

TEKNOLOGI INFORMASI DALAM MENDUKUNG RISET DI BIDANG KIMIA

Harno Dwi Pranowo

Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria (PKKIA)

Jurusan Kimia FMIPA UGM Yogyakarta

harnoprano@yahoo.com; harnodp@ugm.ac.id

ABSTRAK

Perkembangan teknologi informasi telah memberikan andil yang besar dalam perkembangan kimia komputasi. Hal ini didukung oleh ketersediaan perangkat lunak, perangkat keras, dan bahasa pemrograman yang semakin mudah diaplikasikan dalam penyelesaian masalah-masalah kimia. Pengakuan terhadap peran kimia komputasi dalam sains dan teknologi ditandai dengan penganugerahan hadiah nobel bidang kimia tahun 1998 kepada John Pople yang telah mengembangkan metode komputasi dalam kimia kuantum, dan Walter Kohn yang mengembangkan teori fungsional kerapatan (*density-functional theory*).

Teknologi informasi juga dimanfaatkan dalam bidang pendidikan kimia yang memungkinkan peserta didik dapat memperoleh informasi yang beragam dari internet dan menjadikannya sebagai bahan diskusi dan pengayaan sistem pembelajaran kimia. Guru dan dosen dapat memposisikan diri sebagai fasilitator dalam proses pembelajaran. Pemanfaatan perangkat lunak kimia komputasi akan mendekatkan diri anak pada pemahaman konsep kimia yang abstrak menjadi sesuatu yang mudah dipahami dengan memanfaatkan kemampuan teknologi berbasis grafis yang menjadi andalan pengembangan perangkat keras.

Tantangan masa depan kimia komputasi dalam penelitian dan pendidikan kimia menyangkut tentang pengembangan teknik komputasi yang efisien, ketersediaan perangkat lunak yang *user friendly* dan harga terjangkau, kerjasama penelitian dan pengembangan pembelajaran kimia komputasi pada seluruh jenjang pendidikan.

PENGANTAR

Perkembangan teknologi informasi dan komunikasi (*Information and Communication Technology/ICT*) mengalami percepatan yang luar biasa. Perkembangan ini mempunyai pengaruh begitu besar bagi pola hubungan antar individu, antar komunitas, bahkan antar negara atau bangsa. Istilah Teknologi informasi atau TI sendiri mencakup perangkat

keras (*hardware*), perangkat lunak (*software*) komputer, suara, data, jaringan, satelit dan teknologi komunikasi lainnya, termasuk di dalamnya perangkat-perangkat pengembangan aplikasi dan multimedia. Teknologi ini digunakan sebagai sarana untuk memperoleh, memproses, menyimpan dan menyebarkan informasi. Dengan demikian, perbincangan mengenai perkembangan teknologi informasi itu sendiri tidak akan lepas dari perbincangan mengenai perkembangan teknologi komputer berikut infrastruktur telekomunikasi.

Perkembangan teknologi informasi saat ini, terutama internet, mampu menghadirkan ruang-ruang interaksi virtual dan menyediakan informasi dalam jumlah melimpah yang dapat diakses secara cepat. Berbagai aktivitas keseharian termasuk di dalamnya aktivitas pendidikan sebenarnya dapat dilakukan dengan lebih mudah, murah, efisien, serta demokratis. Jika pada masa lalu sumber pengetahuan terpusat pada institusi-institusi pendidikan formal, maka saat ini sumber pengetahuan tersebar di berbagai lokasi yang melintasi batas-batas institusi, geografis maupun negara. Guru atau dosen tidak lagi memposisikan diri sebagai pemegang otoritas pengetahuan namun lebih sebagai mediator dan fasilitator bagi berlangsungnya proses belajar yang lebih partisipatif. Konsekuensi dari hal ini adalah selayaknya paradigma yang digunakan bukan lagi menekankan pada aspek *teaching* (mengajar) namun lebih menitikberatkan pada proses *learning* (belajar).

Masyarakat yang berbasis pada pengetahuan (*Knowledge Based Society*) merupakan visi masa depan yang perlu diikuti dengan langkah riil kita untuk meningkatkan kapasitas intelektual dan ketrampilan terkait dengan teknologi informasi dengan memanfaatkan berbagai sarana belajar yang saat ini cukup mudah didapat. Ketersediaan untuk berbagi informasi maupun sumber daya yang kita miliki kepada orang lain secara sukarela tanpa proteksi macam-macam merupakan salah satu kata kunci percepatan proses pencerdasan diri dan masyarakat.

Perkembangan teknologi informasi ini juga sangat berpengaruh dalam bidang penelitian kimia. Penelitian bidang Kimia Komputasi sangat terbantu dengan perkembangan yang cepat pada bidang teknologi informasi, terutama berkaitan dengan kecepatan perhitungan komputasi, ketersediaan perangkat lunak kimia komputasi, ketersediaan basis data

kimia on-line, dan kemudahan publikasi dan komunikasi hasil penelitian. Pada makalah ini akan disampaikan pengertian kimia komputasi, manfaat kimia komputasi dalam pendidikan dan penelitian, dan manfaat teknologi informasi dalam penelitian dan pendidikan kimia.

PENGETIAN KIMIA KOMPUTASI

J. L. Gay-Lussac pada tahun 1888 mengatakan "*We are perhaps not far removed from the time when we shall be able to submit the bulk of chemical phenomena to calculation*". Walaupun kimia terutama berkait dengan sains eksperimen, John A Pople (Northwestern University, Illinois) adalah saintis yang paling berjasa dalam mewujudkan prediksi Gay-Lussac. Pople telah memasukkan unsur baru di antara eksperimen dan teori yaitu eksperimen komputer (*Computer Experiment*). Dalam eksperimen komputer, model masih tetap menggunakan hasil pakar kimia teoritis, tetapi perhitungan dilakukan dengan komputer berdasar atas suatu algoritma ("resep"), yang ditulis dalam bahasa pemrograman. Keuntungan metode ini adalah dimungkinkannya menghitung sifat molekul yang kompleks dan hasil perhitungannya berkorelasi secara signifikan dengan data eksperimen. Pople memenangkan hadiah Nobel bidang sains pada tahun 1998 atas jasanya dalam membangun metode komputasi dari kimia kuantum dalam mengeksplorasi sifat sistem kimia. Hadiah Nobel tersebut dimenangkan secara bersama dengan Walter Kohn (University of California) yang mencetuskan teori fungsional kerapatan (*Density Functional Theory, DFT*). Pople dan Kohn telah mengembangkan kimia kuantum dalam eksplorasi sistem kimia sebagai suatu metode yang dapat digunakan peneliti bidang kimia, farmasi, kedokteran dan biologi.

Ahmed H. Zewail, dari California Institute of Technology, Pasadena, USA, pemenang hadiah Nobel bidang kimia tahun 1999 melakukan penelitian dengan menggunakan teknik spektroskopi femtodetik (*femtosecond spectroscopy*) untuk 'melihat' perilaku perubahan molekul selama reaksi kimia terjadi. Kajian tentang keadaan transisi suatu reaksi kimia dapat dikaji dengan spektroskopi femtodetik yang memiliki kemampuan analisis pada skala waktu terjadinya reaksi (satu femtodetik = 10^{-15} detik). Waktu yang diperlukan atom dalam

molekul untuk melakukan vibrasi umumnya sebesar 10-100 fs (Suzuki, 2006). Dengan spektroskopi femtodetik, untuk pertama kalinya dihasilkan gerakan lambat tentang perubahan energi selama reaksi berlangsung, sehingga dapat dipahami latar belakang mekanistik hipotesis Arrhenius tentang ketergantungan reaksi terhadap temperatur, dan juga pada rumusan yang dihasilkan van't Hoff. Dengan kata lain, Zewail mampu mempelajari atom dan molekul dalam gerakan lambat - "slow motion"- selama reaksi. Penelitian di bidang kimia femtodetik ini memungkinkan peneliti bidang kimia komputasi dapat membandingkan data hasil simulasi molekular dengan data spektroskopi femtodetik (Huang, 2006).

IUPAC memberi pengertian Kimia Komputasi sebagai disiplin ilmu yang menggunakan metode matematika untuk menghitung sifat molekular atau untuk mensimulasi kelakuan sistem molekular (Waterbeemd dkk., 1997). Ruang lingkup kimia komputasi meliputi kajian kestabilan konformasi struktur senyawa kimia, termokimia, spektroskopi molekular, mekanisme reaksi, potensial elektrostatik, muatan atom, simulasi Monte Carlo dan Dinamika Molekular (Jensen, 1999).

Aplikasi kimia komputasi juga banyak digunakan pada bidang kimia atmosfer, desain obat, desain katalis/biokatalis, sifat fisik simulasi proses, struktur dan sifat polimer, sifat pelumas, dan kimia surfaktan. Kemajuan kimia komputasi telah memberikan kontribusi besar dalam bidang proses kimia terutama pada langkah efisiensi desain proses dan produk baru, optimasi proses yang sedang berjalan, peningkatan efisiensi energi, meminimalkan produksi yang menghasilkan limbah, penyempurnaan mekanisme reaksi, pemodelan lingkungan, dan peningkatan produksi dengan tetap mempertimbangkan bidang kesehatan, keselamatan dan lingkungan hidup.

Kemajuan simulasi dan pemodelan, terutama kimia komputasi, dapat memberikan pengaruh berarti dalam menurunkan biaya dan waktu yang diperlukan desain proses kimia dan senyawa baru. Pemodelan molekular yang akurat memungkinkan peneliti lebih cepat memprediksi sifat dan spesies kimia yang terlibat dalam suatu proses kimia. Desain katalis baru suatu proses kimia akan menaikkan keunggulan produksi,

mereduksi emisi dan limbah, dan membangun proses kimia berkategori kimia hijau (*green chemistry*). Pemodelan dan simulasi akan memainkan peranan penting dalam pengembangan teknologi baru dalam produksi dan desain material/produk (Leach, 2001).

Simulasi komputer membutuhkan suatu metode akurat dalam memodelkan sistem yang dikaji. Simulasi sering dilakukan dengan kondisi yang sangat mirip dengan eksperimen, sehingga hasil perhitungan kimia komputasi dapat dibandingkan secara langsung dengan eksperimen. Jika hal ini terjadi, maka simulasi bersifat sebagai alat yang sangat berguna, bukan hanya untuk memahami dan menginterpretasi data eksperimen dalam tingkat mikroskopik, tetapi juga dapat mengkaji bagian yang tidak dapat dijangkau secara eksperimen, seperti reaksi pada kondisi tekanan sangat tinggi atau reaksi yang melibatkan gas berbahaya. Sistem solvasi kation dalam pelarut air, amoniak (Pranowo dan Rode, 1999; Pranowo dkk., 2006) dan campuran air-amoniak (Pranowo dan Rode, 2000; Pranowo dan Rode., 2001; Pranowo, 2003) telah dikaji dengan teknik simulasi Monte Carlo dan menghasilkan informasi tentang kestabilan sistem solvasi kation dan solvasi preferensial. Penelitian tentang sistem solvasi kation dalam pelarut air dapat menjelaskan fenomena *ionic pump* pada membran sel. Energi hidrasi K^+ yang lebih rendah dibandingkan dengan Na^+ menyebabkan K^+ lebih mudah melepaskan molekul air yang mengelilinginya dan masuk ke dalam *K-channel* (Tongraar dkk., 1998). Hal ini memberikan alternatif penjelasan tentang selektivitas K^+ dalam saluran sel yang oleh McKinnon dkk., dijelaskan dari sisi rigiditas atom oksigen karbonil dalam saluran sel yang hanya optimal dalam mengikat K^+ daripada ion Na^+ yang memiliki jejari lebih kecil (Doyle dkk., 1998).

RUANG LINGKUP KIMIA KOMPUTASI

Pemodelan molekular (*molecular modeling*) adalah teknik menginvestigasi struktur dan sifat molekular menggunakan kimia komputasi dan teknik visualisasi grafis dalam upaya menghasilkan gambaran tiga dimensi yang teliti dari suatu sistem kimia. Perkembangan komputer grafis sangat membantu analisis dan visualisasi interaksi molekular sistem kimia sehingga hampir semua jurnal ilmiah kimia

dilengkapi dengan hasil visualisasi molekul sistem kimia yang dijadikan obyek penelitian.

Informasi kimia (*Chemical Informatics*) merupakan aplikasi teknologi komputer pada semua bidang kimia. Bidang yang banyak menggunakan teknik informasi kimia adalah industri obat. Peneliti informasi kimia berhadapan dengan data sangat besar sehingga perlu dibuat sistem informasi yang membantu kimiawan untuk memprediksi sifat kimia senyawa. Teknik ini serupa dengan yang telah dilakukan oleh Mendeleev ketika berhasil menetapkan posisi dan sifat unsur yang belum diketahui pada tabel periodik unsur. Penerapan teknologi informasi pada informasi kimia telah membantu ahli kimia mengorganisir dan menganalisis data ilmiah yang tersedia, dalam rangka menghasilkan senyawa dan proses yang baru (Manly dkk., 2001)

Bidang informasi kimia menjadi sangat penting beberapa tahun terakhir ini seiring dengan aktivitas perusahaan obat dan organisasi penelitian ilmu hayati memberikan perhatian khusus dari genomik ke proteomik dan teknik informasi terintegrasi. Penerapan Kimia kombinatorial (*Combinatorial Chemistry*) dan *High-Throughput Screen (HTS)* memberikan kemajuan sangat cepat pada penelitian kimia. Perusahaan yang bergerak pada bidang informasi kimia menggabungkan simulasi molekular dan teknik analisis data dengan dukungan visualisasi grafis berkualitas tinggi untuk mendapatkan hasil yang memuaskan (Urban dkk., 2008).

Peneliti yang bekerja pada informasi kimia harus berkonsentrasi pada bidang kimia komputasi dan pemodelan molekul, pencarian dan pengkodean struktur kimia, dan visualisasi data kimia. Hal ini sangat terbantu dengan pengkodean grafis komputer yang sangat pesat kemajuannya sehingga menghasilkan penelitian handal di bidang tersebut. Metode dan perangkat yang diperlukan dalam bidang informasi kimia adalah QSAR/QSPR (*Quantitative Structure Activity Relationship/Quantitative Structure Property Relationship*), algoritma genetik, statistik, analisis data, teknik visualisasi, CML (*Chemically-Aware Web Language*), *Web Services* dan Kimia Komputasi/ Pemodelan molekul (Raha, 2007). Perkembangan lanjut dari QSAR adalah 3D-QSAR atau CoMFA (*Comparative Molecular Field Analysis*). CoMFA

merupakan metode 3D-QSAR yang menggunakan teknik hubungan kuantitatif antara aktivitas biologis dari sekelompok senyawa deret homolog dengan sifat tiga dimensinya yang berkait dengan sifat elektronik dan sterik. Dalam metode CoMFA, efek sterik, elektrostatik, luas permukaan, hidrofobisitas dan ikatan hidrogen dari molekul dihubungkan pada deskripsi molekular spesifik (Paulino, 2008). Pelopor perkembangan 3D-QSAR adalah Marshall yang telah mengkomersialkan pendekatan analog aktif ini, dan beberapa teknik desain obat lain dalam program pemodelan molekul bernama SYBYL (www.tripos.com/sybyl/).

KIMIA KOMPUTASI DALAM PENDIDIKAN KIMIA

Ada beberapa alasan mengapa kimia komputasi penting untuk pembelajaran kimia. Peserta didik memerlukan belajar untuk “berfikir seperti molekul berpikir”. Untuk melakukan ini peserta didik memerlukan upaya “melihat” apa yang molekul lihat, dan “merasa” apa yang dirasakan molekul. Model memberikan gambaran paling baik dan secara langsung dapat menggambarkan dunia molekular. Perangkat lunak kimia komputasi seperti HyperChem (www.hypercub.com) memberikan fasilitas memadai untuk ‘melihat’ bentuk molekul’, menikmati vibrasi ikatan antar atom yang terekam sebagai spektra infra merah, dan dinamika perubahan struktur molekul akibat pengaruh sistem reaksi. VSEPR (*Valence Shell Electron Pair Repulsion*) dapat memodelkan bentuk molekul, dan orbital molekul Hockel mampu memprediksi tingkat energi ikatan adalah sebagian dari upaya mengubah teori ke dalam prediksi kimia. Metode kimia komputasi memberikan hasil pengujian yang jauh lebih memadai dari prediksi teoritis. Model mudah untuk digunakan, tidak mahal dan aman (Rode dkk., 2007).

Apakah pemodelan molekul harus menggantikan kimia eksperimental? Tentu saja tidak. Tujuan akhir kimia adalah menghasilkan senyawa yang berguna bagi kehidupan, tidak akan berubah dengan perkembangan pemodelan molekul. Kemampuan dalam pemodelan molekul akan memperpendek waktu dan mereduksi biaya yang diperlukan untuk mensintesis suatu senyawa. Pada tingkat praktis kita ingin belajar sintesis dan analisis yang banyak bergantung pada ketrampilan/skill. Pada tingkat teoritis intelektual, kita ingin mengetahui

“aturan” yang menggambarkan perilaku kimia. Pendidikan kimia modern memerlukan ketrampilan praktis dalam eksperimen, selain itu juga memerlukan pemahaman terhadap pemodelan molekul (Lipkowitz and Boyd, 2002).

Seberapa lama kita harapkan perhitungan kimia komputasi akan selesai? Untuk menjawab pertanyaan ini, diperlukan pemahaman tentang keakuratan metode kimia komputasi yang digunakan, besarnya sistem kimia yang dimiliki, dan kinerja komputer yang digunakan. Kimia komputasi digunakan untuk menjelaskan beragam sistem kimia dengan kompleksitas yang sangat luas. Tiga metode kimia komputasi yang sering digunakan adalah *ab initio*, semiempiris dan mekanika molekular. Metode *ab initio* digunakan untuk memprediksi sifat sistem kimia yang melibatkan jumlah atom yang kecil, sementara metode semiempiris mampu melakukan perhitungan sistem kimia lebih besar. Sistem kimia yang terdiri dari jutaan atom, masih dapat dianalisis menggunakan metode mekanika molekular. Kemampuan perhitungan dengan metode kimia komputasi bergantung juga pada kemampuan komputer melakukan perhitungan. Untuk mendapatkan perhitungan efisien, dikembangkan metode hibrid QM/MM (*Quantum Mechanics/Molecular Mechanics hybrid*) yang mampu menghitung secara teliti sisi aktif dari suatu sistem kimia karena dihitung secara mekanika kuantum, sedangkan bagian sistem kimia yang jumlahnya besar dan tidak mengalami perubahan terlalu besar dihitung dengan metode Mekanika Molekular. Teknik QM/MM banyak digunakan untuk mengkaji interaksi obat dengan reseptor dalam *docking* molekular dengan cara penerapan perhitungan QM pada sisi interaksi aktif, dan MM pada bagian reseptor yang tidak berinteraksi aktif (Hofer dkk., 2004). Perangkat lunak *Gaussian* (www.gaussian.com) atau *Turbomole* (www.turbomole.com) merupakan dua di antara banyak perangkat lunak kimia komputasi handal untuk penentuan sifat molekular sistem kimia.

Internet telah menjadi basis data informasi terbesar setelah semua orang berpartisipasi memberikan informasi terbaik yang dimiliki. Informasi tentang kimia di internet tersedia dalam jumlah sangat memadai, yang dapat dikelompokkan menjadi beberapa kategori, antara lain: database (cccbdb.nist.gov/), perangkat lunak

(www.ccl.net/chemistry/resources/software/), institusi (aic.ugm.ac.id), pendidikan (www.computationalscience.org/ccce/), jurnal ilmiah (www.ch.cam.ac.uk/c2k/cj/comp.html), organisasi profesi (www.kimiawan.org/), pelayanan riset (www.dsbscience.com) dan kelompok penggemar dan pemerhati kimia (www.chem-is-try.org).

BAGAIMANA MELAKUKAN PENELITIAN DI BIDANG KIMIA KOMPUTASI ?

Jika menggunakan kimia komputasi untuk menjawab permasalahan kimia, maka terdapat tuntutan akan kemampuan menggunakan perangkat lunak. Masalah yang tersembunyi adalah kita memerlukan pengetahuan tentang seberapa teliti jawaban yang akan kita dapat. Beberapa daftar pertanyaan yang dapat dibuat antara lain : Apa yang ingin kita diketahui, bagaimana keakuratannya? Jika kita tidak dapat menjawab pertanyaan tersebut, kita tidak akan mendapatkan proyek penelitian.

Seberapa akurat akan dapat diprediksi hasilnya ? Dalam kimia analitik, peneliti dapat mengerjakan sejumlah pengukuran yang identik kemudian dicari standar deviasi untuk mengukur keakuratannya. Dengan eksperimen komputasi, melakukan perhitungan untuk hal yang sama akan selalu memberikan hasil yang secara eksak sama. Cara yang dapat dilakukan adalah memperkirakan kesalahan perhitungan dengan membandingkan sejumlah perhitungan serupa dengan data eksperimen sehingga harus tersedia artikel dan basis data yang berkaitan dengan penelitian. Jika data eksperimen tidak tersedia, kita harus mempunyai metoda yang keakuratannya tinggi, berdasar pada asumsi sesuai dengan pengetahuan kita, sebelum kita menerapkan pada masalah yang akan dikaji dan melakukan analisa tentang ketelitian hasil yang akan diperoleh. Jika seseorang hanya memberitahukan bahwa metodenya adalah metode yang paling baik, kemungkinannya adalah mereka mempunyai sejumlah informasi tersimpan yang banyak, atau mereka tidak tahu apa yang mereka bicarakan. Berhati-hati jika seseorang memberi tahu bahwa suatu program sangat baik, hanya karena itu satu-satunya program yang diketahui cara menggunakannya, bukan berdasar pada validitas program tersebut dalam menghasilkan prediksi hasil yang berkualitas.

Seberapa lama diharapkan perhitungan akan selesai? Jika pengetahuan dan perkembangan teknologi mencapai kesempurnaan, seolah komputer pribadi akan dapat diberitahu untuk menghasilkan penyelesaian eksak persamaan Schroedinger. Namun demikian sering perhitungan *ab initio* memerlukan waktu yang lama dan mungkin akan memerlukan satu dekade untuk perhitungan tunggal, walaupun kita mempunyai mesin dengan memori dan ruang simpan yang cukup. Namun demikian, sejumlah metode tersedia untuk setiap situasi yang dihadapi. Cara yang terbaik adalah memilih metode yang sesuai dengan masalah yang akan diteliti. Dengan demikian jawabannya adalah melihat di kepustakaan dan melihat berapa lama waktu yang diperlukan. Faktor perhitungan juga harus diperhitungkan yaitu dengan cara melakukan perhitungan sifat sistem kimia sederhana, kemudian gunakan persamaan pemfaktoran untuk mengestimasi berapa lama waktu yang diperlukan untuk perhitungan yang masih memberikan hasil dengan akurasi yang diterima.

Pendekatan apa yang harus dibuat? Apakah signifikan pendekatan itu? Ini merupakan cara mengatasi permasalahan yang dihadapi, jangan sampai dihasilkan perhitungan yang bersifat “sampah”. Sebagai contoh, untuk meneliti gerakan vibrasional yang bersifat tak-harmonik tidak mungkin diperoleh dari perhitungan dengan pendekatan osilator harmonik.

Jika jawaban akhir dari semua pertanyaan di atas telah dihasilkan, maka langkah selanjutnya adalah untuk melakukan perhitungan dengan menentukan perangkat lunak yang tersedia, berapa harganya dan bagaimana cara menggunakannya. Perlu dicatat bahwa, dua program yang sejenis mungkin akan menghitung sifat yang berbeda, sehingga kita harus meyakinkan diri mengenai program apa yang diperlukan. Belajar menggunakan sebuah program harus didahului dengan menggunakan molekul sederhana, misalnya dengan menggunakan molekul air. Setelah memiliki ketrampilan dalam menggunakan perangkat lunak tersebut, maka dapat dilakukan penelitian terhadap sistem kimia yang menjadi topik kajian penelitian.

TANTANGAN KIMIA KOMPUTASI DI MASA DEPAN

Kimia komputasi dapat membantu dalam bidang desain dan optimasi proses yang baru atau proses yang sedang berjalan maupun optimasi produk. Kimia komputasi dapat mereduksi biaya pengembangan, meningkatkan efisiensi energi, dan daya guna lingkungan, sehingga menaikkan produktivitas dan keuntungan. Walaupun kimia komputasi dapat diterapkan pada bidang industri, tetapi masih punya keterbatasan. Hal ini disebabkan karena keterbatasan skala permasalahan industri yang dapat dimodelkan, juga adanya kesulitan dalam validasi dan kesesuaian hasil pemodelan molekul. Hambatan lain adalah menghasilkan perangkat lunak komersial yang dengan mudah digunakan oleh masyarakat. Keterbatasan ini disebabkan karena kualifikasi masyarakat pengguna yang masih kurang, jumlah peminat yang sedikit, dan kurangnya publikasi informasi dan pendidikan tentang keuntungan penggunaan kimia komputasi dalam bidang yang digeluti masing-masing individu.

Idealnya, kimia komputasi mempunyai sifat (1) dapat diterapkan pada sistem yang bervariasi, yaitu berlaku untuk sistem yang besar, waktu operasi yang panjang, sistem cairan atau padatan, (2) Fleksibel, dapat dijalankan pada berbagai *platform* komputasi (perangkat keras) dan perangkat lunak, dan didukung oleh visualisasi grafis yang memadai, (3) Kemampuan tinggi, mampu dijalankan pada desktop atau *platform* komputasi paralel berbiaya murah, (4) Mudah digunakan, mekanisme penggunaan yang sederhana dan sistem yang canggih untuk dapat digunakan oleh pengguna dengan kemampuan rata-rata, (5) Validasi eksperimental, hasil perhitungan komputasi divalidasi secara eksperimental, (6) Termasuk dalam kurikulum pendidikan, yaitu dapat diberikan pada S1, S2 maupun S3 melalui kuliah dan praktikum.

Permasalahan utama untuk pemanfaatan komputer adalah keberadaan aplikasi kimia komputasi yang memadai dan lengkap. Salah satu aplikasi kimia komputasi yang cukup memadai untuk penemuan obat adalah *Molecular Operating Environment (MOE)* yang dikembangkan *Chemical Computing Group* (www.chemcomp.com). *MOE* selain menawarkan fasilitas yang cukup lengkap juga *user-friendly* sehingga cocok digunakan dalam pembelajaran. Hanya saja aplikasi kimia

komputasi yang *user-friendly* biasanya mahal sehingga alasan efisiensi biaya tidak lagi relevan. Sebagai contoh, biaya lisensi untuk penggunaan akademis (non komersial) sekitar 2000 US dollar pertahun. Perangkat lunak semacam ini sangat sesuai jika pengelolaannya dapat terpusat di universitas sehingga peneliti dari berbagai disiplin ilmu dapat memanfaatkan secara maksimal.

Di era *open source* ini semakin banyak aplikasi-aplikasi kimia komputasi berbasis *open source* maupun yang menawarkan *free academic license*. Hanya saja aplikasi-aplikasi tersebut seringkali tidak *user-friendly* dan untuk memanfaatkannya membutuhkan kemampuan penguasaan komputer yang lebih baik misalnya dengan tuntutan penguasaan sistem operasi LINUX. Pada umumnya aplikasi-aplikasi tersebut seringkali fokus pada satu topik sehingga tidak cukup lengkap digunakan secara komprehensif, misalnya NAMD (www.ks.uiuc.edu/Research/namd/), sebuah aplikasi untuk Molecular Dynamics; Visual molecular dynamics (VMD; www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/) untuk visualisasi molekul baik tunggal maupun trajectory hasil studi Molecular Dynamics; ArgusDock (www.arguslab.com) untuk analisis docking molekular; GAMESS (www.uiowa.edu/~gchemical/gtk-gamess.shtml) untuk minimisasi energi; dan ACD/labs ChemSkech (www.acdlabs.com) untuk menggambar struktur kimia.

Pemanfaatan *High-Performance Computing (HPC)* dalam bidang kimia komputasi melibatkan permasalahan pengembangan arsitektur komputer paralel, sistem perangkat lunak dan aplikasinya (Catlow dan Woodley, 2006). Simulasi mekanika kuantum sangat bermanfaat untuk simulasi molekular yang memerlukan akurasi yang tinggi. Kendala yang dihadapi adalah waktu operasi yang lama jika molekul yang dianalisis mempunyai jumlah atom besar. Kajian kimia komputasi yang terbantu dengan ketersediaan *HPC* adalah simulasi dinamika molekular, informasi kimia, dan *docking* molekular yang pada umumnya memerlukan visualisasi grafis dari interaksi antar molekul. Hal inilah yang akan menjadi tantangan para peneliti pemodelan molekular.

Salah satu kegiatan dalam proyek INHERENT (*Indonesian Higher Education Network*) UGM adalah *i-HPC (Inherent-High Performance*

Computing) yang merupakan portal kolaborasi riset berbasis komputasi paralel berunjuk kerja tinggi. Aplikasi komputasi digital tersebut antara lain: aplikasi di bidang rekayasa semikonduktor, desain seri protein, pemodelan *DNA*, simulasi syaraf manusia, bioteknologi, bioinformatik, *digital signal processing*, pengelolaan informasi geografis, dan lain-lain. Aplikasi ini dapat menekan biaya riset *high end*, selain dapat menghasilkan produk riset bertaraf internasional. Manfaat yang diperoleh adalah dapat meningkatkan rekognisi negara Indonesia di dunia Internasional.

Peluang kerjasama antar peneliti lintas bidang seperti kimia komputasi, kedokteran, farmasi, biologi, ahli sintesis dan teknik kimia, dan institusi pendidikan tingkat menengah (SMA), merupakan faktor dominan dalam memanfaatkan kemudahan yang ditawarkan oleh kimia komputasi dalam memprediksi senyawa baru yang mempunyai potensi sebagai obat dengan harga jual yang kompetitif.

DAFTAR PUSTAKA

- Catlow, R., Woodley, S.M., 2006, High Performance Computing in Materials Chemistry, *J.Mater.Chem.*, 16, 1883
- Doyle, D.A., Cabral, J.M., Pfuetzner, R.A., Kuo, A., Gulbis, J.M., Cohen, S.L., Chait, B.T., MacKinnon, R., 1998, The Structure of the Potassium Channel: Molecular Basis of K⁺Conduction and Selectivity, *Science*, 280, 69.
- Hofer, T.S., Tran, H.T., Schwenk, C.F., Rode, B.M., 2004, Recent Developments and Challenges in Chemical Simulations, *J.Comput.Chem.*, 25, 211.
- Huang, W., Qian, W., and El-Sayed, M.A., 2006, Gold Nanoparticles Propulsion from Surface Fueled by Absorption of Femtosecond Laser Pulse at Their Surface Plasmon Resonance," *J.Am.Chem.Soc.*, 128, 13330.
- Jensen, F., 1999, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, England
- Leach, A.R., 2001, *Molecular Modelling, Principle and Applications*, edisi-2, Pearson Education EMA, London.
- Lipkowitz K.B., Boyd, D.B. (Editors), 2002, *Reviews in Computational Chemistry*, Vol 8., John Wiley & Sons, New Jersey, USA.
- Manly, C. J., Louise-May, S., and Hammer, J.D., 2001, The Impact of Informatics and Computational Chemistry on Synthesis and Screening, *Drug Discovery Today*, 6, 1101.

- Paulino M., Alvareda, E.M., Denis, P.A., Barreiro, E.J., da Silva S.G.M., Dubin, M., Gastellú, C., Aguilera, S., Tapia, O., 2008, Studies of Trypanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure–Activity Relationships, *Euro.J.Med.Chem.*, *43*, 2238.
- Pranowo H.D., Mudasir, Kusumawardani C., Purtadi S., 2006, The Structure of Co^{2+} in Liquid Ammonia: Monte Carlo Simulation including Three-Body Correction, *Chem.Phys.*, *324*, 573
- Pranowo, H.D., Rode, B.M., 2000, Simulation of Preferential Cu^{2+} Solvation in Aqueous Ammonia Solution by Means of Monte Carlo Method Including Three-Body Correction Function Terms, *J.Chem.Phys.*, *112*, 4212.
- Pranowo, H.D., Rode, B.M., 2001, Preferential Cu^{2+} Solvation in Aqueous Ammonia Solution of Various Concentrations, *Chem.Phys.*, *263*, 1.
- Pranowo, H.D., 2003, Monte Carlo Simulation of CuCl_2 in 18.6% Aqueous Ammonia Solution, *Chem.Phys.*, *291*, 53.
- Pranowo, H.D., Rode, B.M., 1999, Solvation of Cu^{2+} in Liquid Ammonia : Monte Carlo Simulation Including Three-Body Corrections, *J.Phys.Chem. A*, *103*, 4298.
- Raha K, Peters M.B., Wang B., Yu N., Wollacott A.M., Westerhoff L.M., Merz K.M. Jr., 2007, The Role of Quantum Mechanics in Structure-Based Drug Design, *Drug Discov. Today.*, *12*, 725.
- Rode, B.M., Hofer, T.S., Kugler, M.D., 2007, *The Basic of Theoretical and Computational Chemistry*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., KGaA, Weinheim.
- Suzuki, T., 2006, Femtosecond Time-Resolved Photoelectron Imaging, *Ann.Rev.Phys.Chem.*, *57*, 555.
- Tongraar, A., Liedl, K.R., Rode, B.M., 1998, Born-Oppenheimer *Ab Initio* QM/MM Dynamic Simulation of Na^+ and K^+ in Water: Structure Making to Structure Breaking Effects, *J.Phys.Chem.A*, *102*, 10340
- Urban D.J., Zheng W., Goker-Alpan O., 2008, Optimization and Validation of Two Miniaturized Glucocerebrosidase Enzyme Assays for High Throughput Screening, *Comb.Chem.HighThroughputScreen*, *11*, 817.
- van de Waterbeemd, H., Carter, R.E., Grassy, G., Kubinyi, H., Martin, Y.C., Tute, M.S., Willett, P., 1997, *Glossary of Terms Used in Computational Drug Design (IUPAC Recommendations 1997)*, 1137.

SESSION TANYA-JAWAB

Moderator: **Dr. rer.nat Sri Mulyani, M.Si.**

Notulis: **Endang Susilowati, S.Si., M.Si**

Pertanyaan dari Sri retno DA dari UNS: (1) Jika kita mengisolasi bahan alam diperoleh kristal murni, dan diidentifikasi dengan IR, NMR, MS dan lain-lain. Apakah jika data identifikasi dimasukkan ke program komputer kita bisa tahu strukturnya ?, (2) Jika data senyawa standar dan sampel dimasukkan ke program komputer, apakah bisa diketahui struktur sampelnya?

Jawab: Konformasi kristal itu rumit. Komputasi tidak bisa digunakan untuk prediksi senyawa berdasar data-data dari IR, NMR, MS dan lain-lain. Komputasi hanya sebagai alat bantu memprediksi data fisis dan kimia berdasarkan komputasi kimia. Sehingga akan mendukung prediksi konformasi kristal berdasar data dari IR dll

Pertanyaandari Agus Haryono dari LIPI: Bagaimana peran Komputasi dalam nanoteknologi

Jawab: Peran secara teoretiknya banyak, silahkan search di Internet Journal Inorganic Chemistry. Di UGM juga banyak di kaji nano partikel sel surya oleh kelompok dosen Anorganik

Pertanyaan dari 1Nunik dari UNESA: Saya sedang mempelajari ion logam dalam enzim. Logam sebagai inhibitor atau aktivator. (1)

Apakah dengan pemodelan bisa dijelaskan, (2) langkah awal apa supaya bisa dilakukan sebagai pemula

Jawab: (1) Komputasi kimia bisa menjelaskan fenomena "Cooking Chemistry". Sehingga Komputasi Kimia bisa menjelaskan fenomena docking protein dengan data-data dari hasil perhitungan komputer, (2) pelajari dulu perilaku enzim, Gunakan software free auodock, lakukan docking protein dengan logam dan tentukan data fisiknya, seperi energi ikat dll

Pertanyaan dariSuryadi dari UNS: (1) Kalisaren sudah disintesis dan ada data NMR. Bagaimana konfirmasi konformasi dengan komputasi kimia?, (2) Jika tidak ada kesesuaian data spektra dan komputasi, diambil yang mana?, (3) Jika struktur geometri dari semiempiris an mekanika molekular ada kontradiksi, bagaimana mensikapinya?

Jawab: (1) langkahnya digambar struktur kemudiandi tambah kation, (2) mestinya komputasi akan mendukung data spektra, makapakai eksperiman yang standar baru untuk analisis senyawa baru, (3)lakukan cross cek kebenaran pengambilan metodenya