritis, keterbatasan, dan saran verifikasi. Untuk artikel atau skripsi, hasil AI masih harus ditinjau oleh peneliti, dibandingkan dengan literatur, dan disesuaikan dengan hipotesis penelitian. Angka akhir harus selalu diambil dari file hasil, bukan dari ingatan percakapan.

11.3 Checklist sebelum mengirim analisis

- Pastikan folder run yang dipilih benar.
- Periksa nama molekul, metode, basis, charge, multiplicity, dan job.
- Pastikan status SCF/optimasi/frekuensi terbaca.
- Bedakan data output dari inferensi teori.
- Jangan menggabungkan hasil dari level teori berbeda tanpa menyatakannya.
- Simpan prompt dan hasil analisis bila digunakan dalam dokumentasi riset.

BAB 12. RESEARCH COMPLETE DAN WORKFLOW RISET LANJUTAN

12.1 Doctor backend dan prinsip tidak ada fallback diam-diam

Research Complete memulai dari pemeriksaan backend. Status DFTB+, Psi4 CLI/Python, OpenMM, dan paket terkait ditampilkan sehingga pengguna mengetahui apa yang benar-benar tersedia. Source code secara eksplisit memperingatkan bahwa engine eksternal hanya dijalankan bila tersedia, dan parameter DFTB atau force field tidak diunduh atau diganti otomatis. Ini merupakan prinsip reproducibility yang penting: hasil harus berasal dari konfigurasi yang diketahui, bukan dari fallback tersembunyi.



Gambar 5. Komponen utama Research Complete.

12.2 Ensemble konformer

Fungsi ensemble membangkitkan beberapa konformer dengan RDKit, menyaring kemiripan berdasarkan RMS, mengoptimasi dengan force field bila memungkinkan, lalu menyimpan SDF dan ranking. Tahap ini berguna untuk molekul fleksibel seperti glisina atau ibuprofen. Konformer terpilih dapat diperingkat lagi dengan xTB dan beberapa kandidat terbaik dibawa ke DFT untuk mengurangi risiko terjebak pada satu minimum lokal.

12.3 DFTB+ dan parameter Slater–Koster

DFTB+ menggunakan parameter Slater–Koster. Aplikasi meminta direktori parameter secara eksplisit dan tidak mengarang parameter yang hilang. DFTB3 mengaktifkan term third-order tertentu, tetapi validitas tetap ditentukan oleh set parameter yang dipakai. Karena itu, laporan penelitian harus mencantumkan nama dan versi parameter, bukan hanya menulis “menggunakan DFTB+”.

12.4 Psi4: solvasi, TS, IRC, BSSE, dan SAPT

Adapter Psi4 dapat membangun job standard, transition state, IRC, counterpoise BSSE, dan SAPT0. Pada TS, tepat satu frekuensi imajiner bermakna merupakan kriteria awal, tetapi bentuk mode harus diperiksa. IRC diperlukan bila tujuan

penelitian adalah menunjukkan konektivitas mekanistik. Counterpoise membantu memperkirakan basis-set superposition error untuk interaksi, sedangkan SAPT membagi interaksi menjadi komponen fisik pada formulasi yang sesuai.

12.5 OpenMM

OpenMM pada Research Complete tidak membuat parameter force field secara diam-diam. Pengguna harus menyediakan PDB dan System XML yang sudah diparameterisasi. Setelah memeriksa jumlah partikel, aplikasi membuat integrator Langevin, melakukan minimisasi, menetapkan kecepatan, menjalankan langkah MD, menyimpan trajectory DCD, log CSV, final PDB, dan summary JSON. Dengan desain ini, tahap parameterisasi dipisahkan jelas dari tahap dinamika.

12.6 Scientific Gate

Scientific Gate membantu mengklasifikasikan geometri berdasarkan frekuensi. Namun gate bukan pengganti inspeksi mode normal. Frekuensi kecil dekat nol dapat berasal dari rotasi internal atau efek numerik, sedangkan satu frekuensi negatif besar dapat menunjukkan TS bila modenya sesuai koordinat reaksi. Selalu lihat gerakan atom pada mode kritis bila mekanisme menjadi kesimpulan utama.

BAB 13. INPUT TXT/GAUSSIAN-LIKE DAN OTOMASI PENGATURAN

13.1 Tujuan format input TXT

Input TXT memungkinkan satu file menyimpan struktur dan hampir seluruh pengaturan job: proyek, backend, metode, basis, CPU, memori, optimizer, add-on, toleransi SCF, grid, batas optimasi, cube, seed, pre-optimasi, density fitting, GPU, pengaturan DFTB+, dan workflow Psi4. Format ini memudahkan reproduksi kelas praktikum atau membagikan protokol tanpa meminta pengguna mengatur sidebar secara manual.

13.2 Template satu molekul

```
%project=Water_Opt_Freq
%program=PySCF
%nprocshared=4
%mem=4000MB
%optimizer=geomeTRIC melalui PySCF
%addon=IR
%scf_conv_tol=1e-9
%grid_level=3
%max_opt_steps=100
%max_scf_cycle=120
%cube_grid=60
%seed=20260820
%preopt=false
%density_fitting=false
%gpu=false
# B3LYP/def2-SVP Opt Freq
```

Optimasi dan frekuensi molekul air

```
0 1
O 0.000000 0.000000 0.000000
H 0.758600 0.000000 0.504300
H -0.758600 0.000000 0.504300
```

Baris direktif yang diawali tanda persen mengatur parameter aplikasi. Route line yang diawali # menyerupai gaya Gaussian dan diparsing untuk metode, basis, dan job. Setelah judul/komentar, baris “0 1” berarti charge 0 dan multiplicity 1.

Koordinat Cartesian mengikuti. Aplikasi memvalidasi program, metode, basis, angka, dan beberapa rentang parameter sebelum menerapkannya ke session state.

13.3 Template multi-molekul

Format multi-molekul memakai blok [MOLECULE], nama, format, charge, multiplicity, dan data. Ini berguna untuk kelas atau screening beberapa molekul dengan protokol yang sama. Walaupun pengaturan global dapat diterapkan bersama, charge dan multiplicity setiap molekul tetap harus diperiksa karena spesies berbeda tidak selalu memiliki keadaan elektronik yang sama.

BAB 14. DUA PULUH CONTOH RISET DALAM APLIKASI

Menu “20 Contoh Riset” berfungsi sebagai jembatan antara fitur perangkat lunak dan rancangan pertanyaan ilmiah. Setiap contoh berisi tujuan, molekul, charge, multiplicity, engine, job, metode, basis, setelan, dan fokus analisis. Contoh bukan resep final untuk publikasi; source code sendiri mengingatkan bahwa parameter akhir harus disesuaikan dengan hipotesis, ukuran sistem, sumber daya, dan kebutuhan akurasi.

01. Optimasi Geometri dan Ikatan O–H pada Air

Menentukan geometri minimum H₂O, panjang ikatan O–H, sudut H–O–H, energi total, dan momen dipol.

Tabel contoh 01. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Water / Air
SMILES	O
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi geometri + frekuensi
Metode	DFT/B3LYP
Basis	def2-SVP
Pengaturan	geomeTRIC; convergence ketat; frekuensi pada geometri hasil optimasi; fase gas.
Analisis yang disarankan	Pastikan tidak ada frekuensi imajiner; ukur dua O–H dan sudut H–O–H; bandingkan energi, dipol, dan muatan Mulliken.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembanding, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

02. Struktur Elektronik Amonia dan Momen Dipol

Mengkaji geometri piramidal NH₃, energi HOMO/LUMO, gap orbital, distribusi muatan, dan momen dipol.

Tabel contoh 02. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Ammonia / Amonia
SMILES	N

Komponen	Isi
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + single-point
Metode	DFT/PBE0
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi def2-SVP dapat dipakai sebagai pra-tahap; single-point final PBE0/def2-TZVP.
Analisis yang disarankan	Analisis sudut H–N–H, HOMO/LUMO, gap, dipole vector, Mulliken charge dan MEP.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

03. Energi dan Simetri Molekul Metana

Menguji kestabilan geometri tetrahedral CH₄ dan konsistensi panjang ikatan C–H serta vibrasi fundamental.

Tabel contoh 03. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Methane / Metana
SMILES	C
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + frekuensi
Metode	HF
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi penuh; frekuensi harmonik; fase gas.
Analisis yang disarankan	Periksa kesetaraan empat C–H, tidak ada frekuensi imajiner, mode vibrasi, dan energi elektronik.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

04. Vibrasi Regang CO₂ dan Karakter Molekul Linear

Menganalisis geometri linear CO₂ serta mode vibrasi regang simetris, regang asimetris, dan tekuk.

Tabel contoh 04. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Carbon dioxide / Karbon dioksida
SMILES	O=C=O
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + frekuensi/IR
Metode	DFT/B3LYP
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi penuh dan perhitungan Hessian/frekuensi pada minimum.
Analisis yang disarankan	Identifikasi geometri O=C=O mendekati 180°, frekuensi vibrasi, intensitas IR, dan momen dipol mendekati nol.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembanding, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

05. Gugus Karbonil Formaldehida: MEP dan HOMO–LUMO

Memetakan polaritas gugus C=O pada formaldehida dan menghubungkannya dengan orbital frontier.

Tabel contoh 05. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Formaldehyde / Metanal
SMILES	C=O
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + properti elektronik
Metode	DFT/CAM-B3LYP
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi awal B3LYP/def2-SVP; single-point CAM-B3LYP/def2-TZVP.
Analisis yang disarankan	Visualisasikan MEP, HOMO, LUMO, gap, dipol; hubungkan daerah elektrofilik/nukleofilik dengan gugus karbonil.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

06. Ikatan Hidrogen dan Polaritas Metanol

Menentukan geometri minimum metanol dan karakter polar gugus hidroksil.

Tabel contoh 06. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Methanol / Metanol
SMILES	CO
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + frekuensi
Metode	DFT/M06-2X
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Fase gas; optimasi ketat; frekuensi untuk validasi minimum.
Analisis yang disarankan	Analisis panjang C–O/O–H, vibrasi O–H, momen dipol, MEP dan muatan atom.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

07. Konformer Etanol: Anti dan Gauche

Membandingkan konformer etanol dan menentukan struktur dengan energi relatif terendah.

Tabel contoh 07. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Ethanol / Etanol
SMILES	CCO
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	Research Complete: Conformer + PySCF
Job	Ensemble konformer → optimasi QM
Metode	DFT/B3LYP
Basis	def2-TZVP

Komponen	Isi
Pengaturan	Bangkitkan ensemble ETKDG; pra-optimalisasi MMFF94s; optimasi kandidat rendah energi B3LYP/def2-SVP; SP def2-TZVP.
Analisis yang disarankan	Bandingkan energi relatif, dihedral H/C–C–O/H, populasi konformer dan perubahan dipol.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

08. Spektrum IR Aseton dan Karakter C=O

Mengidentifikasi pita vibrasi utama asetona, khususnya regangan karbonil.

Tabel contoh 08. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Acetone / Propanon
SMILES	<chem>CC(=O)C</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + IR
Metode	DFT/B3LYP
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi def2-SVP; frekuensi/IR pada geometri minimum; scaling frekuensi diterapkan hanya saat membandingkan eksperimen.
Analisis yang disarankan	Identifikasi mode C=O, C–H dan C–C; cek frekuensi imajiner; korelasikan dengan distribusi muatan dan dipol.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

09. Asam Asetat: Konformasi dan Distribusi Muatan

Menganalisis struktur gugus karboksilat netral dan pengaruh konformasi terhadap energi serta MEP.

Tabel contoh 09. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Acetic acid / Asam asetat
SMILES	<chem>CC(=O)O</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + MEP
Metode	DFT/ ω B97X-D
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Pra-optimasi MMFF94s; optimasi QM; single-point basis lebih besar bila diperlukan.
Analisis yang disarankan	Bandingkan panjang C=O/C–O, orientasi O–H, MEP, dipol, HOMO/LUMO dan muatan Mulliken.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

10. Benzena: Delokalisasi π dan Orbital Frontier

Mengamati delokalisasi elektron π , degenerasi orbital, dan kestabilan geometri aromatik benzena.

Tabel contoh 10. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Benzene / Benzena
SMILES	<chem>c1ccccc1</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + HOMO/LUMO
Metode	DFT/PBE0
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi penuh; grid DFT memadai; cube HOMO dan LUMO.
Analisis yang disarankan	Ukur kesetaraan ikatan C–C, visualisasikan orbital π , hitung gap HOMO–LUMO dan momen dipol.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas.

Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

11. Fenol: Pengaruh Gugus –OH pada Cincin Aromatik

Menilai perubahan distribusi elektron benzena setelah substitusi hidroksil.

Tabel contoh 11. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Phenol / Fenol
SMILES	<chem>Oc1ccccc1</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + MEP/HOMO-LUMO
Metode	DFT/M06-2X
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi def2-SVP; single-point def2-TZVP; cube MEP/HOMO/LUMO.
Analisis yang disarankan	Analisis polaritas O–H, redistribusi muatan cincin, MEP, orbital frontier dan dipol.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

12. Anilina: Donasi Pasangan Elektron N ke Sistem Aromatik

Menganalisis konjugasi gugus amino dengan cincin benzena dan dampaknya pada orbital frontier.

Tabel contoh 12. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Aniline / Anilina
SMILES	<chem>Nc1ccccc1</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + properti elektronik
Metode	DFT/PBE0
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi penuh; cube HOMO/LUMO; MEP dan Mulliken charge.
Analisis yang disarankan	Amati keterlibatan pasangan elektron N pada HOMO, planarisasi gugus amino, gap, dipol dan MEP.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

13. Piridina: Basa Aromatik dan Pusat Akseptor

Mengidentifikasi karakter atom N piridina sebagai pusat basa/akseptor melalui MEP dan orbital frontier.

Tabel contoh 13. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Pyridine / Piridina
SMILES	<chem>n1cccc1</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + MEP
Metode	DFT/B3LYP
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi dan single-point pada minimum; cube MEP/HOMO/LUMO.
Analisis yang disarankan	Petakan potensial elektrostatik di N, muatan atom, dipol dan karakter HOMO/LUMO.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

14. Glisina: Pencarian Konformer Molekul Asam Amino

Mencari beberapa konformer glisina fase gas dan menentukan kandidat minimum global.

Tabel contoh 14. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Glycine / Glisina
SMILES	<chem>NCC(=O)O</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	Research Complete: Conformer + xTB + PySCF
Job	Conformer ensemble → ranking → optimasi DFT
Metode	GFN2-xTB → DFT/ωB97X-D

Komponen	Isi
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	ETKDG multi-konformer; ranking GFN2-xTB; optimasi beberapa kandidat terbaik dengan def2-SVP; SP def2-TZVP.
Analisis yang disarankan	Bandingkan energi relatif, pola ikatan H intramolekul, dihedral, dipol dan validasi frekuensi.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

15. Alanina: Konformasi dan Stereokimia

Mengkaji kestabilan konformer L-alanina dan mempertahankan pusat kiral selama optimasi.

Tabel contoh 15. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	L-Alanine / L-Alanina
SMILES	<chem>N[C@@H](C)C(=O)O</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	Research Complete: xTB + PySCF
Job	Pencarian konformer + optimasi
Metode	GFN2-xTB → DFT/M06-2X
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Gunakan stereokimia SMILES; ranking xTB; optimasi QM kandidat terbaik; frekuensi akhir.
Analisis yang disarankan	Periksa pusat kiral, energi relatif konformer, ikatan H intramolekul, dipol, dan semua frekuensi nyata.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

16. Aspirin: MEP, HOMO–LUMO, dan Situs Reaktivitas

Mengidentifikasi daerah kaya/miskin elektron aspirin dan situs yang berpotensi berinteraksi dengan lingkungan.

Tabel contoh 16. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Aspirin / Acetylsalicylic acid
SMILES	<chem>CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)O</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + MEP/HOMO-LUMO
Metode	DFT/ ω B97X-D
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Pra-optimasi MMFF94s; optimasi def2-SVP; SP def2-TZVP; cube MEP/HOMO/LUMO.
Analisis yang disarankan	Interpretasi MEP pada atom O, distribusi orbital frontier, gap, dipol, geometri gugus ester dan asam karboksilat.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

17. Kafeina: Descriptor Elektronik dan QSAR/QSPR

Menggabungkan descriptor molekuler klasik dengan descriptor elektronik QM untuk profil kafeina.

Tabel contoh 17. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Caffeine / Kafeina
SMILES	<chem>CN1C(=O)N(C)c2ncn(C)c2C1=O</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF + QSAR/QSPR
Job	Optimasi + descriptor
Metode	DFT/B3LYP
Basis	def2-SVP
Pengaturan	Optimasi struktur; hitung energi, gap, dipol, MEP; jalankan descriptor QSAR/QSPR yang tersedia.
Analisis yang disarankan	Gabungkan MW/logP/TPSA dan descriptor struktur dengan gap HOMO–LUMO, dipol, MEP serta muatan atom.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas.

Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

18. Ibuprofen: Ensemble Konformer dan Energi Relatif

Menyaring fleksibilitas konformasi ibuprofen dan memilih struktur representatif untuk studi lanjutan.

Tabel contoh 18. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Ibuprofen
SMILES	<chem>CC(C)Cc1ccc(cc1)[C@@H](C)C(=O)O</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	Research Complete: Conformer + xTB
Job	Ensemble konformer + ranking
Metode	GFN2-xTB → DFT/B3LYP
Basis	def2-SVP
Pengaturan	Bangkitkan banyak konformer; cluster RMSD; ranking xTB; optimasi QM pada subset energi rendah.
Analisis yang disarankan	Plot/urutkan energi relatif, RMSD, dihedral fleksibel, dipol, dan pilih beberapa konformer representatif.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

19. Parasetamol: Pola Donor/Akseptor Ikatan Hidrogen

Memetakan gugus donor dan akseptor parasetamol serta distribusi potensial elektrostatiknya.

Tabel contoh 19. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Paracetamol / Acetaminophen
SMILES	<chem>CC(=O)NC1=CC=C(O)C=C1</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + MEP + frekuensi
Metode	DFT/M06-2X
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Optimasi def2-SVP; frekuensi untuk validasi; SP/MEP def2-TZVP.
Analisis yang disarankan	Identifikasi donor/akseptor H-bond dari MEP dan geometri, cek vibrasi O-H/N-H/C=O, dipol dan orbital frontier.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

20. Urea: Resonansi, Planaritas, dan Ikatan C–N

Mengkaji pengaruh resonansi pada planaritas urea dan karakter parsial ikatan rangkap C–N.

Tabel contoh 20. Rancangan parameter.

Komponen	Isi
Molekul	Urea
SMILES	<chem>NC(=O)N</chem>
Charge / Multiplicity	0 / 1
Engine	PySCF
Job	Optimasi + frekuensi + NBO bila backend tersedia
Metode	MP2
Basis	def2-TZVP
Pengaturan	Pra-optimasi B3LYP/def2-SVP; single-point MP2/def2-TZVP; frekuensi pada level DFT untuk validasi minimum.
Analisis yang disarankan	Ukur C=O dan dua C–N, periksa planaritas, muatan, dipol, frekuensi dan delokalisasi bila analisis NBO tersedia.

Cara mengembangkan contoh ini menjadi penelitian adalah menetapkan hipotesis yang dapat diuji, menentukan pembandingan, memilih level teori konsisten, melakukan validasi minimum/TS bila relevan, menyimpan seluruh log, dan menghubungkan descriptor yang dihitung dengan pertanyaan kimia yang jelas. Jangan menambah properti ke pembahasan bila properti tersebut tidak benar-benar dihitung.

BAB 15. TUTORIAL PRAKTIS BERTAHAP

15.1 Tutorial pertama: H₂O

Pilih Water

Gunakan preset Water atau tulis Water=O pada SMILES.

Program QM

Pilih PySCF.

Job

Mulai dengan Geometry Optimization; setelah stabil lanjutkan Geometry Optimization + Frequency.

Metode/basis

Gunakan B3LYP/STO-3G untuk uji cepat, kemudian B3LYP/def2-SVP untuk latihan yang lebih representatif.

Charge/multiplicity

0 dan 1.

Sumber daya

1–2 thread dan memori 1000–2000 MB biasanya cukup untuk latihan ringan.

Jalankan

Pantau log sampai status selesai.

Validasi

Periksa energi, gradien, geometri, dan bila frekuensi dihitung pastikan tidak ada mode imajiner bermakna.

Analisis

Ukur dua O–H, sudut H–O–H, dipol, orbital frontier, dan muatan.

Ekspor

Simpan CSV, struktur final, result JSON, dan ZIP run.

15.2 Tutorial kedua: piridina

Piridina merupakan contoh baik untuk menghubungkan struktur aromatik, heteroatom, MEP, muatan, dan orbital frontier. Gunakan preset Pyridine, charge 0, multiplicity 1, job optimasi, B3LYP atau PBE0 dengan def2-SVP/def2-TZVP sesuai sumber daya. Setelah optimasi, periksa planarisasi cincin, panjang ikatan, dipol, muatan pada N, dan distribusi MEP. Jika cube HOMO/LUMO dibuat, identifikasi kontribusi orbital pada N tanpa menganggap warna fase sebagai muatan.

15.3 Tutorial ketiga: glisina dan konformer

Untuk glisina, satu konformer awal dapat bias. Gunakan Research Complete untuk membangkitkan ensemble, lakukan ranking awal dengan force field atau xTB, lalu pilih beberapa struktur energi rendah untuk DFT. Setelah optimasi, lakukan frekuensi. Bandingkan energi relatif, dihedral, kemungkinan ikatan hidrogen intramolekul, dan momen dipol. Kesimpulan minimum global harus hati-hati karena ruang konformasi dapat lebih luas dari sampel yang dibuat.

15.4 Tutorial keempat: aspirin atau parasetamol

Molekul obat berukuran menengah memberi latihan tentang biaya basis, fleksibilitas, MEP, dan donor/akseptor ikatan hidrogen. Mulai dengan pre-optimasi MMFF94, optimasi DFT basis menengah, lalu bila perlu single-point basis lebih besar. Catat waktu komputasi dan ukuran file cube sebagai bagian pembelajaran tentang trade-off akurasi dan biaya.

BAB 16. TROUBLESHOOTING, VALIDASI, DAN PRAKTIK BAIK

16.1 Backend tidak ditemukan

Pesan executable tidak tersedia berarti antarmuka mengetahui backend tetapi sistem operasi tidak menemukannya pada PATH. Solusinya bukan mengubah hasil atau memilih metode lain diam-diam. Instal backend sesuai dokumentasi resminya, pastikan lisensi dan path benar, lalu ulangi pemeriksaan status. Untuk DFTB+, selain executable, direktori Slater–Koster harus benar.

16.2 SCF tidak konvergen

Periksa charge/multiplicity, struktur awal, jarak atom yang tidak wajar, keadaan spin, basis, dan opsi density fitting. Tingkatkan max cycle hanya bila ada indikasi iterasi sebenarnya menuju konvergensi. Untuk kasus sulit, bandingkan dengan metode lebih sederhana untuk memperoleh geometri awal. Jangan melaporkan properti akhir dari SCF yang gagal konvergen sebagai hasil final.

16.3 Optimasi tidak selesai

Optimasi dapat gagal karena geometri awal sangat buruk, permukaan energi datar, optimizer tidak cocok, SCF tidak stabil, atau batas langkah terlalu kecil. Tinjau sejarah energi dan gradien. Jika energi berosilasi, pertimbangkan pre-optimasi atau optimizer lain. Jika molekul fleksibel, pertimbangkan pencarian konformer sebelum optimasi QM.

16.4 Frekuensi imajiner

Frekuensi negatif kecil dapat berasal dari mode lunak atau noise numerik. Frekuensi negatif besar pada struktur yang diharapkan minimum memerlukan inspeksi geometri dan mode; struktur mungkin berada pada saddle point. Untuk TS, satu mode imajiner saja belum cukup—gerakan atom harus sesuai koordinat reaksi dan idealnya IRC memverifikasi konektivitas.

16.5 Checklist sebelum membuat kesimpulan

1. Identitas molekul benar dan stereokimia dipertahankan.
2. Charge dan multiplicity sesuai spesies.
3. Backend/metode/basis tercatat.
4. SCF konvergen.
5. Optimasi mencapai kriteria.
6. Frekuensi mendukung jenis titik stasioner.
7. Energi yang dibandingkan memiliki definisi sama.
8. Properti yang dibahas benar-benar tersedia di output.
9. Log dan file mentah tersimpan.
10. Keterbatasan metode dinyatakan.

BAB 17. LATIHAN, PEMBAHASAN, DAN PENGEMBANGAN

17.1 Dua puluh soal latihan

Soal 1

Mengapa hasil B3LYP/def2-SVP tidak boleh dibandingkan langsung dengan energi absolut PM7 untuk menyimpulkan molekul mana lebih stabil?

Pembahasan: Karena kedua angka berasal dari Hamiltonian dan definisi energi berbeda. Perbandingan stabilitas harus menggunakan protokol konsisten untuk sistem yang sebanding, atau membandingkan besaran yang memang didefinisikan sama.

Soal 2

Apa fungsi charge dan multiplicity?

Pembahasan: Charge menetapkan muatan total; multiplicity = $2S+1$ menetapkan keadaan spin. Kesalahan pada keduanya mengubah jumlah elektron atau keadaan elektronik yang dihitung.

Soal 3

Mengapa geometri dari SMILES perlu dibuat 3D?

Pembahasan: SMILES terutama menyimpan konektivitas/stereokimia, bukan koordinat Cartesian lengkap. Backend QM memerlukan posisi atom untuk menghitung integral dan energi.

Soal 4

Apa beda pre-optimasi MMFF94/UFF dan optimasi DFT?

Pembahasan: Pre-optimasi memakai force field klasik untuk memberi struktur awal masuk akal; optimasi DFT mencari titik stasioner pada permukaan energi elektronik level DFT.

Soal 5

Kapan frekuensi perlu dihitung setelah optimasi?

Pembahasan: Saat perlu mengkarakterisasi titik stasioner, memastikan minimum/TS, memperoleh spektrum vibrasi, atau koreksi termokimia.

Soal 6

Apa arti satu frekuensi imajiner pada kandidat TS?

Pembahasan: Ini konsisten dengan saddle point orde pertama, tetapi mode normal harus mengikuti koordinat reaksi dan idealnya diverifikasi dengan IRC.

Soal 7

Mengapa warna merah/biru orbital cube bukan muatan?

Pembahasan: Warna biasanya menunjukkan dua fase/tanda fungsi gelombang orbital. Muatan memerlukan analisis kerapatan/potensial, bukan warna fase orbital.

Soal 8

Apa batas interpretasi gap HOMO–LUMO?

Pembahasan: Gap orbital adalah descriptor model. Ia tidak otomatis sama dengan energi eksitasi optik atau band gap eksperimen.

Soal 9

Mengapa muatan Mulliken harus dibandingkan hati-hati?

Pembahasan: Nilainya bergantung pada basis dan skema partisi populasi, sehingga terutama berguna untuk tren dalam protokol konsisten.

Soal 10

Apa keuntungan menyimpan result JSON selain CSV?

Pembahasan: JSON mempertahankan struktur data dan metadata kompleks sehingga lebih mudah diproses ulang, sedangkan CSV cocok untuk tabel tertentu.

Soal 11

Mengapa summary.log belum cukup sebagai satu-satunya bukti perhitungan?

Pembahasan: Ia ringkasan. Detail konvergensi, tabel lengkap, file struktur, dan log backend diperlukan untuk audit dan interpretasi mendalam.

Soal 12

Kapan xTB berguna sebelum DFT?

Pembahasan: Untuk screening cepat geometri/konformer sehingga hanya kandidat paling relevan dibawa ke level DFT yang lebih mahal.

Soal 13

Mengapa DFTB+ memerlukan set Slater–Koster yang disebutkan eksplisit?

Pembahasan: Parameter menentukan model dan domain validitas. Hasil tidak reproducible jika parameter tidak diketahui.

Soal 14

Apa fungsi BSSE counterpoise?

Pembahasan: Memperkirakan kesalahan superposisi basis pada interaksi fragmen dengan menghitung kontribusi fungsi basis “pinjaman”.

Soal 15

Apa fungsi IRC setelah TS?

Pembahasan: Menelusuri jalur turun dari TS untuk memeriksa keterhubungan ke minimum reaktan/produk yang relevan.

Soal 16

Mengapa OpenMM tidak boleh memakai force field yang dibuat otomatis tanpa diketahui?

Pembahasan: Parameter force field menentukan energi dan dinamika; fallback tak terlihat merusak reproducibility dan dapat menghasilkan model kimia yang salah.

Soal 17

Apa manfaat input TXT/Gaussian-like?

Pembahasan: Menyimpan struktur dan pengaturan komputasi dalam satu file sehingga protokol mudah dibagikan dan diterapkan ulang.

Soal 18

Bagaimana memilih basis untuk uji awal dan produksi?

Pembahasan: Mulai basis ringan untuk memverifikasi alur, lalu gunakan basis yang sesuai tujuan/properti dan uji konvergensi basis bila hasil sensitif.

Soal 19

Apa yang harus diperiksa ketika optimasi berhenti karena batas langkah?

Pembahasan: Sejarah energi/gradien, geometri, SCF, dan tren konvergensi; kemudian putuskan apakah menambah langkah, mengganti optimizer, atau memperbaiki struktur awal.

Soal 20

Mengapa AI tidak boleh menyimpulkan frekuensi nol imajiner jika file frekuensi tidak ada?

Pembahasan: Karena itu klaim data yang tidak didukung. AI harus membedakan hasil yang tersedia dari inferensi dan menyatakan bahwa validasi minimum belum dilakukan.

17.2 Soal pengembangan

- Bandingkan geometri dan dipol H₂O dengan HF, B3LYP, dan PBE0 pada basis yang sama. Jelaskan mana perubahan yang berasal dari metode, bukan basis.
- Lakukan uji basis B3LYP pada NH₃ menggunakan STO-3G, def2-SVP, dan def2-TZVP. Buat tabel energi relatif terhadap basis terbesar dan waktu komputasi.
- Bangkitkan ensemble konformer glisina, pilih lima kandidat, dan rancang protokol dua tahap xTB → DFT untuk mencari minimum rendah.
- Bandingkan MEP benzena, fenol, anilina, dan piridina dengan protokol yang sama. Hubungkan pola dengan substituen secara kualitatif.
- Gunakan aspirin atau parasetamol untuk mempelajari dampak cube grid terhadap ukuran file dan waktu pembuatan visualisasi.
- Rancang eksperimen validasi TS sederhana menggunakan Psi4 workflow TS + frequency + IRC. Tentukan kriteria sukses sebelum menjalankan.
- Susun protokol interaksi dimer kecil dengan counterpoise BSSE. Nyatakan definisi energi interaksi dan semua fragmen.
- Buat satu input TXT multi-molekul untuk H₂O, NH₃, CH₄ dengan metode yang sama dan jelaskan bagaimana charge/multiplicity dipastikan benar.
- Pilih satu descriptor QSAR/QSPR dan satu descriptor elektronik untuk seri molekul aromatik; jelaskan desain dataset yang diperlukan sebelum membangun model prediktif.
- Audit satu folder run lengkap: cek konfigurasi, log, struktur, CSV, JSON, dan summary.log. Tulis laporan reproducibility satu halaman.

GLOSARIUM

- A.** Ab initio — pendekatan struktur elektronik yang dibangun dari prinsip kuantum tanpa parameter empiris utama untuk energi elektronik target.
- B.** Basis set — himpunan fungsi untuk merepresentasikan orbital molekul.
- C.** Conformer — susunan ruang berbeda dari molekul yang sama akibat rotasi ikatan atau fleksibilitas internal.
- D.** DFT — Density Functional Theory, metode berbasis kerapatan elektron.
- E.** Energi elektronik — energi model elektronik pada geometri dan Hamiltonian tertentu.
- F.** Frekuensi imajiner — mode dengan eigenvalue kurvatur negatif yang biasanya ditampilkan sebagai frekuensi negatif.
- G.** Gradien — turunan pertama energi terhadap koordinat; berkaitan dengan gaya pada atom.
- H.** HOMO — Highest Occupied Molecular Orbital.
- I.** IRC — Intrinsic Reaction Coordinate untuk menelusuri jalur dari transition state.
- J.** Job — jenis tugas komputasi seperti single point, optimasi, atau frekuensi.
- K.** Konvergensi — kondisi ketika perubahan numerik telah memenuhi kriteria yang ditetapkan.
- L.** LUMO — Lowest Unoccupied Molecular Orbital.
- M.** MEP — Molecular Electrostatic Potential, potensial elektrostatik di ruang sekitar molekul.
- N.** NBO — Natural Bond Orbital, kerangka analisis orbital/lokalisasi ikatan tertentu.
- O.** Optimasi geometri — pencarian titik stasioner energi dengan mengubah koordinat atom.
- P.** Provenance — rekam asal-usul data: input, metode, versi, parameter, dan proses yang menghasilkan output.
- Q.** QSAR/QSPR — hubungan kuantitatif struktur dengan aktivitas/properti.
- R.** RMS gradient — ukuran akar rata-rata kuadrat komponen gradien.
- S.** SCF — Self-Consistent Field, iterasi menuju kerapatan/orbital yang konsisten.
- T.** Transition state — saddle point orde pertama pada permukaan energi potensial.

U. UHF — Unrestricted Hartree–Fock, formulasi HF dengan orbital spin alfa dan beta berbeda.

V. Vibrasi harmonik — aproksimasi gerak vibrasi di sekitar titik stasioner menggunakan kurvatur lokal.

W. Workflow — urutan langkah komputasi dan validasi yang membentuk satu prosedur penelitian.

X. xTB — keluarga metode tight-binding semiempirik modern untuk komputasi cepat.

Y. Yield data — keluaran numerik/struktur yang dihasilkan sebuah job; istilah ini digunakan di sini sebagai konsep hasil, bukan fitur khusus aplikasi.

Z. Zero-point energy — energi vibrasi kuantum yang tetap ada pada 0 K dalam model harmonik.

LAMPIRAN A. DAFTAR METODE DAN BASIS SET RINGKAS

Aplikasi memuat 20 entri metode PySCF, 2 semiempirik PySCF, 13 metode MOPAC, 3 metode xTB, 10 metode ORCA, dan 29 basis set dalam empat kelompok praktis.

Tabel Lampiran A1. Metode MOPAC.

No.	Metode
1	MNDO
2	AM1
3	PM3
4	RM1
5	MNDOD
6	PM6
7	PM6-D3
8	PM6-DH+
9	PM6-DH2
10	PM6-D3H4
11	PM6-DH2X
12	PM6-D3H4X
13	PM7

Tabel Lampiran A2. Metode xTB.

No.	Metode
1	GFN2-xTB
2	GFN1-xTB
3	GFN0-xTB

Tabel Lampiran A3. Metode ORCA.

No.	Metode
1	HF
2	RHF
3	ROHF
4	UHF
5	B3LYP
6	PBE
7	PBE0
8	BP86
9	M06-2X
10	CAM-B3LYP

LAMPIRAN B. CHECKLIST PELAPORAN PENELITIAN

- Nama dan versi aplikasi QM Komputasi.
- Nama proyek/run dan tanggal.
- Struktur input serta sumbernya.
- Charge dan multiplicity.
- Backend dan versinya bila tersedia.
- Metode elektronik/semiempirik.
- Basis set atau parameterisasi.
- Jenis job dan optimizer.
- Toleransi SCF, grid, batas iterasi.
- CPU/GPU/memori relevan.
- Model pelarut bila ada.
- Kriteria konvergensi optimasi.
- Frekuensi dan jumlah mode imajiner.
- Energi dan jenis energi yang dilaporkan.
- Properti elektronik yang dipakai.
- Konversi satuan dan definisi descriptor.
- File struktur final.
- Log dan error/warning.
- Perbandingan atau validasi metode.
- Keterbatasan dan domain kesimpulan.

DAFTAR PUSTAKA

1. Sun, Q., et al. (2020). Recent developments in the PySCF program package. *Journal of Chemical Physics*, 153, 024109. [Tautan](#)
2. PySCF Developers. PySCF User Guide dan dokumentasi resmi. [Tautan](#)
3. RDKit. Open-source cheminformatics; dokumentasi dan panduan sitasi resmi. [Tautan](#)
4. Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2, 73–78. [Tautan](#)
5. Neese, F. (2025). Software Update: The ORCA Program System—Version 6.0. *WIREs Computational Molecular Science*, 15, e70019. [Tautan](#)
6. Smith, D. G. A., et al. (2020). Psi4 1.4: Open-Source Software for High-Throughput Quantum Chemistry. *Journal of Chemical Physics*, 152. [Tautan](#)
7. Turney, J. M., et al. (2012). Psi4: An open-source ab initio electronic structure program. *WIREs Computational Molecular Science*, 2, 556–565. [Tautan](#)
8. Hourahine, B., et al. DFTB+ documentation and code references; consult the parameter-set references used in each calculation. [Tautan](#)
9. Bannwarth, C., Ehlert, S., Grimme, S. (2019). GFN2-xTB—An Accurate and Broadly Parametrized Self-Consistent Tight-Binding Quantum Chemical Method. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15, 1652–1671. [Tautan](#)
10. Stewart, J. J. P. MOPAC documentation and semiempirical methods. [Tautan](#)
11. Eastman, P., et al. (2023). OpenMM 8: Molecular Dynamics Simulation with Machine Learning Potentials. *Journal of Physical Chemistry B*, 128, 109–116. [Tautan](#)
12. Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J. (2000). *Molecular Electronic-Structure Theory*. Wiley. [Tautan](#)
13. Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry*, 3rd ed. Wiley. [Tautan](#)
14. Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2nd ed. Wiley. [Tautan](#)
15. Source code QM Komputasi V2.5.1 yang disediakan pengguna, 2026.

CATATAN AKHIR

Buku ini menggambarkan kemampuan yang terlihat pada source code QM Komputasi V2.5.1 yang digunakan sebagai bahan penyusunan. Dukungan aktual suatu backend dapat berbeda menurut sistem operasi, versi executable, lisensi, paket Python, dan konfigurasi lingkungan. Untuk penelitian, simpan informasi versi setiap komponen dan dokumentasikan perubahan yang dapat memengaruhi reproduksibilitas.

- KASMUI -
Dosen Kimia, Komputasi, IT, AI UNNES

<https://hisabmu.com/>
<https://kasmui.cloud/>

Ketua PCM Gunungpati 2	Anggota Majelis Tabligh PDM Kota Semarang & PWM Jawa Tengah	Tim Pengembang Software KHGT MTT PP Muhammadiyah	Praktisi Ilmu Falak
---------------------------	---	--	------------------------