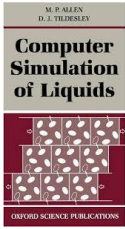
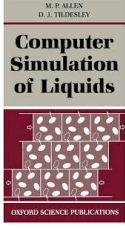


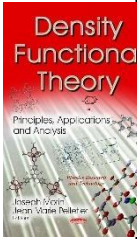
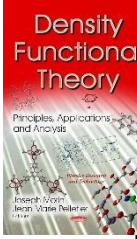
A. Rencana Pembelajaran Semester (RPS)

	UNIVERSITAS TADULAKO FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM JURUSAN KIMIA PRODI KIMIA			N0. Dokumen
RENCANA PEMBELAJARAN SEMESTER (RPS)				
Pengesahan	No. Revisi	Jumlah Hal	Tanggal Penyusunan 10 Januari 2024	
Mata Kuliah (MK) : Kimia Komputasi	Kode Mata Kuliah G04211036	Rumpun MK WAJIB	BOBOT (sks) 2	Semester IV
Program Studi: Kimia Komputasi	Dosen Pengampu/Penanggung Jawab: 1. Ir. Pasjan Satrimafitrah, S.Si., M.Si. Ph.D 2. Firmansyah, S.Si., M.Sc		Koord Prodi Dr. Moh. Mirzan, S.Si., M.Si	
Matakuliah Prasyarat	:Kimia Dasar, Kimia Fisik 1 dan 2, Biokimia Dasar dan Lanjut			
Capaian Pembelajaran Lulusan (CPL)	: (S) Menginternalisasi semangat kemandirian, kejuangan, dan kewirausahaan. [S10]. (P) Menguasai prinsip dasar piranti lunak untuk analisis, sintesis, dan pemodelan molekul pada bidang kimia yang umum atau yang lebih spesifik. [P4]. Menguasai pengetahuan tentang jenis dan prinsip operasional piranti lunak untuk analisis dan interpretasi data pada bidang kimia. [P5]. (KU) Mampu mengambil keputusan secara tepat dalam konteks penyelesaian masalah di bidang keahliannya, berdasarkan hasil analisis informasi dan data. [KU5]. (KK) Mampu menggunakan piranti lunak untuk analisis, sintesis, dan pemodelan molekul, serta untuk analisis dan interpretasi data pada bidang kimia. [KK7].			
Capaian Pembelajaran Matakuliah (CPMK)	1. Menjelaskan secara teoritik model Kimia Komputasi 2. Melakukan analisis, perhitungan dan program sederhana kimia komputasi.			

	3. Mengoperasikan aplikasi terkait Kimia Komputasi. 4. Mampu menyelesaikan berbagai perhitungan kimia menggunakan metode DFT dengan menggunakan berbagai perangkat lunak 5. Menguasai aplikasi chemsketch dan mampu memvisualisasi molekul organik 6. Menguasai pencarian informasi biomolekul secara online dan melakukan BLAST serta analisis filogenetik 7. Memahami dan mengaplikasikan dasar-dasar docking molecular menggunakan aplikasi freeware.
Deskripsi Matakuliah	: MK Kimia Komputasi membahas tentang identifikasi dan pendekatan perhitungan kimia teoritis, analisis senyawa kimia menggunakan software kimia komputasi, dan aplikasi software komputasi dalam perhitungan dan pemodelan kimia.
Bahan Kajian	PB-1 Pemanfaatan berbagai aplikasi komputer untuk <i>molecular drawing</i> dan melakukan optimasi molekul secara sederhana (<i>molecular mechanic</i>) PB-2 Pemanfaatan berbagai aplikasi komputer berbasis DFT untuk optimasi molekul dengan berbagai himpunan basis PB-3 Pemanfaatan berbagai aplikasi komputer berbasis DFT untuk memprediksikan sifat-sifat termodinamika, spektrum dan simulasi pada berbagai jenis pelarut PB-4 Visualisasi molekul organik 2D dan 3D, perhitungan sifat makroskopik, representasi resonansi dan isomer, visualisasi reaksi kimia, presentasi dan pembuatan grafik PB-5 Basis Data NCBI, Pemahaman GenBank Format, eksplorasi sekuen DNA, RNA, dan Protein, Penggunaan BLAST, analisis homologi dan filogenetik, aplikasi BLAST dalam penelitian dan tugas akhir PB-6 Pencarian data struktur biomolekul protein, interpretasi format data PDB, Analisis Interaksi Molekul dalam Struktur Biomolekul PB-7 Konsep docking molekuler, teori energi afinitas dan skoring, analisis interaksi protein-ligand

Pert Ke	Kemampuan Yang Diharapkan (SUB-CPMK)	Indikator	Materi Pembelajaran	Pendekatan/ Model/ Bentuk dan Metode	Media Pemb	Pustaka	Waktu (Menit)	Pengalaman Belajar	Bobot Pen
---------	--------------------------------------	-----------	---------------------	--------------------------------------	------------	---------	---------------	--------------------	-----------

(1)	(2)	(3)	(4)	Luring (5)	Daring (6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)
1	Sub-CPMK-1: Mampu memahami konsep dasar kimia komputasi	Ketepatan menjelaskan prinsip-prinsip dasar kimia komputasi dan teori yang mendasarinya	Konsep Dasar Kimia Komputasi: Pengertian dan teori yang mendasari konsep kimia komputasi	• Kuliah; • Diskusi; • Tugas-1: Menganalisis teori-teori yang mendasari perhitungan kimia komputasi	• Kuliah daring; • Diskusi; • eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my/	Pre-sentasi slide, buku teks, video pembelajaran, diagram, mind maps.	[1] hal. 1-18 	Kuliah; • Diskusi; [PB: 1x(2x50”)] • Tugas-1: 1x (2x60”)	Mahasiswa membaca artikel tentang konsep dasar dalam topik pembelajaran. Mahasiswa diberikan data yang berisi informasi terkait topik pembelajaran.	10
2-3	Sub-CPMK-2: Mampu memanfaatkan berbagai aplikasi komputer untuk <i>molecular drawing</i> dan melakukan optimasi molekul secara sederhana	Ketepatan menganalisis karakteristik berbagai aplikasi komputer untuk <i>molecular drawing</i> ; Ketepatan mengevaluasi tahapan metode optimasi molekul secara sederhana	Aplikasi <i>molecular drawing</i>: 1. Avogadro 2. Jmol 3. Piranti lunak lain yang berifat <i>open-source</i>	• Kuliah; • Diskusi; • Tugas-2: Menyusun tahapan/metode menggambar molekul diikuti dengan optimasi molekul menggunakan metode <i>molecular mechanics</i> secara sederhana	• Kuliah daring; • Diskusi; • eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my/	Pre-sentasi slide, buku teks, video pembelajaran, diagram, mind maps.	[1] hal. 20-32 	• Kuliah; • Diskusi; [PB: 2x(2x50”)] • Tugas-2: 2x (2x60”)	Mahasiswa mengambil bagian dan terlibat dalam proses menggambar dan simulasi Mahasiswa terlibat dalam simulasi	10

4-5	Sub-CPMK-3: Mampu memanfaatkan berbagai aplikasi komputer berbasis DFT untuk optimasi molekul dengan berbagai himpunan basis	Ketepatan menggunakan <i>script</i> untuk metode optimasi Ketepatan pemilihan himpunan basis dalam hubungannya dengan proses optimasi	Metode DFT untuk optimasi struktur: 1. Metode DFT 2. Level of Theory 3. Himpunan Basis Piranti lunak berbasis DFT (ORCA/CP2K/Quantum Espresso/piranti lunak lain yang bersifat <i>open source</i>)	Kuliah; Diskusi; Tugas-3: Menyusun tahapan/metode optimasi geometri menggunakan piranti lunak berbasis DFT serta menginterpretasikan sifat-sifat molekul hasil optimasi	- Kuliah daring; - Diskusi; - eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my	Jurnal ilmiah, Pre-sentasi slide, buku teks, video pembelajaran, diagram, mind maps.	[2] hal. 1-50 	Kuliah; Diskusi; [PB: 2x(2x50”)] Tugas-3: 2x (2x60”)]	Mahasiswa belajar mengenai dasar-dasar teori fungsi kerapatan elektron Mahasiswa terlibat dalam simulasi	15
6-7	Sub-CPMK-4: Mampu memanfaatkan berbagai aplikasi komputer berbasis DFT untuk memprediksi sifat termokimia, spektrum FTIR dan simulasi pada berbagai sistem pelarut	Keakuratan dalam memprediksi sifat termokimia sistem dari reaksi sederhana Kekauratan dalam memprediksi an dan menginterpretasikan spektrum FTIR dan	Aplikasi DFT: 1. Simulasi termokimia 2. mode vibrasi 3. algoritma solvasi Piranti lunak berbasis DFT (ORCA/CP2K/Quantum Espresso/piranti lunak lain yang bersifat <i>open source</i>)	Kuliah; Diskusi; Tugas-4: Melakukan simulasi mengenai prediksi sifat termokimia, spektrum FTIR, interpretasi vibrasi menggunakan	- Kuliah daring; - Diskusi; - eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my	Jurnal ilmiah, Pre-sentasi slide, buku teks, video pembelajaran, diagram, mind maps.	[2] hal. 95-120 	Kuliah; Diskusi; [PB: 2x(2x50”)] Tugas-4: 2x (2x60”)]	Mahasiswa belajar mengenai aplikasi teori fungsi kerapatan elektron Mahasiswa terlibat dalam simulasi	15

		mode vibrasinya Memodelkan mode solvasi dengan menggunakan berbagai algoritma sederhana		n algoritma solvasi						
8	Ujian Tengah Semester (UTS)									
9	Sub-CPMK 5: Mampu melakukan visualisasi molekul organic, dan kalkulasi sifat mikroskopik,	Ketepatan dalam visualisasi 2D dan 3D, pembuatan struktur molekul Akurasi Perhitungan sifat seperti massa molekul, kepolaran, dan titik didih	Aplikasi Chemsketch: 1. pengenalan interface 2. menggambar molekul 3. menggambar reaksi	Kuliah; Diskusi; Tugas-5: Menggambar molekul sterol, flavonoid, alkaloid dan menentukan sifat mikroskopik nya	• Kuliah • Diskusi • Praktek menggun akan laptop • eLearning : Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my	Presen tasi, slide, buku teks, video pembe lajaran	https://youtu.be/PiyX2JeEXaC?si=jHAI9mhseNHwe7l0 	• Kuliah; • Diskusi; [PB: 2x(2x50'')] • Tugas-5: 2x (2x60'')]	Mahasiswa belajar mengenai aplikasi Chemsketch Mahasiswa terlibat dalam simulasi	10
10-1 1	Sub-CPMK 6 Mahasiswa mampu menjelaskan konsep dasar dari NCBI BLAST, termasuk jenis-jenis	Ketepatan dalam mengakses data bank Gen, DNA,	BLAST NCBI 1. pengenalan interface 2. mencari sekuen gen,	Kuliah; Diskusi; Tugas-6: Mencari gen pengkode myoglobin, menentukan	• Kuliah • Diskusi • Praktek menggun akan laptop	Presen tasi, slide, video pembe lajaran	 https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi	• Kuliah; • Diskusi; [PB: 2x(2x50'')] • Tugas-6: 2x (2x60'')]	Mahasiswa belajar menguasai akses NCBI dan melakukan BLAST	15

	BLAST (BLASTn, BLASTp, BLASTx, dan PSI-BLAST), serta bagaimana algoritma BLAST bekerja dalam mencari kemiripan urutan.	protein dan lainnya Mempau melakukan analisis similaritas DNA dan protein menggunakan BLAST	genom, dan asam amino 3. melakukan analisis BLAST	jumlah pasang basa DNAny, menentukan urutan asam aminonya Melakukan analisis kemiripan myoglobin manusia dengan organisme lainnya menggunakan BLAST	eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my				Mahasiswa terlibat dalam simulasi	
12-13	Sub-CPMK 6 Mempu membuat pohon filogenetik menggunakan aplikasi MEGA untuk memahami evolusi antar molekul atau organisme secara sistematis	Ketepatan dalam menjelaskan konsep dasar filogenetik Ketepatan dalam menggunakan aplikasi MEGA dalam melakukan analisis sekuen Ketepatan dalam	1. pengantar filogenetika 2. Metode jarak (Distance-based methods) Metode karakter (Character-based methods). pengenalan interface 3. pengenalan interface MEGA 4. Analisis dan Interpretasi Pohon Filogenetik	Tugas-7 membandingkan urutan gen myoglobin manusia dengan beberapa spesies lain untuk memahami hubungan evolusionernya menggunakan MEGA	• Kuliah • Diskusi • Praktek menggunakan laptop eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my	Presensi, slide, video pembelajaran	 https://www.megasoftware.net/videos https://www.megasoftware.net/resources	• Kuliah; • Diskusi; [PB: 2x(2x50")] • Tugas-7: 2x (2x60")]	Mahasiswa belajar menguasai fitur dalam aplikasi MEGA Mahasiswa terlibat dalam simulasi	10

		menginterpre- tasi hasil pohon filogenetik untuk menemukan hubungan evolusi antar molekul atau organisme								
14-1 5	Sub-CPMK 7 Mampu menjelaskan konsep dasar docking molekuler Mampu menggunakan perangkat lunak PyRx dan Biovia Mampu menganalisis dan menginterpretasika n data hasil docking	Ketepatan dalam menjelaskan aplikasi docking molekuler dalam penemuan obat dan perancangan obat berbasis struktur. Ketepatan dalam mensimulasi kan interaksi antara ligan dan target protein.	1. Pengantar docking molekuler 2. Teori dan prinsip dasar docking molekuler 3. Metode docking molekuler 4. Analisis hasil docking 5. Studi kasus	Tugas 8 STUDI KASUS Studi Interaksi Alami - Curcumin sebagai Inhibitor Alzheimer (Target AChE)	• Kuliah • Diskusi • Praktek menggun akan laptop eLearning: Layanan LMS FMIPA https://isst.fmipa.untad.ac.id/moodle/my	Presen tasi, slide, video pembe lajaran	López-Ló pez, E., & López-Val lejo, F. (2017). <i>Curcumin as a Potential Lead Compoun d against Neurodeg enerative Diseases: A Review of Its Docking Studies. Journal of Biomolec</i>	• Kuliah; • Diskusi; [PB: 2x(2x50”)] • Tugas-8: 2x (2x60”)]	Mahasiswa belajar menguasai fitur dalam aplikasi PyRx dan Biovia Studio Mahasiswa terlibat dalam simulasi	15

		Ketepatan dalam menganalisis parameter hasil docking seperti energi ikatan (binding affinity), konformasi optimal, dan posisi interaksi ligan-target. Ketepatan dalam mengidentifikasi interaksi spesifik seperti ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, dan gaya van der Waals dalam hasil docking.					ular Structure and Dynamics , 35(11), 2414-2422.			
16	Ujian Akhir Semester									

Daftar Referensi:

- [1] Allen, M.P., and Tildesly, D.J. New York: Oxford University Press; 1987
- [2] Morin, J. and Pelletier, J.M. New York: Nova Publishers; 2013
- [3] Ibrahim, H. (2013). ACD/ChemSketch and its applications: A tutorial review. *Journal of Chemical Education*, 90(7), 947-948.
- [4] Mount, D. W. (2004). *Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis* (2nd ed.). Cold Spring Harbor Laboratory Press.
- [5]. Tamura, K., Stecher, G., Kumar, S. (2021). MEGA11: Molecular Evolutionary Genetics Analysis Version 11. *Molecular Biology and Evolution*, 38(7), 3022–3027.
- [6] Leach, A. R. (2001). *Molecular Modeling: Principles and Applications*.
- [7]. López-López, E., & López-Vallejo, F. (2017). Curcumin as a Potential Lead Compound against Neurodegenerative Diseases: A Review of Its Docking Studies. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 35(11), 2414-2422

B. PENILAIAN:

1. Test Formatif (TF)

Pert Ke	Indikator	Penilaian			Bobot
		Strategi	Bentuk	Instrumen	
9	Mahasiswa Mampu melakukan visualisasi molekul organik, dan kalkulasi sifat mikroskopik,	Tes kinerja (Tugas Mandiri)	Penilaian Produk	Lembar Penilaian	10
10-11	Mahasiswa mampu menjelaskan konsep dasar	Tes kinerja	Penilaian Produk hasil analisis BLAST	Lembar Penilaian Produk	15

	dari NCBI BLAST, termasuk jenis-jenis BLAST (BLASTn, BLASTp, BLASTx, dan PSI-BLAST), serta bagaimana algoritma BLAST bekerja dalam mencari kemiripan urutan.				
12-13	Mahasiswa mampu membuat pohon filogenetik menggunakan aplikasi MEGA untuk memahami evolusi antar molekul atau organisme	Tes tertulis/Tes kinerja	Penilaian Produk analisis filogenetik	Lembar Penilaian Produk	

	secara sistematis				
--	-------------------	--	--	--	--

2. Tugas mahasiswa (T) Project Based Learning

Pertemuan-ke	Bahan Kajian/Materi Pembelajaran	Tugas		Waktu	Hasil Tugas dan Kriteria Penilaian
10-13	Pokok Bahasan 5 Basis Data NCBI, Pemahaman GenBank Format, eksplorasi sekuen DNA, RNA, dan Protein, Penggunaan BLAST, analisis homologi dan filogenetik, aplikasi BLAST dalam penelitian dan tugas akhir	Mandiri	• Pemilihan Gen atau Protein Target • Pencarian Homologi dengan NCBI BLAST • Interpretasi dan Analisis Hasil BLAST • Analisis Filogenetik Sederhana • Penyusunan Laporan Proyek	3x120"	Ketepatan dalam melakukan analisis BLAST dan membuat pohon filogenik sederhana
		Terstruktur (Presentasi)	BLAST analysis Filogenetik Tree	50	1. Ketepatan dalam memaparkan hasil proyek. Ketepatan dalam menjawab pertanyaan. 2. Ketepatan dalam memahami materi saat menjawab pertanyaan.
14-15	Pokok Bahasan-7 Konsep docking molekuler, teori energi afinitas dan skoring, analisis interaksi protein-ligand	Mandiri	• Pencarian literatur dan pemahaman teori • Persiapan struktur ligand dan reseptor • Simulasi molecular docking	3x120"	1. Pemahaman Latar Belakang dan Literatur 2. Prosedur dan Akurasi Persiapan Molekul 3. Proses dan Parameter Molecular Docking

			• Analisis hasil docking • Penyusunan laporan ilmiah		4. Analisis dan Visualisasi Hasil Docking 5. Kualitas Laporan Ilmiah
		Terstruktur (Presentasi)	• Presentasi Proyek: Slide presentasi hasil proyek untuk dipresentasikan kepada dosen dan rekan mahasiswa. • Visualisasi Interaksi: Gambar atau diagram yang menunjukkan interaksi kunci kurkumin dengan AChE.	50	1. Ketepatan dalam memaparkan hasil proyek. Ketepatan dalam menjawab pertanyaan. 2. Ketepatan dalam memahami materi saat menjawab pertanyaan.

3. Ujian Tengah Semester(UTS)

No Soal	Penilaian			Bobot
	Strategi	Bentuk	Instrumen	
1	Tes tertulis	Uraian	Lembar Penilaian Hasil Ujian	15

4. Ujian Akhir Semester (UAS)

No Soal	Penilaian			Bobot
	Strategi	Bentuk	Instrumen	
1	Tes Kinerja	Penilaian Produk	Lembar Penilaian Produk	15

5. Jenis tugas yang diberikan dapat dalam bentuk: *Book Review, Analisis Jurnal, Riset Kecil, Proyek, Observasi lapangan, Menulis makalah, Latihan*

6. Sifat Tugas: Mandiri atau Kelompok

7. Untuk matakuliah laboratorium/bengkel dan lapangan tidak ada tugas mandiri dan tugas terstruktur.

8. Bobot Penilaian

- (1) Bobot Test Formatif (TF)/Case Method 32%
- (2) Bobot Tugas (T)/Team based project 38%
- (3) Bobot Nilai Ujian Tengah Semester (UTS) 15%
- (4) Bobot Nilai Ujian Akhir Semester (UAS) 15%
- (5) Nilai Akhir $32\% + 38\% + 15\% + 15\%$

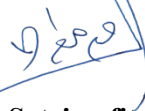
Pada hari ini Rabu tanggal 10 bulan Januari tahun 2024 Rencana Pembelajaran Semester Mata Kuliah Kimia Komputasi Program Studi Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam telah diverifikasi oleh Ketua Ketua Program Studi.

Mengetahui
Ketua Program Studi Kimia



Dr. Mohammad Mirzan, S.Si., M.Si
NIP. 197105262001121002

Palu, 10 Januari 2024
Dosen Penanggung Jawab MK



Pasjan Satrimafitrah
NIP: 198205152006041003