

Pemanfaatan *Software* Kimia Komputasi Untuk Siswa SMA Negeri 2  
Seram Bagian Barat

Utilization of Computational Chemistry Software for SMA Negeri 2  
Seram Bagian Barat Student

Mario Rowan Sohilait\*<sup>1</sup>, Nelson Gaspersz<sup>1</sup>, I Wayan Sutapa<sup>1</sup>, Hellna Tehubijuluw<sup>1</sup>, Imanuel B. D. Kapelle<sup>1</sup>, Rahayu<sup>1</sup>, Priska Marissa Pattiasina<sup>1</sup>, Fensia A. Souhoka<sup>1</sup>, dan Nurani Hasanela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Pattimura

\*Corresponding author e-mail: rio.rowan@gmail.com

**Abstrak**

Pandemi global Covid-19 yang melanda seluruh dunia turut berdampak signifikan di bidang pendidikan. Salah satunya proses pembelajaran di tingkat SMA yang berubah dari kelas tatap muka menjadi kelas online, menyebabkan ada siswa yang kesulitan memahami pelajaran. Kurangnya pemahaman materi sebelumnya menyebabkan siswa kesulitan beradaptasi pada materi lanjutan pada saat kelas luring berlangsung, misalnya untuk pelajaran kimia. Oleh karena itu, untuk meningkatkan pengetahuan dan pemahaman siswa-siswi SMA tentang kimia, dapat dilakukan melalui pendekatan kimia komputasi. Kegiatan pengabdian masyarakat yang dilakukan bertujuan untuk menumbuhkan minat siswa-siswi SMA, sehingga lebih mengenal dan dapat mengoperasikan software kimia komputasi sebagai pembelajaran kimia yang menarik. Kegiatan ini dilakukan dengan metode ceramah dan praktek langsung bagi siswa-siswi. Ketua tim menyampaikan materi tentang pengantar kimia komputasi, aplikasi dan manfaat kimia komputasi dalam bidang sains, serta bagaimana pemodelan struktur molekul menggunakan program HyperChem dan Gaussian. Pada tahap praktek langsung, siswa dilatih mengoperasikan komputer dan memanfaatkan software untuk mempelajari struktur molekul organik sederhana. Molekul etanol digambar oleh siswa menggunakan ChemSketch dan optimasi geometri menggunakan Hyperchem, sedangkan visualisasi molekul air menggunakan Gaussian. Setelah kegiatan pengabdian berlangsung, siswa-siswi SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat lebih memahami konsep tentang struktur molekul dan lebih antusias ingin mempelajari kimia setelah penggunaan software kimia komputasi tersebut.

**Kata kunci:** Software, HyperChem, Gaussian, Molekul Organik,

**Abstract**

The global pandemic Covid-19 that has hit the whole world has also significantly impacted the education sector. One of them is the learning process at the high school level, which changes from face-to-face classes to online classes, causing some students to need help understanding the lessons. Lack of understanding of previous material causes students to have trouble adapting to advanced material when offline classes take place, for example, chemistry lessons. Therefore, it can be done through a computational chemistry approach to improve high school student's knowledge and understanding of chemistry. The community service activities aim to foster high school student's interest so that they are more familiar with and can operate computational chemistry software as an exciting chemistry learning. This activity was carried out using lecture and hands-on practice methods for students. The team leader delivered material on introduction to computational chemistry, applications, and benefits of computational chemistry in the field of science, as well as how to model molecular structures using HyperChem and Gaussian programs. In the hands-on stage, students were trained to operate the computer and utilize the software to study the structure of simple organic molecules. The ethanol molecule was drawn by students using ChemSketch and geometry optimization using Hyperchem, while the visualization of the water molecule used Gaussian. After the service activities, students of SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat better understood the concept of molecular structures and were more enthusiastic about studying chemistry after using the computational chemistry software.

**Keywords:** Software, HyperChem, Gaussian, Organic Molecule

**PENDAHULUAN**

Pandemi global Covid-19 yang melanda seluruh dunia berdampak signifikan tidak hanya di bidang kesehatan

dan ekonomi tetapi juga di bidang pendidikan (Aeni, 2021; Fahrika & Roy, 2020; Siahaan, 2020). Hal ini mengakibatkan proses pembelajaran di semua tingkatan

tidak terkecuali di tingkat Sekolah Menengah Atas (SMA) yang berubah dari kelas tatap muka (luar jaringan disingkat "luring") menjadi kelas online atau daring (dalam jaringan). Pelaksanaan kegiatan belajar mengajar daring dalam perjalanannya juga mengalami beberapa hambatan diantaranya ketersediaan jaringan internet lancar yang tidak merata, kuota internet yang relatif tidak cukup, hingga kesulitan memahami materi oleh peserta didik. Hal ini berdampak pada proses pembelajaran pasca pandemi yang lambat laun kembali berlangsung secara tatap muka (Septiadi, Prawira, Aepudin, & Lestari, 2022). Kurangnya pemahaman materi sebelumnya menyebabkan siswa kesulitan beradaptasi pada materi lanjutan pada saat kelas luring berlangsung. Salah satu mata pelajaran yang kesulitan dipahami secara baik oleh siswa adalah kimia.

Kimia merupakan salah satu bidang ilmu yang mempelajari tentang susunan, struktur, sifat, dan perubahan materi. Pada tingkatan SMA, siswa diberikan pemahaman tentang sifat-sifat atom, pembentukan ikatan kimia oleh atom, struktur molekul, interaksi zat-zat melalui gaya antarmolekul, dan interaksi antar zat melalui reaksi kimia. Menyikapi perkembangan pembelajaran pasca pandemi tersebut, perlu dilakukan dengan metode pembelajaran kimia yang berbeda. Untuk meningkatkan pengetahuan dan pemahaman siswa-siswi SMA tentang kimia, dapat dilakukan melalui pendekatan kimia komputasi (Yun et al., 2021). Kimia komputasi menerapkan konsep-konsep teori kimia yang diinterpretasikan menjadi program komputer (*software*). Program komputer tersebut dapat mensimulasikan perhitungan terhadap sifat-sifat molekul dan perubahannya. Simulasi komputer juga dapat dilakukan pada sistem atau objek kajian yang lebih besar, ataupun pada sistem kimia yang lebih nyata (Prianto, 2008). Pendekatan ini dapat diterapkan pada pembelajaran kimia di tingkat SMA, salah

satunya untuk memahami materi hidrokarbon (senyawa organik).

Program kimia komputasi seperti HyperChem dan Gaussian dapat digunakan untuk pemodelan struktur senyawa hidrokarbon sederhana. Kedua program tersebut dapat memvisualisasikan dan menganimasikan struktur molekul secara tiga dimensi berdasarkan perhitungan kimia komputasi. Mekanisme ini dapat membantu siswa lebih mudah memahami konsep tentang struktur molekul hidrokarbon.

Penggunaan program Hyperchem untuk pelatihan telah dilakukan sebelumnya oleh Ananto, Muliawati, & Saputra, 2020 bagi siswa di SMKN 3 Mataram. Dimana terjadi peningkatan pemahaman peserta tentang struktur molekul setelah pelatihan berlangsung. Pelatihan penggunaan program komputasi yang lain seperti Avogadro juga telah dilakukan oleh Maahury dan tim di tahun 2021 dan 2022, masing-masing di SMA Negeri 5 dan SMA Negeri 42 Maluku Tengah. Hasil yang diperoleh juga menunjukkan peningkatan pemahaman siswa hingga 90% (Maahury, Sohilait, & Pada, 2021; Maahury, Sohilait, & Rahayu, 2022). Asdim, Triawan, Banon, & Trihadi, 2022 juga melaporkan penggunaan program ChemBioOffice dan ChemSketch dalam pelatihan visualisasi struktur senyawa yang dilakukan bagi siswa Madrasah Aliyah Al Hasanah Kabupaten Bengkulu Tengah dan metode yang digunakan dinilai efektif.

Dalam rangka melaksanakan salah satu tugas pokok tridharma, maka dapat dilakukan melalui pengaplikasian ilmu kimia yang bermanfaat bagi masyarakat baik dalam pengembangan keilmuan dan teknologi, meningkatkan kesejahteraan dan pembangunan masyarakat (Gaspersz, Ubwarin, & Rijoly, 2020; Ubwarin, Gaspersz, & Sisinaru, 2019). Oleh karena itu, pengabdian kepada masyarakat kali ini tim lakukan melalui kegiatan pelatihan pemanfaatan *software* kimia komputasi bagi siswa SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat.

## METODE

### Prosedur Pelatihan

Kegiatan pelatihan dilakukan dengan memanfaatkan fasilitas laboratorium komputasi yang dimiliki oleh sekolah mitra dengan mengikuti tahapan berikut: (1) Tahap Pertama, penyampaian materi pelatihan oleh salah satu tim dosen prodi kimia FMIPA Universitas Pattimura. Materi pelatihan mengenai pengantar kimia komputasi, aplikasi dan manfaat kimia komputasi dalam bidang sains, serta bagaimana pemodelan struktur molekul menggunakan program HyperChem dan Gaussian. Materi pelatihan telah disediakan oleh tim dalam bentuk modul pelatihan; (2) Tahap kedua, perangkat lunak berupa program HyperChem dan Gaussian diinstal terlebih dahulu ke komputer yang tersedia. Proses ini dilakukan langsung oleh siswa yang diarahkan oleh tim dosen; (3) Tahap ketiga, pelatihan dipandu langsung oleh salah satu tim dosen, sedangkan tim yang lain turut membantu tiap siswa yang mengalami kesulitan.

Kegiatan pelatihan ini bertujuan untuk menumbuhkan minat siswa-siswi SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat, sehingga lebih mengenal dan dapat mengoperasikan *software* kimia komputasi sebagai pembelajaran kimia yang menarik.

### Peserta Pelatihan

Peserta pelatihan ini terdiri dari 30 siswa SMA kelas Sebelas (XI).

### Lokasi dan Waktu

Kegiatan pengabdian kepada masyarakat dilaksanakan di SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat yang berlokasi Desa Waesamu, Kecamatan Kairatu Barat, Kabupaten Seram Bagian Barat, Maluku. Kegiatan pengabdian kepada masyarakat ini dilaksanakan pada tanggal 11 Maret 2022.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Kegiatan pengabdian kepada masyarakat dimulai dengan pembukaan. Pembukaan diawali dengan penyampaian sambutan oleh Sekretaris Jurusan Kimia FMIPA Unpatti, yang dilanjutkan dengan

sambutan oleh Kepala SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat sekaligus membuka dengan resmi kegiatan pelatihan tersebut.

Pada tahap pertama kegiatan pelatihan, ketua tim pengabdian menyampaikan materi (Gambar 1). Materi yang disampaikan tentang pengantar kimia komputasi. Dalam kimia komputasi, pemodelan dapat membantu mendesain awal proses reaksi sintesis, mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi, mensimulasi reaksi dalam mekanisme reaksi organik, dan menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan. Sifat-sifat molekul seperti struktur, momen dipol, keterpolaran, atau *hyperpolarizability* merupakan beberapa besaran yang dapat dihitung lewat perhitungan komputasi (Prianto, 2008). Selain itu, disampaikan pula tentang aplikasi dan manfaat kimia komputasi dalam bidang farmasi, kedokteran, dan desain obat. Materi disampaikan dengan bahasa yang sederhana dan mudah dimengerti oleh siswa melalui media yang komunikatif.



Gambar 1. Penyampaian materi oleh ketua tim pengabdian

Pemahaman akan struktur senyawa kimia sangat dibutuhkan para siswa untuk mengetahui dan memahami sifat fisika dan kimia suatu senyawa (Maahury et al., 2021). Setelah mengetahui sifat-sifat fisika dan kimia suatu senyawa, siswa dapat dengan leluasa melakukan tahapan berikutnya. Sebagai contoh adalah pemahaman mengenai struktur kurkumin yang terkandung dari tanaman kunyit atau temulawak. Dengan diketahui dan dipahami struktur kurkumin, maka dapat dilakukan penambatan molekul (*Uji in Silico/*

*Molecular Docking*) terhadap protein target dalam sel kanker. Pembelajaran kimia baik di tingkat sekolah terbantu dengan dipahaminya metode dan media pembelajaran dengan dibantu komputer.

Penggunaan komputer dapat mempermudah pemahaman konsep kimia diantaranya struktur molekul, ikatan kimia, interaksi antara struktur dengan reseptor dan sebagainya. Pada pembahasan geometri molekul, dijelaskan bahwa posisi masing-masing atom ditentukan oleh sifat ikatan kimia yang terhubung ke atom tetangganya. Geometri molekul dapat ditunjukkan oleh posisi atom-atom ini dalam ruang yang meningkatkan panjang ikatan dari dua atom yang bergabung, sudut ikatan dari tiga atom yang terhubung, dan sudut torsi atau sudut dihedral dari tiga ikatan tersebut (Ananto et al., 2020). Peserta diberikan pemahaman bagaimana menggambarkan bentuk molekul mulai dari yang sederhana sampai molekul yang lebih kompleks menggunakan media perangkat komputer.

Setelah penyampaian materi, kegiatan dilanjutkan dengan praktek langsung oleh siswa-siswi. Berpedoman pada modul pelatihan, siswa-siswi mulai dengan menginstal *software* Hyperchem 8.03, Gaussian 09W Revision A-02-SMP yang dilengkapi dengan GaussView 5.08 dan ChemSketch pada komputer masing-masing dengan dibantu oleh tim jika mengalami kesulitan (Gambar 2). Dikarenakan keterbatasan jumlah, komputer digunakan oleh dua sampai tiga orang. Pada tahap ini siswa dapat belajar secara langsung mengoperasikan dan cara menginstal suatu *software* pada komputer.



Gambar 2. Tim dosen membantu siswa menginstal *software* pada komputer

Pada tahap praktek penggunaan *software* HyperChem dan Gaussian yang telah terinstal pada masing-masing komputer, dilanjutkan dengan cara mengoperasikan semua perangkat lunak tersebut. Penggambaran molekul organik dilakukan para siswa dengan menggunakan ChemSketch kemudian dilanjutkan dengan melakukan optimasi geometri menggunakan Hyperchem (Gambar 3) (Asdim et al., 2022; Ananto et al., 2020). Molekul yang dipilih adalah etanol ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ), karena merupakan molekul organik sederhana yang sering ditemukan di sekitar dan paling banyak digunakan diantaranya sebagai pelarut, peraksi, antiseptik, ataupun sebagai campuran minuman tertentu.



Gambar 3. Para siswa menggambar dan melakukan optimasi geometri molekul etanol menggunakan *software* yang dipantau ketua tim

Pelatihan dilanjutkan dengan praktek untuk memvisualisasikan suatu molekul sederhana. Visualisasi molekul dilakukan dengan menggunakan *software* Gaussian, sedangkan molekul yang dipilih adalah air ( $\text{H}_2\text{O}$ ). Siswa menggambar molekul  $\text{H}_2\text{O}$  terlebih dahulu. Visualisasi kemudian memperlihatkan vibrasi yang terjadi antara atom H (Hidrogen) dengan atom O (Oksigen). Vibrasi divisualisasikan secara 3 dimensi berupa animasi yang memperlihatkan gerakan vibrasi *stretching* (peregangan), *bending* (pembengkokan) dan *twisting* (memutar). Berdasarkan visualisasi molekul tersebut, siswa dapat memahami bagaimana molekul air bertindak atau berperilaku pada tingkat molekuler (mikro).

Pelatihan penggunaan komputer sebagai alat untuk mempermudah guru dalam proses pengajaran maupun siswa dalam pemahaman kimia ini dirasa cukup penting untuk dilakukan (Yun et al., 2021). Pelatihan ini diharapkan dapat membantu peran guru maupun siswa dalam pemahaman dan pemanfaatan teknologi serta mempelajari ilmu kimia khususnya dalam pemahaman mengenai bentuk geometri molekuler suatu senyawa. Setelah kegiatan pengabdian berlangsung, siswa-siswi SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat lebih memahami konsep tentang struktur molekul dan lebih antusias ingin mempelajari kimia setelah penggunaan software kimia komputasi tersebut

Kegiatan ini adalah bentuk pengabdian kepada masyarakat dan juga merupakan kepedulian dan tanggung jawab kami sebagai dosen dalam rangka ingin meningkatkan pemahaman akan salah satu materi di dalam pembelajaran siswa-siswi SMA yaitu struktur senyawa organik dalam hal ini hidrokarbon. Senyawa hidrokarbon menjadi salah satu materi yang wajib untuk dipelajari dan dipahami, sehingga bermanfaat bagi siswa ketika melanjutkan studi pada jenjang pendidikan yang lebih tinggi.

## KESIMPULAN

Kegiatan pelatihan pemanfaatan software kimia komputasi bagi siswa-siswi SMA Negeri 2 Seram Bagian Barat di Desa Waesamu, Kecamatan Kairatu Barat, Kabupaten Seram Bagian Barat berlangsung dengan lancar. Para siswa dapat mengoperasikan komputer, menggambar struktur molekul etanol dengan *software* ChemSketch dan melakukan optimasi geometri menggunakan *software* Hyperchem, sedangkan untuk animasi gerak molekul air menggunakan *software* Gaussian.

## DAFTAR PUSTAKA

Aeni, N. (2021). Pandemi COVID-19: Dampak Kesehatan, Ekonomi, dan Sosial COVID-19 Pandemic: The Health, Economic, and Social Effects. *Jurnal*

*Litbang: Media Informasi Penelitian, Pengembangan dan IPTEK*, 17(1), 17-34.

- Ananto, A. D., Muliawati, H., & Saputra, A. (2020). Pelatihan Kimia Komputasi untuk Guru dan Mahasiswa di SMKN 3 Mataram. *WIDYABHAKTI*, 2(2), 112-116.
- Asdim, A., Triawan, D. A., Banon, C., & Trihadi, B. (2022). Pelatihan Aplikasi Pembelajaran Kimia di Madrasah Aliyah Al Hasanah Kabupaten Bengkulu Tengah. *Adimas: Jurnal Pengabdian Kepada Masyarakat*, 6(1), 13-20.
- Fahrika, A. I., & Roy, J. (2020). Dampak pandemi covid 19 terhadap perkembangan makro ekonomi di Indonesia dan respon kebijakan yang ditempuh. *INOVASI*, 16(2), 206-213.
- Gaspersz, N., Ubwarin, E., & Rijoly, J. C. D. (2020). Penerapan Teknologi Pengolahan Sagu untuk Meningkatkan Produksi Sagu Merah-Putih di Desa Porto. *LOGISTA - Jurnal Ilmiah Pengabdian kepada Masyarakat*, 4(2), 70-77.
- Maahury, M. F., Sohilait, M. R., & Pada, S. S. (2021). Pelatihan Penggunaan Software Avogadro untuk Pemodelan Senyawa Hidrokarbon Sederhana kepada Siswa Kelas XI IPA SMA Negeri 5 Maluku Tengah. *Jurnal Gema Ngabdi*, 3(2), 96-100.
- Maahury, M. F., Sohilait, M. R., & Rahayu, R. (2022). Pelatihan Penggunaan Perangkat Lunak Avogadro pada Siswa SMA Negeri 42 Maluku Tengah secara Online. *Jurnal Warta Desa (JWD)*, 4(1), 1-7.
- Prianto, B. (2008). Peran Kimia Komputasi dalam Mempelajari Mekanisme Reaksi. *Berita Dirgantara*, 9(4), 79-82.
- Septiadi, M. A., Prawira, N. H., Aepudin, S., & Lestari, V. A. (2022). Dampak Covid-19 Terhadap Sistem Pendidikan. *Khazanah Pendidikan Islam*, 4(2), 51-61.
- Siahaan, M. (2020). Dampak Pandemi Covid-19 Terhadap Dunia Pendidikan. *Jurnal Kajian Ilmiah*, 1, 73-80.

- Ubwarin, E., Gaspersz, N., & Sisinaru, S. Y. (2019). *Community Empowerment through The Hygiene and Competitive Production of Balobo Salted Fish*. *MITRA: Jurnal Pemberdayaan Masyarakat*, 3(2), 141–150.
- Yun, Y. F., Purbaya, S., Safe'i, A. W., Agustini, D. M., Mulyani, R., Suprabawati, A., ... Agma, M. (2021). Pengembangan pembelajaran jarak jauh bidang kimia pemanfaatan teknologi informasi dalam pembelajaran kimia. *Jurnal Abdimas Kartika Wijayakusuma*, 2(1), 50–57.