

HYPERCHEM

Apa itu Hyperchem?

Hyperchem merupakan salah satu aplikasi kimia komputasi yang relatif mudah untuk digunakan. Aplikasi hyperchem ini bisa menunjukkan tampilan dari apa yang akan kita buat. Tetapi hanya sekelembut tentang kemampuan Hyperchem yang bisa dimanfaatkan dalam pembuatan media belajar yang sederhana namun secara komputasi kimia dibenarkan. Tentu saja kalau semua kita lakukan dengan benar, tidak asal gambar, seperti sebelum menggunakan software layaknya Hyperchem ini.

Cara Menggunakan Hyperchem

Misalnya saja saya akan membuat struktur kimia dari PCl_5 berikut langkah-langkahnya :

1. Buka aplikasi hyperchem, kemudian klik menu build >> default elements >>Pilih P
2. Setelah diklik atom P dan diklikkan pada area kerja, maka akan muncul tampilan seperti dibawah
3. Langkah berikutnya add hydrogen dari menu Build kemudian klik add hydrogen 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.
4. Selanjutnya ubah atom H dengan atom Cl hingga atom H menjadi Cl, dengan cara klik dimenu Build, Default Element (akan muncul semacam table periodic dan pilih Cl), klikkan 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.
5. Lakukan optimasi geometri agar bentuk molekulnya menjadi benar secara kimia komputasi dengan standar hitungan dengan menggunakan salah satu metode, misalnya apabila menggunakan metode Molecular Mechanic. Klik menu Setup pada menu bar. Klik Molecular Mechanic hingga tercentang terus klik ok.
6. Selanjutnya kita lakukan optimasi geomteri terhadap bentuk molekul yang kita buat. Klik menu Compute, KlikGeometry 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).
7. Berikut kalau kita ingin menampilkan hasil dalam berbagai model, seperti yang ditawarkan pada menuDisplay, Rendering, pilih metode rendering yang kita.
8. Berikut tampilan beberapa hasil rendering :

Fasilitas yang disediakan oleh program standar ini adalah: •

1. Input Struktur dan Manipulasi (Structure Input and Manipulation)
2. Display Molekul (Molecular Display)
3. Kimia Komputasi (Computational Chemistry)
4. Metode Komputasi (Computational Methods)

Fungsi Hyperchem :

1. Membuat sketsa dwimatra (2D) molekul dari atom-atom penyusunnya, lalu mengubahnya menjadi model trimatra (3D) dengan HyperChem Model Builder.
2. Memilih residu-residu standar secara berurutan dari perpustakaan asam amino dan

nukleotida HyperChem/Lite untuk membangun protein dan asam nukleat.

3. Membaca tipe atom dan koordinat molekular yang telah disimpan sebagai arsip HIN (masukan HyperChem yang dibuat sebelumnya) atau arsip ENT (mengambil dari sumber lain, yaitu Brookhaven Protein Data Bank/PDB)

4. Menata kembali molekul, misalnya dengan memutar atau menggesernya.

5. Mengubah kondisi tampilan, termasuk penampakan ruang, model molekul, dan label struktural.

6. Merancang dan melakukan perhitungan kimiawi, termasuk dinamika molekular.

Tersedia berbagai metode mekanika molekular maupun mekanika kuantum (semiempiris atau ab initio). Perhitungan mekanika molekular menggunakan medan gaya MM+, AM-BER, BIO+, atau OPLS, sedangkan mekanika kuantum semiempiris meliputi extended Hückel, CNDO, INDO, MINDO3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO/I, dan ZINDO/S.

7. Penetapan efek isotop dalam perhitungan analisis vibrasional untuk metode-metode SCF ab initio dan semiempiris.

8. Membuat grafik Excel dari hasil perhitungan kimiawi.

9. Mensolvasikan molekul dalam kotak periodik.