ISBN 978-602-73159-4-5

Chem Office

Chem Draw & Chem 3D

Oleh :

- 1. Widiastuti Agustina E. S., S.Si., M.Si.
- 2. Dr. Elfi Susanti V. H., M. Si.

 \mathbf{CO}

- 3. Dr. paed. Nurma Yunita I., M.Si., M.Sc
- 4. Dr. Sri Yamtinah, S. Pd., M.Pd.

Program Studi Pendidikan Kimia Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan (FKIP) Universitas Sebelas Maret 2018



Diterbitkan oleh : Program Studi Pendidikan Kimia Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan (FKIP) Universitas Sebelas Maret Surakarta Jl. Ir. Sutami 36 A Kentingan Surakarta – Jawa Tengah 57126

ISBN 978-602-73159-4-5



MODUL

CHEM OFFICE (CHEM DRAW & CHEM 3D)

Editor :

- 1. Wahidah Estiningrum, S.Pd.
- 2. Yuni Hidayani, S.Pd.

Desain Cover & Setting Lay Out :

- 1. Wahidah Estiningrum, S.Pd.
- 2. Yuni Hidayani, S.Pd.

ISBN: 978-602-73159-4-5

Diterbitkan oleh :

Program Studi Pendidikan Kimia Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan (FKIP) Universitas Sebelas Maret Surakarta Jl. Ir. Sutami 36 A Kentingan Surakarta – Jawa Tengah 57126

KATA PENGANTAR

ChemOffice merupakan salah satu aplikasi yang dapat digunakan dalam bidang kimia. Beberapa fungsi dari aplikasi tersebut antara lain adalah untuk membuat struktur kimia, membuat nama kimia dari struktur kimia, membuat struktur streokimia dari nama kimia, menghitung rumus molekul dan berat molekul serta perkiraan spektrum NMR dari struktur kimia. Materi *ChemOffice* dibuat dalam bentuk modul untuk membantu peserta pelatihan dalam memahami dan melakukan praktek penggunaan aplikasi tersebut secara mandiri.

Modul pelatihan ini berisi tentang materi *ChemOffice*, baik *ChemDraw* maupun *Chem3D* beserta tutorial cara penggunaannya. Pada setiap kegiatan dilengkapi dengan contoh dan latihan untuk mengukur kemampuan peserta pelatihan dalam memahami materi. Mudah-mudahan modul ini dapat bermanfaat dalam mendukung pemahaman peserta pelatihan mengenai apikasi *ChemOffice*.

Surakarta, 20 Juni 2018 Penyusun

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR	ii
DAFTAR ISI	iii
PENDAHULUAN	iv
A. PENGENALAN CHEM OFFICE	1
B. CARA MENGINSTAL APLIKASI CHEM OFFICE 12.0	2
C. TAMPILAN CHEM DRAW DAN CHEM 3D 12.0	2
a. Bagian-bagian Chem Draw Ultra 12.0	2
b. Bagian-bagian Chem 3D 12.0	4
D. PEMODELAN SENYAWA KIMIA DENGAN CHEM DRAW DAN CHEM	
3D 12.0	5
a. Model 2 Dimensi	5
b. Model 3 Dimensi dengan Chem 3D	15
E. STEREOKIMIA	16
F. ANALISIS MOLEKUL	19
G. PREDIKSI H-NMR	21
DAFTAR PUSTAKA	22

PENDAHULUAN

I. TUJUAN PENULISAN MODUL

Penulisan modul ini bertujuan untuk :

- 1. Memberikan informasi kepada peserta diklat mengenai kegunaan Chem Office (Chem Draw dan Chem 3D) dalam pembelajaran kimia.
- 2. Mempermudah para guru membuat pemodelan struktur senyawa kimia hidrokarbon secara 2 dimensi maupun 3 dimensi untuk menunjang pembelajaran kimia di kelas.

II. PETUNJUK PENGGUNAAN MODUL

- 1. Baca modul dengan seksama.
- 2. Lakukan instalasi ChemOffice 12.0 pada PC anda, sesuai instruksi yang ada di modul.
- 3. Ikuti panduan yang ada di modul untuk membuat struktur senyawa hidrokarbon yang meliputi struktur 2D dan 3D, pengubahan nama IUPAC menjadi rumus struktur, pengubahan rumus struktur menjadi nama IUPAC, dan stereokimia senyawa kiral.
- 4. Kerjakan Latihan 1-5.

CHEM OFFICE (CHEM DRAW & CHEM 3D) PRO 12.0

Pengenalan Chem Office

<u>Tujuan</u> :

Peserta diklat dapat memahami penggunaan Chem Office 12.0 (Chem Draw dan Chem 3D) dalam pembelajaran kimia.

Chem Office merupakan salah satu software yang digunakan untuk membuat struktur kimia dengan mudah. Sofware ini banyak memilki kelebihan untuk mempermudah kita menggambar rumus kimia. Untuk menggambar rumus molekul kimia Chem Office menyertakan Chem Draw dan Chem 3D.

Chem Draw merupakan salah satu program aplikasi dari Chem Office, untuk menggambar struktur 2D dalam bidang ilmu kimia, terutama kimia organik, biokimia, dan polimer. Software ini dapat membantu kita dalam menggambar struktur kimia dengan berbagai fasilitasnya. Sementara itu, pemodelan 3D struktur senyawa kimia dapat dibuat melalui Chem 3D.

Chem Draw merupakan software kimia dari produk CambridgeSoft.com. Chem Draw memiliki banyak fungsi, diantaranya membuat nama dan struktur senyawa, membuat struktur streokimia dengan benar dari nama kimia, menghitung rumus molekul dan berat molekul, dan mendapatkan nama IUPAC dengan akurat dari struktur. Perkiraan spektra NMR dari struktur suatu senyawa dengan atom langsung dengan korelasi spektral. Selain itu, Chem Draw dilengkapi dengan peringatan jika terjadi kesalahan dalam pembuatan struktur kimia. Peringatan tersebut biasanya berwarna merah dan mengelilingi bagian struktur yang salah.

Software Chem Draw ini sangat bermanfaat, khususnya bagi kita yang keseharian berkecimpung di bidang kimia. Program gratis ini dapat digunakan untuk menggambar berbagi bentuk atau rumus molekul senyawa yang lebih mudah jika dibandingkan menggambar melalui Ms. Word yang rumit. Pemodelan struktur senyawa kimia khususnya hidrokarbon dapat digunakan guru untuk menunjang pembelajaran kimia di kelas.

Cara Menginstal Aplikasi Chem Office 12.0

Tujuan :

Peserta diklat dapat melakukan instalasi Chem Office 12.0.

Langkah menginstall aplikasi ChemOffice 12.0 adalah sebagai berikut:

- 1. Buka file ChemOffice12.0.exe (Windows)
- 2. Klik install.
- 3. Pada jendela *CambridgeSoft Software Activation* masukan informasi yang dibutuhkan dan klik tanda silang.
- 4. Pada jendela wizard CambridgeSoft ChemBio3D Ultra 12.0 klik Next >
- 5. Pada jendela persetujuan lisensi, pilih *I accept the terms in this license agreement*, dan klik *Next* >
- 6. Pada jendela *Select Type*, pilih Default setup dan klik *Next* >
- 7. Pada Jendela *Select Features*, klik *Next* >
- 8. Pada jendela *Select Features*, pilih *phyton* dan klik *Next* >
- 9. Pada jendela SQL Server Instance, pilih "yess install" klik Next>
- 10. Pada jendela Installation Complete dan klik Finish.
- 11. Setelah berhasil menginstal, aplikasi Chem Draw Ultra 12.0 dan Chem3D 12.0 akan tersedia pada PC anda.

Tampilan Chem Draw & Chem 3D 12.0

<u>Tujuan</u> :

С

Peserta diklat dapat mengenali bagian-bagian Chem Draw dan Chem 3D.

a. Bagian-bagian Chem Draw Ultra 12.0

Chem Draw terdapat beberapa menu utama diantaranya adalah menu bar, title bar, tool bar, tool pallete, drawing area dan scroll bar.

Modul ChemOffice (Chem Draw & Chem 3D)-UNS 2018

В

Tampilan layar dan menu pada Chem Draw Ultra 12.0 sebagai berikut :



Berikut penjelasan dari bagian-bagian Chem Draw:

1. Title Bar

Bagian dari layar Chem Draw ultra untuk menampilkan nama dokumen/ file yang sedang dijalankan.

2. Menu Bar

Sebuah strip horizontal yang berisi daftar menu yang tersedia pada Chem Draw ultra yang meliputi menu *File, Edit, View, Object, Structure, Text, Curves, Color, Online, Window*, dan *Help*.

3. Tool Bar

Bagian dari layar Chem Draw ultra yang memberikan akses lebih cepat kepada user untuk menjalankan perintah, seperti membuat file baru, membuka file, menyimpan, mencetak dokumen, membatalkan perintah, mengembalikan perintah yang dibatalkan, memindahkan object ke arah lain, menyalin object, menempelkan object yang sebelumnya telah di salin atau dipindahkan, memperbesar dan memperkecil suatu object.

4. Tools Palette

Sebuah strip vertikal yang digunakan untuk menggambar struktur, termasuk menyeleksi object dan menggambarkan ikatan kimia.

Berikut tampilan dari tool pallete :

-	-	
lasso	RIA	marquee
stucture perspective	€ ¥/2	fragmentation tools
solid bond	10	eraser
multiple bond	A	text
dashed bond	·. 50	pen tools
hashed bond	111, +	arrow
hashed wedged bond	14 8.	orbital tools
bold bond	NB	drawing tools
wedged bond	11	bracket tools
hollow wedged bond	Ъ⊙,	chemichal symbol
weavy bond	2 A+A	query tools
advanced tools	⊞ 🗄	
chain tolls	~? 留	templates
cyclopropane	$\triangleright \Box$	cyclobutane ring
cyclopentane	00	cyclohexane ring
cycloheptane	00	cyclooctane ring
chair cyclohexane	$\otimes \otimes$	chair cyclohexane
cyclopentadiene	QQ	benzene

5. Drawing Area

Tempat untuk menampilkan gambar, menggambar, dan mengedit gambar struktur senyawa, serta memberi nama suatu senyawa.

6. Scroll Bars

Bagian dari layar Chem Draw ultra untuk menggeser lembar kerja secara vertikal dan horizontal.

b. Bagian-bagian Chem3D 12.0

Tampilan layar dan menu pada Chem Draw Ultra 12.0 sebagai berikut :



Modul ChemOffice (Chem Draw & Chem 3D)-UNS 2018

Pemodelan struktur senyawa kimia melalui Chem3D, dibuat melalui ChemDraw dengan menampilkan jendela Chem Draw terlebih dahulu.

D Pemodelan Senyawa Kimia dengan Chem Draw dan Chem 3D 12.0

<u>Tujuan</u> :

- 1. Peserta diklat dapat mengubah nama IUPAC senyawa hidrokarbon ke dalam rumus struktur 2 dimensi menggunakan Chem Draw.
- 2. Peserta diklat dapat menggambarkan struktur 2 dimensi senyawa hidrokarbon menggunakan Chem Draw.
- 3. Peserta diklat dapat menggambarkan struktur 2 dimensi senyawa benzene dan turunannya menggunakan Chem Draw.
- 4. Peserta diklat dapat menggambarkan struktur 3 dimensi senyawa hidrokarbon menggunakan Chem Draw dan Chem 3D.
- 5. Peserta diklat dapat mengubah rumus struktur menjadi nama IUPAC senyawa hidrokarbon menggunakan Chem Draw.

a. Model 2 Dimensi

- Langkah-langkah menggambar stuktur senyawa alkana dan turunannya dengan Chem Draw Ultra 12.0 :
- 1. Buka aplikasi Chem Draw ultra 12.0
- 2. Klik '*structure*' pada menu bar, lalu pilih '*convert name to structure*' atau tekan pada keyboard '*shift+ctrl+N*'

💿 Chen	nDraw U	lltra - [l	Untitled [Document-1]	- I ×
🗐 File	Edit	View	Object	Structure Text Curves Color Online Window Help	- 8 ×
	- 🗐	<u>_</u>	2 0	Atom Properties	
	-		_	Bond Properties	
Tool	s 🔳		<u> </u>	Bracket Properties	
FR				Check Structure	-
9	MW A			Clean Up Structure Shift+Ctrl+K	
	1			Clean Up Reaction Shift+Ctrl+X	
	~ I			Expand Label	
	. A			Contract Label	
1	52			Expand Generic Structure	
144	->			Add Multi-Center Attachment	
14	•			Add Variable Attachment	
				R-Logic Query	
	ЧI			Add 3D Property	
	[]			Enhanced Stereochemistry	
	• •			Map Reaction Atoms	
22	A+A			Clear Reaction Map	
				Analyze Stoichiometry	
Ť,				Predict 1H-NMR Shifts	
~	. LÕI			Predict 13C-NMR Shifts	
\triangleright				Make Spectrum-Structure Assignment	
10	0			Define Nickname	
Ger 🦳	Ó	ucture o	orrespon	Convert Name to Structure Shift+ Ctrl+ N	
				Convert Structure to Name Alte Ctde N	1:36 PM

3. Ketikkan nama IUPAC senyawa dalam bahasa inggris pada kotak dialog

D Chem	Draw U	ltra - [l	Untitled E	ocument-	1]					-	-		-	100					8
🔊 File	Edit	View	Object	Structure	Text	Curves	Color	Online	Wind	low H	lelp								- 8 ×
		6	<mark>?</mark> ю	• *	8	100)%	- 9	٩	* 1									
Tool	5		Ŧ		_		30	В	Ι	<u>U</u> ci	I ₂ X ₂	X ²	L						
R													-42						-
۲	MW/MS																		
\mathbf{i}	1																		
•	A					ſ	Insert Stri	ucture						l	×	1			
1.	52					1	Insert S	tructure v	hose n	ame is:									
1111	->						2-hydr	oxv-3-me	thvl-1-o	entene									
144	8.																		
	밋						I ✓ Past	e name b	elow str	ucture		C	ж	Cano	el				
	[]					U	_	_	_	_						J			
1	æ																		

4. Klik '*OK*'

回 ChemDra	w Ultra - [Untitle	ed Document-1	.*]						
🔊 File Ed	dit View Obj	ect Structure	Text Curves	Color Onlin	e Window	Help			_ 8 ×
🗋 🗁 I	8 🎒 📍	n 🗠 🏌	la 📑 10)% 🔽 🔇	, 🔍 🔬	- 👘			
Tools :	=	•	• = =	■ B	<u>Ι</u> <u>U</u>	CH ₂ X ₂ X ²	■,		
R []	N I								<u> </u>
الا 😌 🕅									
$\searrow 0$	2								
📃 📐 A	X								
1.5	<u>2</u>					1			
$(u_{ij} \rightarrow$						рн	_		_
144	3.								
	ן ו					\searrow			
- 🔪 [1								
> €	2				2-hydroxy	-3-methyl-1-	pentene		
2 04									

5. Klik 'file' lalu 'save as' pada menu bar untuk menyimpan.

Struktur senyawa kimia juga dapat digambar secara manual melalui aplikasi ini dengan cara :

1. Buka aplikasi Chem Draw Ultra 12.0, klik '*solid bond*' untuk membuat ikatan dan pindahkan kursor pada bidang kerja.



Modul ChemOffice (Chem Draw & Chem 3D)-UNS 2018

2. Arahkan kursor pada ujung garis hingga muncul kotak biru, lalu drag hingga membentuk garis (ikatan yang diinginkan).



3. Beri nama IUPAC stuktur yang telah dibuat dengan cara blok struktur menggunakan *'marquee'* pada *'tools pallete'*, lalu klik *'convert structure to name'* pada menu



Nama struktur senyawa yang dibuat adalah :



4. Jika ingin dirubah menjadi senyawa alkena, letakkan kursor antara C2-C3, klik kanan, pilih '*double*' lalu '*plain*', maka strukturnya akan berubah menjadi berikut :



5. Jika ingin dirubah menjadi senyawa alkuna, letakkan kursor antara C5-C6, klik kanan, pilih '*triple*' lalu '*plain*'.

OhemDraw Ultra - [Untitled Document-1 *]		
File Edit View Object Structure Text O	urves Color Online Window Help	_ 8 ×
🗋 🍃 🖶 🍠 📍 🕫 🖌 🖻 🛱	, 100% 🔽 🔍 🔍 🐘 🗸	
	$\equiv \equiv B I \underline{U} CH_2 X_2 X^2$	
	Single Double Triple Quadruple Query	A
ChemDraw Ultra - [Untitled Document-1 *]		- 0 - X -
File Edit View Object Structure Text (urves Color Online Window Help	
	100% 🔽 🔍 🔍 📖 🗸	
	$\equiv \equiv B I \underline{U} CH_2 X_2 X_1^{\dagger}$	
		-

6. Untuk mengecek struktur yang telah dibuat sudah benar, blok struktur dengan "*marquee*", klik kanan, kemudian pilih '*molecule*' lalu '*clean up structure*'. Hasil clean up structure sebagai berikut :

1					\mathcal{O}														
💿 CI	hem[Draw U	ltra - (l	Untitled D	Document-1	[*]													
0	File	Edit	View	Object	Structure	Text	Curves	Color	Online	Windo	v He	p						_ 8 ×	
		H	4	? n		12	100	%	- 🔍	۹ 🛛	; 📾	\checkmark							
				Ŧ		Ŧ			В	<i>Ι</i> <u>υ</u>	CH ₂	\mathbf{X}_1	\mathbf{X}^2	Ξ,					
	T.					/		\checkmark	//	ļ								<u>ـ</u>	

7. Klik '*save as*' pada menu '*file*' untuk menyimpan.

8. Jika gambar, ingin dipindahkan ke *Ms. Word*, blok gambar dengan "*marquee*", klik kanan lalu klik "*copy*". Kemudian "*paste* (*ctrl*+*V*)" di lembar Ms. Word.

Jika struktur kimia yang akan digambar dengan menampilkan atom yang terlibat dalam ikatan, bisa dilakukan dengan cara berikut :

- 1. Buka aplikasi Chem Draw ultra 12.0
- 2. Misalkan kita akan menggambar senyawa asam-2,3-dimetilpentanoat, klik '*solid bond*' pada '*tools pallete*'. Lalu klik dan drag pada layar kerja untuk membuat ikatan tunggal



3. Klik '*text*' pada '*tools pallete*' lalu klik persegi berwarna biru pada ujung ikatan tunggal pada layar kerja dan ketikkan ' CH_3 '.



4. Klik kembali '*text*' pada tanda biru ujung ikatan



Modul ChemOffice (Chem Draw & Chem 3D)-UNS 2018

Ketikkan 'CH₂'

🙃 Che	mDraw	Ultra - [Untitled [ocument	-3 *]										
👰 Fil	e Edit	View	Object	Structu	e Text	Curves	Color (Online	Win	dow	Help	D			
	- 8	4	? 🔊	2	h	100	% 🔽] 🔍	٩	R		\checkmark			
Тос	ols 📃	1	•	10	•	E≡	∃ ■	В	I	U	CH ₂	\mathbf{X}_2	\mathbf{X}^2		
ક્રા															
9) MW MW														
1	A				н	l₃C	CH2								
×.	. 50														

5. Klik 'solid bond' kembali pada 'tools pallete' untuk membuat ikatan tunggal
ChemDraw Ultra - [Untitled Document-3 *]



6. Lanjutkan seperti gambar senyawa yang akan dibuat. Klik '*multiple bond*' untuk membuat ikatan rangkap, lalu klik pada karbon yang akan diberi ikatan rangkap.



7. Klik '*text*' untuk melengkapi atom oksigen pada ujung ikatan rangkap.

OhemDraw Ultra - [Untitled Document-3 *]	- 0 <u>×</u> ^
河 File Edit View Object Structure Text Curves Color Online Window Help	_ 8
🗋 🍃 🖬 🍜 📍 🕫 🔏 🐘 🐘 100% 💽 🔍 🔍 🎼 🐘 🗸	
Tools = 10 \checkmark \equiv \equiv B I \underline{U} CH_2 X_2 X^2	
R []	=
н₃с—сн₂—Ё—с	

Modul ChemOffice (Chem Draw & Chem 3D)-UNS 2018

8. Setelah gambar selesai, klik '*marque*' pada '*tools pallete*'



9. Klik kanan, pilih '*copy*' untuk memindahkan gambar ke dalam *mocrosoft word*, kemudian "*paste (ctrl+V)*" di lembar *Ms. Word*, atau klik '*file*' lalu pilih '*save as*' untuk menyimpan gambar.

•		T	6				
💿 Chem	Draw U	lltra - [l	ntitled Document-3 *]				
횐 File	Edit	View	Object Structure Text Curves Color Online Windo		Cut	Ctrl+X	_ 8 ×
		4	? 🖍 🗠 👗 🗈 📸 100% 🛛 🔍 🔍		Сору	Ctrl+C]
	_				Paste	Ctrl+V	
Tools					Clear	Del	
R				✓	Display Warnings		<u>+</u>
9	MW MW				Align	+	
			T T		Distribute	►	
\sim					Add Frame	+	
	A		н ₃ с—сн ₂ — ё— с		Join	Ctrl+J	
12	52				Bring to Front	F2	
4.	~		CH ₃ CH ₃		Send to Back	F3	
14					Flip Horizontal	Shift+Ctrl+H	-
14	8.				Flip Vertical	Shift+Ctrl+V	

10. Jika ingin mengecek struktur yang telah dibuat sudah benar, blok *structure* dengan "*marquee*" klik kanan, pilih "*molecule*", kemudian "*clean up structure*".



- 1. Ubahlah nama senyawa kimia berikut ini ke dalam rumus struktur !
 - a. 3-chloro-4-methyl-5-isopropyl-3-heptene
 - b. Methyl tertiary butyl ether (2-methoxy-2-methylpropane)
 - c. Z-oleic acid
 - d. 3-cycloprophylpentalandehyd

2. Gambarkan struktur kimia di bawah ini menggunakan Chem Draw, kemudian berikan nama masing-masing senyawa !



3. Gambarkan struktur kimia senyawa berikut ini dengan memperlihatkan atom-atom yang terlibat dalam ikatan, menggunakan Chem Draw !



- Langkah-langkah menggambar senyawa benzene dan turunannya dengan Chem Draw Ultra 12.0.
- 1. Buka aplikasi Chem Draw
- 2. Klik '*cyclohexane ring*' pada '*tools pallete*', klik dan drag pada layar kerja. (Contoh : Asam salisilat atau Asam-o-hidroksibenzoat)

0	Chem)raw U	ltra - [l	Untitled D	ocument-4	*]										
9	File	Edit	View	Object	Structure	Text	Curves	Color	Online	Window	v Hel	р				_ 8 ×
) 🗁	н	4	? n	~ X	Ц.	i 100	6	- 🔍	۹ 🏢) (\checkmark				
	Tools			Ŧ		v	= =	=	В	I U	CH_2	\mathbf{X}_2	X ²			
	R															<u> </u>
	⊛	MW Mu														
	\mathbf{i}															
		A														
	γ_{χ}	52						$\langle -$	\rightarrow							
	144	→						\setminus	_/							
	24	9														

3. Klik '*multiple bond*' untuk membuat ikatan rangkap.



4. Klik 'solid bond' untuk membuat ikatan tunggal sebagai cabang, buat posisi 'orto'.

💿 Ch	emDrav	w Ultra - [Untitled [Document-4	*]										- 0 - X	
🧟 F	le Ed	lit View	Object	Structure	Text	Curves	Color	Online	Window	Help					_ 8 >	¢
	> I		? 🛛	~ %		iii 1003	6	- 9	۹ 🛒		\checkmark					
Тс	ols 💻	-	-		-	E =		В	$I \underline{\mathbf{U}}$	CH_2	$X_2 = X^2$	I				
Ş	R [-	•
۲) ×	6														
		·						/	,							
		L					\prod									
	. 51						<	Y								
	(1), → •						\geq	_/							-	
	% Š	4														
		1														

5. Klik '*multiple bond*' untuk membuat ikatan rangkap pada C karbonil, lalu klik '*teks*' untuk menulis atom oksigen (O) serta gugus hidroksi (-OH).

💿 ChemD)raw Ultra -	[Untitled Do	ocument-4	*]										
👰 File	Edit Viev	v Object	Structure	Text	Curves	Color C	nline	Windo	v Help					- 8 ×
	8	? 🛛	~ %	h 1	100%	•	٩	۹ 🏾	•	\checkmark				
Tools	New	Roman 💌 🛛	2	•			В	<u>Ι</u> <u>υ</u>	CH ₂	$\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}^2$				
R							0							<u>+</u>
9	MW MB						Ĭ							
\sim								∕_oł	I					
	A						$\langle \ \rangle$							
- N.	5				4	/	\mathbb{Y}	OH						
lun.	→					\	/							
ing.	8.													
- 🔪	[]													

6. Untuk mengecek struktur yang dibuat sudah benar, blok struktur dengan "*marquee*", klik kanan, kemudian pilih '*molecule*' lalu '*clean up structure*'. Hasilnya sebagai berikut :



- 7. Klik 'save as' pada menu 'file' untuk menyimpan.
- 8. Jika ingin dipindah pada *Ms. Word*, blok struktur lalu klik kanan pilih "*copy*". Kemudian "paste (ctrl+V)" pada lembar *Ms. Word*.



- 1. Ubahlah nama senyawa turunan benzene berikut ke dalam rumus strukturnya !
 - a. Paracetamol
 - b. Dichlorobenzidine
 - c. Orthonitrotoulene

2. Gambarkan struktur seyawa turunan benzene berikut ini, dan berikan nama dengan Chem Draw !



b. Model 3 Dimensi dengan Chem 3D

Struktur senyawa kimia yang sudah digambar dari Chem Draw dapat dibuat menjadi model 3 Dimensi dengan cara :

- 1. Gambarkan struktur senyawa menggunakan Chem Draw (Contoh: Asam-2,3dimetilpentanoat)
- 2. Klik '*marquee*' pada '*tools pallete*' lalu pilih '*edit*' pada '*menu bar*', kemudian klik '*get 3D model*. Model 3D dari senyawa Asam-2,3-dimetilpentanoat sebgai berikut :



3. Apabila PC sudah terinstal aplikasi Chem3D, bisa melalui '*view*' pada menu bar lalu pilih '*show chem3D hotLink window*', akan didapatkan struktur 3 dimensi, seperti gambar di bawah ini. Klik "*rotate*" untuk memutar objek.



4. Untuk menyimpan gambar 3D dari Chem3D, klik kanan pada gambar 3D, pilih '*file*' lalu klik "*save as*".



- 1. Buatlah struktur 3 dimensi dari senyawa berikut ini :
 - a. E-1,2-dibromo-1-cyclohexyl-1-butene
 - b. Z-1,2-dibromo-1-cyclohexyl-1-butene

E Stereokimia

<u>Tujuan</u> :

Peserta diklat mampu menampilkan stereokimia dari senyawa kiral menggunakan Chem Draw

Chem Draw Ultra dapat menampilkan stereokimia suatu senyawa. Caranya sebagai berikut :

1. Buat struktur senyawa kiral yang akan ditentukan stereokimia-nya, bisa melalui *convert name to structure*' (contoh : D-glucose), klik 'OK'. Bisa juga dengan menggambar menggunakan Chem Draw.

ChemDraw Ultra - [Untitled Document-6 *]	series concerns through their	
File Edit View Object Structure Text Cu	irves Color Online Window Help	- 8 ×
🗋 🍃 🖬 🧉 🥐 🕫 🔏 🐚 📸	100% 💽 🔍 🔍 💼 🐜 🗸	
	$\equiv \equiv B I \underline{U} CH_2 X_1 X^2$	
A .		-
$\backslash \mathcal{O}$		
\mathbf{N} A	Insert Structure	
1. St.	Insert Structure whose name is:	
14 >	D-ducose	_
No. 8.		
	Paste name below structure OK Cancel	
▶ [1]		
▶ ⊙,		





2. Klik 'marquee' untuk memilih gambar lalu klik 'object' pada 'menu bar' lalu klik 'showstereochemistry'.

ChemDraw Ultra - [Untitle File Edit View Obje	ed Document-6 *] ect Structure Text Curves (Color Online Window He	lp	
	Object Settings Apply Object Settings from Fixed Lengths	Ctrl+L	x ₂ x ²	
	Fixed Angles Show Stereochemistry	Ctrl+E	т	-
	Attach Data Annotate			
× 52	Center on Page Align	•	+	
1111 → 1111 8	Distribute Add Frame	► D-g	OH	
	Group Ungroup	Ctrl+G Shift+Ctrl+G		-
 ↓ ↓ ↓ ⊕ 	Join Pring to Front	Ctrl+J		
				17

3. Stereokimia senyawa D-glukosa

	J	
回 ChemDraw Ultra - [Un	titled Document-6 *]	
File Edit View 0	Object Structure Text Curves Color Online Window Help	_ 8 ×
🗋 🍃 🖩 🇉 😫	י 🕫 🖓 脑 📸 100% 🔄 🔍 🔍 🔐 🥽 🗸	
Tools =	$\blacksquare \blacksquare \blacksquare \blacksquare \blacksquare \blacksquare I \blacksquare \operatorname{CH}_2 X_2 X^2 \blacksquare$	
A 📑		<u> </u>
1 No. 1	OH OH	
$\backslash \mathscr{O}$		
N A	RI (R) (S) (R) O	
N 52		
144 -	он он	
No. 8.	D-glucose	
		_
\mathbf{N}		

4. Klik 'structure' lalu klik 'convert structure to name'



- 5. Untuk mengecek struktur yang telah digambar sudah benar, blok struktur dengan "*marquee*", klik kanan, kemudian pilih '*molecule*' lalu '*clean up structure*'.
- 6. Klik 'save as' pada menu 'file' untuk menyimpan.

LATIHAN 4

- 1. Tampilkan stereokimia dari senyawa :
 - a. (R)-3-bromoheptane
 - b. L-fructose
 - c. (2R,3S)-dibromopentane
 - d. D-galactose

2. Gambarkan senyawa kiral berikut ini, tunjukkan stereokimianya, dan berikan nama IUPAC melalui Chem Draw!



<u>Tujuan</u> :

Peserta diklat mampu menganalisis rumus kimia, massa eksak, berat molekul, m/z, analisis elemental dari senyawa menggunakan Chem Draw.

Analisis struktur molekul menggunakan Chem Draw meliputi massa eksak, berat molekul dan analisis elementer. Caranya :

1. Gambarkan struktur senyawa





2. Blok struktur dengan "marquee" lalu klik kanan, pilh 'analysis' kemudian pilih "all".

Berikut hasil analisis struktur :





Tentukan rumus kimia, massa eksak, berat molekul, m/z, analisis elemental dari senyawa acetylsalicylic acid !

Prediksi H-NMR

- 1. Prediksi H-NMR bisa diketahui dengan menggambarkan struktur senyawa kimia terlebih dahulu, bisa melalui menu '*structure*' lalu klik '*convert name to structure*'. Contohnya pada senyawa Z-2-bromo-2-butene dan E-2-bromo-2-butene.
- 2. Blok masing-masing senyawa menggunakan '*marquee*'. Selanjutnya klik '*predict H-NMR shift*' pada menu '*structure*'.

回 Chem[Draw Ultra - [l	Jntitled D	ocument-8 *]	
💿 File	Edit View	Object	Structure Text Curves Color Online Window Help	_ <i>8</i> ×
🗋 🗁	📙 <i> </i>	? n	Atom Properties	
			Bond Properties	v ²
Tools			Bracket Properties	× _ ,
<i>⊊</i> ¥			Check Structure	
1	MW		Clean Up Structure Shift+Ctrl+	<
	1		Clean Up Reaction Shift+ Ctrl+	X
			Expand Label	
	A		Contract Label	
1	52		Expand Generic Structure	
1111	→		Add Multi-Center Attachment	
100	8		Add Variable Attachment	
1 ×			R-Logic Query	
			Add 3D Property	•
•			Enhanced Stereochemistry	> tene
	⊕_		Map Reaction Atoms	iterie
32	A+A		Clear Reaction Map	
Ģ			Analyze Stoichiometry	
			Predict 1H-NMR Shifts	
	4 <u>0</u>		Predict 13C-NMR Shifts	
\triangleright			Make Spectrum-Structure Assignment	
• 🗘	\bigcirc		Define Nickname	
Disj 🦳	ted pro	ton NMR	Convert Name to Structure Shift+ Ctrl+	a

3. Prediksi H-NMR Z-2-bromo-2-butene dan E-2-bromo-2-butene



G

DAFTAR PUSTAKA

CambridgeSoft. 2010. User Guide ChemOffice. Unitated States of America.

CambridgeSoft. 2010. Chem & Bio Draw 12.0. Unitated States of America

ITEC107. 2010 . Introduction To ChemDraw Ultra 12.0. Slide Presentasi

Pradana, Adi, A. 2014. *Teknik Penggambaran Struktur Senyawa Kimia dengan Chem Draw*. Slide Presentasi.