



RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER

Mata Kuliah (Course)	Kode Mata Kuliah (Code)	Semester (Semester)	SKS (Credit)
Kimia Komputasi	KIM415035	VIII	2
Program Studi (Department)		Dosen Pengampu (Lecturers)	
Kimia		Sudarlin, M.Si.	
Capaian Pembelajaran (Expected Learning Outcome)		Capaian Pembelajaran MK (Course Learning Outcome)	
Setelah mengikuti matakuliah ini, mahasiswa diharapkan mampu menjelaskan tentang beberapa metode kimia komputasi, meliputi prinsip, aplikasi, keunggulan, dan kelemahan masing-masing metode tersebut. Selain itu, mahasiswa diharapkan mampu menerapkan metode-metode tersebut dalam analisis molekul-molekul sederhana		Capaian pembelajaran yang dibebankan pada mata kuliah ini: 1. Mampu mengaplikasikan beberapa konsep matematika, mekanika klasik, dan mekanika gelombang untuk mempelajari sifat fisik dan kimia molekul sederhana, polimer, hingga molekul padatan. 2. Mampu menjelaskan tentang beberapa metode kimia komputasi, meliputi prinsip, aplikasi, keunggulan, dan kelemahan masing-masing metode tersebut 3. Mampu menerapkan metode-metode tersebut dalam analisis molekul-molekul sederhana	

Deskripsi Singkat MK (Course Outline)	
Menggunakan beberapa konsep matematika, mekanika klasik, dan mekanika gelombang untuk mempelajari sifat fisik dan kimia molekul sederhana, polimer, hingga molekul padatan. Metode yang diperkenalkan untuk tujuan tersebut adalah metode komputasi kimia yang meliputi metode ab Initio, Density Functional Theory, semiempirik, dan mekanika molekuler. Pengukuran energi, sifat spektroskopi, interaksi muatan, dan aktivitas molekul adalah contoh kasus yang akan disampaikan secara teoritis dan eksperimen	
Rumpun MK (Course Category)	
Pilihan Umum Program Studi	
MK Prasyarat (Course Prerequisite)	Jenis Prasyarat (Prerequisite Type)
Teori dan Struktur Atom, Dasar-dasar Reaksi Kimia, Matematika Kimia	Ambil/Tempuh/Lulus/Tidak Ada*
Ranah Pendukung Integrasi-Interkoneksi	MK Pendukung Integrasi-Interkoneksi
Filosofi, Materi, dan Strategi	Al-Qur'an dan Hadis, Keterpaduan Islam dan IPTEK

Pertemuan Ke- (Meeting #)	Kemampuan Akhir yang Diharapkan (Lesson Learning Outcome)	Bahan Kajian (Course Material)	Metode Pembelajaran (Learning Method)	Waktu (Time)	Pengalaman Belajar (Learning Experience)	Kriteria Penilaian (Indicator)	Bobot Nilai (Percentage)
1	2	3	4	5	6	7	8
1-2	Mahasiswa memahami ruang lingkup kimia komputasi dan prinsip pemodelan molekul	Pengantar Kuliah <ul style="list-style-type: none"> • Ruang Lingkup Kimia Komputasi • Fungsi gelombang • Struktur kimia • Koordinat Atom 	<ul style="list-style-type: none"> • Pengampu membahas ruang lingkup kimia komputasi. • Pengampu membahas prinsip pemodelan molekul. 	4 x 50	<ul style="list-style-type: none"> • Membaca buku referensi • Diskusi dalam kelas • Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> • Ketepatan menjelaskan konsep • Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	10
3	Mahasiswa memahami metode penyelesaian fungsi gelombang untuk menentukan beberapa parameter struktur	Pendahuluan Kimia Komputasi <ul style="list-style-type: none"> • Hampiran Born-Oppenheimer • Pendekatan LCAO • Parameter Struktur 	<ul style="list-style-type: none"> • Pengampu menjelaskan prinsip pendekatan Born-Oppenheimer dan LCAO dalam menyelesaikan fungsi gelombang • Pengampu menjelaskan parameter struktur yang dapat ditentukan secara komputasi menggunakan fungsi gelombang 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> • Membaca buku referensi • Diskusi dalam kelas • Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> • Ketepatan menjelaskan konsep • Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5
4	Mahasiswa memahami dan mampu menjelaskan metode kimia komputasi.	Metode Kimia Komputasi <ul style="list-style-type: none"> • Beberapa Metode Kimia Komputasi • Teori Hartree-Fock 	<ul style="list-style-type: none"> • Pengampu menjelaskan metode kimia komputasi sebagai aplikasi dari persamaan gelombang. • Pengampu menjelaskan prinsip dasar Self Consistent Field Theory dalam penentuan energi partikel 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> • Membaca buku referensi • Diskusi dalam kelas • Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> • Ketepatan menjelaskan konsep • Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5
5	Mahasiswa memahami dan mampu menjelaskan konsep mekanika molekul dalam kimia komputasi.	Mekanika Molekul <ul style="list-style-type: none"> • Pengertian Mekanika Molekular • Anatomi Mekanika Molekular • Optimisasi dalam MM • Jenis Medan Gaya 	<ul style="list-style-type: none"> • Pengampu menjelaskan prinsip dasar Mekanika Molekular. • Pengampu menjelaskan beberapa metode dan penerapan Mekanika Molekular 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> • Membaca buku referensi • Diskusi dalam kelas • Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> • Ketepatan menjelaskan konsep • Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5

Pertemuan Ke- (Meeting #)	Kemampuan Akhir yang Diharapkan (Lesson Learning Outcome)	Bahan Kajian (Course Material)	Metode Pembelajaran (Learning Method)	Waktu (Time)	Pengalaman Belajar (Learning Experience)	Kriteria Penilaian (Indicator)	Bobot Nilai (Percentage)
1	2	3	4	5	6	7	8
6	Mahasiswa memahami dan mampu menjelaskan konsep Ab Initio dalam kimia komputasi.	Metode abInitio <ul style="list-style-type: none"> Prinsip Dasar Teori Ab Initio Himpunan Basis Perhitungan Energi Kualitas Hasil Perhitungan Ab Initio 	<ul style="list-style-type: none"> Pengampu menjelaskan prinsip dasar Ab Initio. Pengampu menjelaskan beberapa metode dan penerapan Ab Initio 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Membaca buku referensi Diskusi dalam kelas Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5
7	Mahasiswa memahami dan mampu menjelaskan konsep Semiempiris dalam kimia komputasi.	Metode Semiempiris <ul style="list-style-type: none"> Prinsip Dasar Beberapa metode semiempiris CNDO, INDO, MINDO, AMI, PM3 Kualitas dari Hasil Semiempiris 	<ul style="list-style-type: none"> Pengampu menjelaskan prinsip dasar Semiempiris. Pengampu menjelaskan beberapa metode dan penerapan Semiempiris 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Membaca buku referensi Diskusi dalam kelas Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5
8	Mahasiswa memahami dan mampu menjelaskan konsep korelasi elektron dalam kimia komputasi.	Metode Korelasi Elektron <ul style="list-style-type: none"> Prinsip Dasar Metode Interaksi Konfigurasi (Configuration Interaction, CI) Teori Perturbasi Møller-Plesset MCSCF dan CASSCF Teknik Pemodelan Sistem Kompleks 	<ul style="list-style-type: none"> Pengampu menjelaskan prinsip dasar korelasi elektron. Pengampu menjelaskan beberapa metode dan penerapan korelasi elektron 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Membaca buku referensi Diskusi dalam kelas Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5
9	Mahasiswa memahami dan mampu menjelaskan	Metode Density Fungsional Theory (DFT) <ul style="list-style-type: none"> Teori Dasar 	<ul style="list-style-type: none"> Pengampu menjelaskan prinsip dasar Density Fungsional Theory (DFT). Pengampu menjelaskan 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Membaca buku referensi Diskusi dalam kelas 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep Kemampuan 	10

Pertemuan Ke- (Meeting #)	Kemampuan Akhir yang Diharapkan (Lesson Learning Outcome)	Bahan Kajian (Course Material)	Metode Pembelajaran (Learning Method)	Waktu (Time)	Pengalaman Belajar (Learning Experience)	Kriteria Penilaian (Indicator)	Bobot Nilai (Percentage)
1	2	3	4	5	6	7	8
	konsep Density Fungsional Theory (DFT) dalam kimia komputasi.	<ul style="list-style-type: none"> Perbandingan dengan MO teory Penggunaan metode DFT 	beberapa metode dan penerapan Density Fungsional Theory (DFT)		<ul style="list-style-type: none"> Mengerjakan tugas individu 	komunikasi lisan dan tertulis	
10	Mahasiswa memahami teknik aplikasi kimia komputasi dalam berbagai bidang kimia.	Aplikasi Kimia Komputasi <ul style="list-style-type: none"> Termodinamik Sifat Spektroskopi Perancangan obat Sifat Listrik 	<ul style="list-style-type: none"> Pengampu menjelaskan beberapa aplikasi kimia komputasi yang terkait dengan sifat termodinamika, spektroskopi, sifat listrik, dan aktivitas obat. Pengampu memberikan tugas yang terkait dengan aplikasi kimia komputasi 	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Membaca buku referensi Diskusi dalam kelas Mengerjakan tugas individu 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	5
11-13	Mahasiswa memahami cara kerja program NWChem.	Program Kimia Komputasi NWChem <ul style="list-style-type: none"> Kemampuan NWChem Hasil Perhitungan dengan NWChem Metode Kimia Komputasi Optimasi Struktur Molekul Praktek Penggunaan NWChem Pemodelan Molekul Sederhana Menggunakan Nwchem 	<ul style="list-style-type: none"> Pengampu menjelaskan struktur dan cara kerja program NWChem. Pengampu memberikan contoh penerapan program NWChem. 	6 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Praktikum Analisis Data 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	20
14	Mahasiswa mampu melakukan penelitian	Proyek Penelitian Kimia Komputasi	Pengampu membuka diskusi mengenai tema penelitian yang dapat dikerjakan menggunakan	2 x 50	<ul style="list-style-type: none"> Mini Riset Analisis Data 	<ul style="list-style-type: none"> Ketepatan menjelaskan konsep 	25

Pertemuan Ke- (Meeting #)	Kemampuan Akhir yang Diharapkan (Lesson Learning Outcome)	Bahan Kajian (Course Material)	Metode Pembelajaran (Learning Method)	Waktu (Time)	Pengalaman Belajar (Learning Experience)	Kriteria Penilaian (Indicator)	Bobot Nilai (Percentage)
1	2	3	4	5	6	7	8
	menggunakan metode kimia komputasi		metode kimia komputasi			<ul style="list-style-type: none"> Kemampuan komunikasi lisan dan tertulis 	

Pustaka (References)

Utama : Cramer, C., 2004, *Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models*, 2nd edition, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester

Pendukung : Jensen F, 2007, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd: Chichester

Media Pembelajaran (Learning Media)

<https://ocw.mit.edu/courses/chemistry/>

Otorisasi (Authorized by)

Penyusun RPS (Author)	Koordinator MK (Course Coordinator)	Ketua Program Studi (Head of Department)	Edisi (Version)	Tanggal (Date)
Sudarlin, M.Si.	Didik Krisdiyanto, S.Si., M.Sc.	Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.	2020	1 Feb 2020

KETENTUAN LAIN YANG HARUS DIPENUHI

Yogyakarta ,

- Kehadiran kuliah mahasiswa minimal 75% dari total Tatap Muka.
- Seluruh tugas harus dikumpulkan.
-
-
-
-
-

Perwakilan Mahasiswa/Ketua Kelas

Dosen Pengampu

(.....)
NIM.

(.....)
NIP.