|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | **NAMA PERGURUAN TINGGI****FAKULTAS** **JURUSAN / PRODI**  | **: UNIVERSITAS TADULAKO** **: MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM** **: S1 KIMIA** |
| **RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)** |
| **MATA KULIAH** | **KODE** | **Rumpun MK** | **BOBOT (sks)** | **SEMESTER** | **Tgl Penyusunan** |
| **Kimia Komputasi** | G04161050 | **MKP (WAJIB)** | 2 (Teori) | 6 (Enam) | 10 Oktober 2017 |
| **OTORISASI** | **Pengembang RP** | **Koordinator RMK** | **Ketua Jurusan/Podi** |
| **Tim Pengajar Kimia Komputasi** | **Dr. Hardi Ys, M.Si.** | **Dr. Ruslan, S.Si., M.Si.** |
| **Capaian Pembelajaran (CP)** | **CP-PRODI**  |  |
| 1. Memiliki pengetahuan yang memadai tentang Kimia Komputasi.
2. Menguasai konsep, prinsip dan software sederhana Kimia Komputas
3. Memiliki dan memahami konsep Analisis dan teknik/metode untuk memecahkan permasalahan dalam Kimia Komputasi
 |
| **CP-MK** |  |
| Setelah mengikuti perkuliahan ini mahasiswa diharapkan mampu :1. Menjelaskan secara teoritik model Kimia Komputasi
2. Melakukan analisis, perhitungan dan program sederhana kimia komputasi.
3. Mampu menjelaskan hubungan antara teori orbital molekul Hückel dengan Matriks.
4. Mampu menyelesaikan berbagai perhitungan teori orbital molekul Hückel dengan menggunakan perangkat lunak MATLAB.
5. Menjelaskan aplikasi Kimia Komputasi.
 |
| **Diskripsi Singkat MK** | MK Kimia Komputasi membahas tentang identifikasi dan pendekatan perhitungan kimia teoritis, analsis senyawa kimia menggunakan software kimia komputasi, dan aplikasi software komputasi dalam perhitungan dan pemodelan kimia. |
| **Pokok Bahasan / Bahan Kajian** | Dalam perkuliahan ini dibahas:1. Aplikasi matematika pada kimia komputasi.
2. Hubungan antara teori orbital molekul Hückel dengan Matriks.
3. Perhitungan teori orbital molekul Hückel dengan menggunakan perangkat lunak MATLAB.
4. Analisis stabilitas senyawa kimia organic dengan menggunakan sotware Hyperchem
5. Analisis spektrum NMR dengan menggunakan sotware Chemdraw
6. Pengenalan, Instalasi dan interaksi aplikasi *open* software ORCA, Avogadgadro, dan Notepad++
7. Model pemograman sederhana, analisis dan proses komputasi kimia kuantum menggunakan open software
8. Perhitungan DFT dan TD-DFT dan analisis spektra UV-Vis, IR dan yang relevan
9. Pengenalan pengembangan model interaksi atom/ senyawa dalam reaksi (bila memungkinkan).
 |
| **Pustaka** | **Utama :** |  |
| Ramachandran KI, Deepa G, Namboori K. 2008. Computational Chemistry and Molecular Modeling (Principles and Application). Springer: Berlin. |
| **Pendukung :** |  |
| Greenwood HH. 1972. Computing Methods in Quantum Organic Chemistry. Wiley-Interscience: New York. |
| **Media Pembelajaran** | **Perangkat lunak :** |  | **Perangkat keras :** |
| Video/Powerpoint tentang kimia komputasi, Zoom Cloud Meeting (kuliah daring) |  | Papan Tulis, LCD, Alat Tulis |
| **Team Teaching** | Jaya Hardi, S.Si., M.Si. |
| **Matakuliah syarat** | Mahasiswa Semester VI ke atas |
| **Mg Ke-** | **Kemampuan akhir yang diharapkan** | **Bahan Kajian** | **Bentuk Pembelajaran** | **Waktu** | **Pengalaman Belajar Mahasiswa** | **Kriteria Penilaian dan Indikator** | **Bobot Penilaian (%)** |
| ***(1)*** | ***(2)*** | ***(3)*** | ***(4)*** | ***(5)*** | ***(6)*** | ***(7)*** | ***(8)*** |
| **1** | Mampu memahami konsep dasar kimia komputasi | * Pendahuluan
* Definsi dan ruang lingkup dasar kimia komputasi
 | Presentasi dan diskusi | 100 menit | Mendiskusikan perkuliahan dan konsep dasar kimia komputasi | Menjelaskan definisi dan ruang lingkup kimia komputasi | 5 |
| **2-3** | Memahami aplikasi matematika pada kimia komputasi | * Definisi dasar dari Matriks
* Instalasi dan pengoperasian perangkat lunak MATLAB
* Persamaan sistem linear dengan MATLAB
* Metode *Least-Squares* dengan menggunakan MATLAB
* Eigenvalue dan eigenvektor.
 | Presentasi, diskusi, dan penugasan | 200 menit | Menggunakan aplikasi MATLAB pada perhitungan dasar matematika | Kemampuan menggunakan aplikasi MATLAB | 10 |
| **4-5** | Memahami teori orbital molekul hückel dan matriks | * Eigenvektor dari Matriks sekular MATLAB.
* Aplikasi kimia dari teori orbital molekul
* Penentuan densitsas muatan dengan MATLAB
* Aturan Hückel (4n+2), aromatisitas dengan MATLAB
* Penentuan energi delokalisasi secara komputasi.
* Perhitungan orde ikatan secara komputasi
* Reaktivitas kimia berdasarkan teori Hückel.
* Hubungan antara orbital molekul Hückel dengan sifat simetri molekul.
* Perhitungan teori orbital molekul Hückel dengan menggunakan MATLAB
 | Presentasi, diskusi, dan penugasan | 200 menit | Menggunakan aplikasi MATLAB dalam memahami tori orbital molekul Huckel | Kemampuan menggunakan aplikasi MATLAB dalam menyelesaikan soal latihan yang berhubungan dengan teori orbital molekul Huckel | 15 |
| **6-7** | Memahami metode analisis stabilitas senyawa kimia organic dengan menggunakan sotware Hyperchem | * Pengenalan dan instalasi aplikasi open software Hyperchem
* Stabilitas konformasi senyawa organic dengan menggunakan perhitungan medan gaya AMBER
* Stabilitas beberapa karbokation dan pengaruh hiperkonjugasi terhadap panjang ikatan dan kerapatan muatan menggunakan perhitungan semiempiris AM1
* Subtitusi aromatic elektrofilik menggunakan Hyperchem
* Analisis spektrum inframerah menggunakan Hyperchem
 | Presentasi, diskusi, dan penugasan | 200 menit | * Menggunakan aplikasi Hyperchem untuk menentukan stabilitas karbokation, hyperkonjugasi, dan stabilitas kompleks sigma dari senyawa-senya organic
* Menganalisis spektrum Inframerah dengan menggunakan Hyperchem
 | * Kemampuan menunjukkan stabilitas karbokation, hiperkonjugasi, dan stabilitas kompleks sigma senyawa organic dengan aplikasi Hyperchem
* Kemampuan mendeskripsikan spektum IR dengan Hyperchem
 | 20 |
| **8** | **Evaluasi Tengah Semester** |
| **9-10** | Memahami metode analisis spektrum NMR dengan menggunakan sotware Chemdraw | * Pengenalan, instalasi dan pengoperasian open software Chemdraw
* Analisis spektrum NMR dengan aplikasi Chemdraw
 | Presentasi, diskusi, dan penugasan | 200 menit | * Menggunakan Hyperchem
* Menganalisis spektrum NMR dengan aplikasi Chemdraw
 | Kemampuan mengoperasikan Chemdraw dan aplikasinya untuk analisis spektrum NMR | 10 |
| **11-12** | Mahasiswa mampu memahami jenis software yang diperkenalkan dan menguasai fungsi dan kegunaannya.Mahasiswa memahami dan mampu melakukan proses instalasi *open software*. | Pengenalan, Instalasi dan interaksi aplikasi *open* software ORCA, Avogadgadro, dan Notepad++ | Ceramah dan diskusi | 100 Menit | * Menyimak penjelasan dosen.
* Tanya jawab antara instruktur dengan mahasiswa untuk memperjelas hal-hal yang kurang dimengerti oleh mahasiswa.
* Melakukan proses instalasi *open* software
 | * Ketepatan dan kemampuan memahami tugas dan instalasi
* Kemampuan mengemukaan pendapat dan pertanyaan
* Kesantunan dalam berdiskusi.
 | 10 |
| **13-14** | Mahasiswa mampu memahami langkah-langkah pemograman dan fungsi dari *coding* sederhana.Mahasiswa memahami dan mampu melakukan pemograman dan melakukan proses eksekusi dari *open software*.Mahasiswa menguasai informasi yang dihasilkan dari hasil eksekusi yang dijalankan oleh *open software* | Input basis set sederhana, proses dan analisis komputasi kimia kuantumPrediksi dan analisis reaktivitas pasangan senyawa | Ceramah, diskusi, dan penugasan | 100 Menit | * Aktif dalam melakukan *coding* dan eksekusi program.
* Tanya jawab antara dosen/ mahasiswa dengan mahasiswa untuk memperjelas hal-hal yang kurang dimengerti.
 | * Ketepatan dan kemampuan memahami tugas dan *coding*
* Kemampuan mengemukaan pendapat dan pertanyaan
* Kesantunan dalam berdiskusi.
 | 20 |
| **15** | Mahasiswa mampu memahami langkah-langkah pemograman dan fungsi dari *coding* .Mahasiswa memahami dan mampu melakukan pemograman dan melakukan proses eksekusi dari *open software* menghasilkan Spektra UV-Vis, IR dan yang relevanMahasiswa menguasai informasi yang dihasilkan dari hasil eksekusi yang dijalankan oleh *open software* | Penentuan dan analisis spektra UV-Vis, IR suatu reaksi senyawa yang relevanPengenalan pengembangan model interaksi atom/ senyawa dalam reaksi (***bila memungkinkan***). | Ceramah, diskusi dan penugasan | 100 Menit | * Aktif dalam melakukan *coding* dan eksekusi program.
* Tanya jawab antara dosen/ mahasiswa dengan mahasiswa untuk memperjelas hal-hal yang kurang dimengerti.
 | * Ketepatan dan kemampuan memahami tugas dan *coding*
* Kemampuan mengemukaan pendapat dan pertanyaan
* Kesantunan dalam berdiskusi.
 | 10 |
| **16** | **Evaluasi Akhir Semester** |

**Catatan :**

1. CP-Lulusan PRODI (CPL-PRODI) adalah kemampuan yang dimiliki oleh setiap lulusan yang merupakan internalisasi dari sikap, penguasaan pengetahuan dan ketrampilan sesuai dengan jenjang prodinya yang diperoleh melalui proses pembelajaran.
2. CP lulusan yang dibebankan pada mata kuliah adalah beberapa capaian pembelajaran lulusan program studi (CP-L-PRODI) yang digunakan untuk pembentukan/pengembangan sebuah mata kuliah;
3. CP Mata kuliah (CP-MK) adalah kemampuan yang dijabarkan secara spesifik dari CP lulusan yang dibebankan pada mata kuliah;
4. Sub-CP Mata kuliah (Sub-CP-MK) adalah kemampuan yang dijabarkan secara spesifik dari CP mata kuliah (CP-MK) yang dapat diukur atau diamati dan merupakan kemampuan akhir yang direncanakan pada tiap tahap pembelajaran.
5. KreteriaPenilaianadalahpatokan yang digunakansebagaiukuranatautolokukurketercapaianpembelajarandalampenilaianberdasarkan indicator-indikator yang telah ditetapkan. Kreteriamerupakanpedomanbagipenilai agar penilaiankonsistendantidak bias. Kreteriadapatberupakuantitatifataupunkualitatif.
6. Indikatorkemampuanhasilbelajarmahasiswaadalahpernyataanspesifikdanterukur yang mengidentifikasikemampuanataukinerjahasilbelajarmahasiswa yang disertaibukti-bukti.