

# PENDAMPINGAN PENGUNAAN SOFTWARE KOMPUTASI BAGI GURU MGMP KIMIA KOTA TERNATE

Zulkifli Zam Zam, Muhammad Saleh\*

Program Studi Pendidikan Kimia,  
Universitas Khairun

## Abstrak

Pemanfaatan perangkat lunak kimia komputasi bagi siswa sekolah menengah atas merupakan hal yang sangat penting dalam peningkatan pemahaman mereka terkait dengan hal-hal mendasar dari sebuah mekanisme reaksi kimia. Selain itu, pemahaman yang baik juga penting dalam rangka untuk mempersiapkan generasi-generasi yang nantinya lebih siap untuk masuk ke tahapan lanjutan seperti eksperimen yang dilaksanakan di Universitas-universitas atau lembaga penelitian lainnya. Oleh karena itu, proses sosialisasi yang direalisasikan dalam bentuk pelatihan atau workshop dilakukan bagi guru MGMP kimia sekolah menengah atas di kota Ternate. Tujuannya agar ketika diimplementasikan, pemahaman para siswa terkait dengan mekanisme reaksi dapat meningkat. Kegiatan ini, selain tergolong dalam kegiatan yang masih baru di Indonesia, juga merupakan kegiatan yang pertama kali diajukan untuk daerah provinsi Maluku Utara. Berdasarkan hasil evaluasi kegiatan, sebanyak 98% peserta dapat memahami, mengoperasikan, serta mengimplementasikan software komputasi kimia dalam bentuk reaksi sederhana.

Kata Kunci: Avogadro; Kimia Komputasi; VMD

## Abstract

The application of computational chemistry software for high school students is essential to increase their comprehension of the fundamental mechanism of chemical reactions. In addition, this also is one of the base preparations before entering the advanced stages of the experiment carried out by universities or other research institutions. Therefore, the socialisation process realised as training or workshop was conducted for MGMP chemistry teachers of high schools in Ternate city. The goal is that when implemented, students' understanding of reaction mechanisms can increase. Not only is this a new activity in Indonesia, but it is also the first time it has been proposed for the province of North Maluku. Based on the evaluation results, as many as 98% of participants can understand, operate, and implement the computational chemistry software in simple reactions..

Keywords: Avogadro; Computational Chemistry; VMD

## Article history

Received : 22-09-2022

Revised : 19-02-2023

Accepted : 19-04-2023

## \*Corresponding author

Muhammad Saleh

Email:

[muhammad.saleh@mail.ugm.ac.id](mailto:muhammad.saleh@mail.ugm.ac.id)

© 2023 Some rights reserved

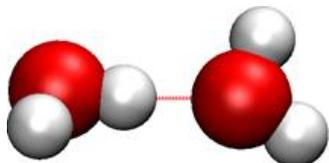
## PENDAHULUAN

Perkembangan perangkat lunak (*software*) untuk perhitungan maupun simulasi khususnya dibidang kimia saat ini sudah meningkat dengan sangat pesat. Terlebih lagi dengan adanya peningkatan efisiensi dari perangkat keras yang berperan sebagai *booster* dalam pengembangan perangkat lunak tersebut. Sayangnya, di Indonesia pemanfaatan perangkat lunak ini masih tergolong sangat minim. Hal ini dapat diukur dari fakta bahwa hanya sedikit universitas-universitas di Indonesia yang memiliki program studi khusus komputasi kimia. Sebut saja UGM, UI, dan ITB. Padahal, jika dimanfaatkan secara baik, *software-software* ini akan membantu dalam percepatan penelitian khususnya di bidang

obat-obatan alam yang saat ini sedang gencar-gencarnya dilakukan, dan tentu saja sejalan dengan fokus rencana induk riset nasional (RINR) terkait dengan pengembangan obat.

Salah satu faktor utama minimnya pemanfaatan *software* ini adalah kurangnya keterpaparan atau keterbiasaan yang seharusnya dapat dimulai paling tidak setingkat sekolah menengah atas (SMA), mengingat generasi saat ini sudah sangat familiar dengan teknologi digital dan *virtual reality*. Dengan pengenalan yang cukup dini, diharapkan siswa dapat memahami secara mendalam tentang dasar-dasar dari mekanisme yang berperan dalam sebuah reaksi karena direpresentasikan ke dalam bentuk tiga dimensi ([Gambar 1](#)) sehingga dalam satu

sampai tiga tahun kedepan, universitas-universitas di Indonesia akan dimasuki oleh calon-calon mahasiswa dengan dasar riset kimia yang cukup matang.



**Gambar 1.** Interaksi air dalam 3 dimensi, garis orange menunjukkan ikatan Hidrogen

Untuk program pengabdian atau pelatihan yang terkait dengan tema penggunaan perangkat lunak kimia, telah dilakukan di beberapa daerah seperti oleh (Ananto et al., 2020; Mulatsari et al., 2021; Yuanita et al., 2018; Yun, 2021). Namun, di kegiatan kali ini, topik pelatihan yang diberikan lebih berfokus pada perhitungan optimasi *real* dan juga visualisasi berdasarkan standar publikasi baik nasional maupun internasional. Selain itu, pelatihan dengan topik ini adalah yang pertama di Maluku Utara atau bisa dikatakan di Indonesia bagian Timur.

## METODE PELAKSANAAN

Kegiatan program Pengabdian Kepada Masyarakat (PKM) ini dilaksanakan pada hari Kamis, 21 Juli 2022 bertempat di laboratorium komputer Sekolah Menengah Atas Negeri (SMAN) Satu kota Ternate dengan peserta yang berasal dari Musyawarah Guru Mata Pelajaran (MGMP) kimia se-kota Ternate.

Peralatan yang dipakai dalam kegiatan ini adalah 20 (dua puluh) unit komputer dengan bahan yakni perangkat lunak VMD (Humphrey et al., 1996) untuk visualisasi dan Avogadro untuk perhitungan (Avogadro, 2022; Eargle et al., 2006; Frishman & Argos, 1995; Hanwell et al., 2012; Sanner et al., 1995; Sharma et al., 2000; Stone et al., 2001; Varshney et al., 1994).

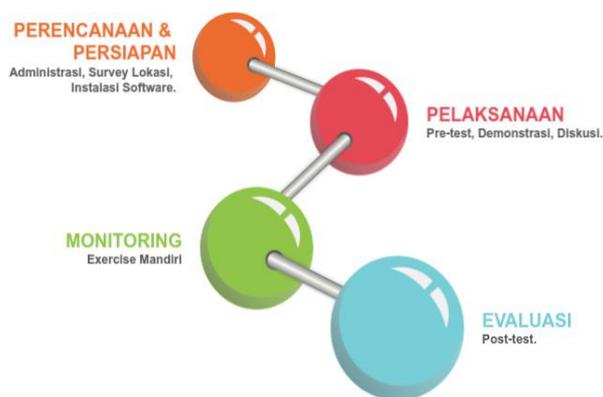
Metode pelaksanaan kegiatan pengabdian yang digunakan adalah penyampaian informasi serta tindakan yakni ceramah, demonstrasi yang disertai dengan diskusi, dan pendampingan. Kegiatan pengabdian terbagi menjadi empat tahap yaitu tahap persiapan dan perencanaan, tahap pelaksanaan, tahap monitoring dan tahap evaluasi (Gambar 2).

Dalam tahapan persiapan dan perencanaan, segala proses perizinan, dan administrasi yang meliputi kontrak pelaksanaan kegiatan, perjanjian dengan mitra, serta surat-surat dilakukan. Selain itu, dalam tahapan ini proses teknis seperti pemilihan tempat, dan instalasi *software* juga dilakukan.

Tahapan pelaksanaan dimulai dengan kegiatan *pre-test* untuk mengukur sejauh mana

peserta memahami *software* komputasi kimia. Kemudian setelah itu, presentasi tentang teori dasar serta penggunaan *software* dilakukan sebanyak 4 sesi yakni 1) Pemodelan air; 2) Pemodelan situs aktif virus Covid-19; 3) Solvasi ion metal dalam air; dan 4) Adsorpsi molekul pada material padatan. Tiap-tiap bab ini disertai dengan contoh latihan. Selama proses presentasi, diskusi terbuka juga dilakukan sehingga kegiatan bersifat lebih dinamis.

Tahap monitoring dilakukan dengan cara para peserta diberikan latihan mandiri untuk melihat kemampuan peserta dalam mengaplikasikan materi yang baru didapat. Proses evaluasi dilakukan dengan memberikan *post-test*. Indikator yang diukur adalah setiap peserta dapat memahami teori dasar, mengoperasikan *software* secara mandiri, dan dapat mengaplikasikan dalam contoh molekul atau reaksi sederhana. Selain itu peserta juga diminta untuk mengevaluasi kegiatan secara keseluruhan



**Gambar 2.** Alur kegiatan PKM

## PEMBAHASAN

Kegiatan pengabdian ini dilakukan dalam upaya untuk meningkatkan pemahaman siswa terkait dengan mata pelajaran Kimia khususnya mekanisme reaksi yang terbilang abstrak. Untuk menjelaskan hal abstrak tersebut, pembelajaran konvensional Kimia selama ini hanya menggunakan model kit tiga dimensi atau hanya dengan gambar dua dimensi di papan tulis. Tentu hal ini sudah tidak lagi relevan dengan kondisi saat ini dimana para siswa sudah terbiasa dengan teknologi tiga dimensi seperti pada *virtual reality* (VR) atau *augmented reality* (AR) sehingga dengan penggunaan *software* kimia, molekul yang dimodelkan dapat lebih mudah dipahami yang pada akhirnya memudahkan para guru dalam memberikan penjelasan terkait dengan prinsip dasar dari suatu reaksi kimia. Model pembelajaran dengan memanfaatkan *software* kimia telah banyak diteliti, misalnya oleh (Johnson & Engel, 2011; Kobayashi et al., 2021; Rodríguez-Becerra et al., 2020; Tuvi-Arad, 2022). Hasil dari penelitian-penelitian tersebut menunjukkan adanya peningkatan signifikan

terhadap pemahaman, *engagement* siswa, serta memberikan perspektif baru dalam memahami pelajaran. Berangkat dari fakta-fakta ini maka pelatihan tentang pemanfaatan *software* kimia sebagai media pembelajaran dilakukan kepada guru-guru MGMP Kimia kota Ternate agar dapat digunakan sebagai salah satu media pembelajaran Kimia. Dalam sub-bab berikut dijelaskan tahapan-tahapan kegiatan secara mendetail.

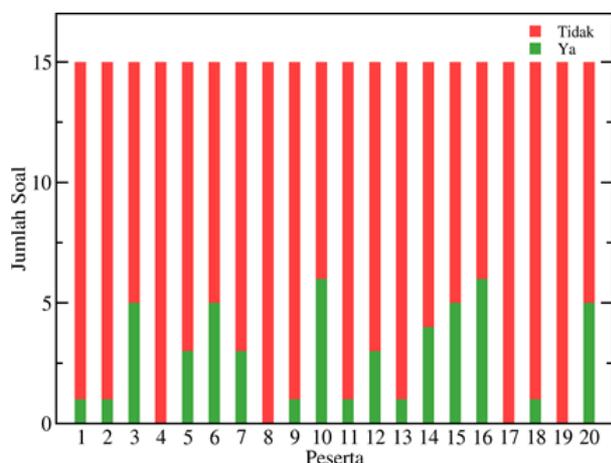
### Persiapan dan Perencanaan

#### Persiapan dan Instalasi

Dalam rangka untuk memperlancar jalannya kegiatan, *software* yang digunakan dalam kegiatan ini terlebih dahulu diinstal di setiap unit komputer peserta. Meskipun proses instalasi ini dapat dijadikan sebagai salah satu indikator pemahaman, tetapi hal ini tidak dilakukan mengingat waktu kegiatan yang terbatas (1 hari). Oleh karena itu, tahapan instalasi secara detail disiapkan dalam bentuk file sehingga peserta dapat mengikuti alur instalasi secara mandiri.

#### Pre-Test

Sebelum presentasi dilakukan, setiap peserta diberikan kuesioner sebanyak 15 soal untuk mengetahui sejauh mana pemahaman dan familiaritas dari peserta terhadap *software* komputasi kimia dan juga untuk bahan perbandingan keberhasilan kegiatan ini (*post-test*). Detail kuesioner *pre* dan *post test* dapat dilihat pada Tabel 1. Dari dua puluh peserta yang mengikuti kegiatan, 65 % nya belum familiar dalam menggunakan *software* komputasi kimia. Hal ini dapat dilihat dari besarnya distribusi merah (Tidak) pada Gambar 3. Sedangkan, 35 % nya hanya familiar dengan *software* grafik dua dimensi. Meskipun demikian, hasil *pre-test* menunjukkan bahwa semua peserta sama sekali belum pernah menggunakan *software* Avogadro dan VMD yang merupakan *software* yang digunakan dalam kegiatan ini



Gambar 3. Grafik hasil pre-test

Tabel 1. Detail soal untuk kuesioner *pre* dan *post test*

No	Pertanyaan
1	Apakah Bapak/Ibu sebelumnya pernah mendengar tentang <i>software</i> komputasi kimia ?
2	Apakah Bapak/Ibu sebelumnya pernah mengoperasikan <i>software</i> komputasi kimia ?
3	Apakah Bapak/Ibu sebelumnya pernah mengoperasikan <i>software</i> komputasi kimia Avogadro ?
4	Apakah Bapak/Ibu sebelumnya pernah mengoperasikan <i>software</i> komputasi kimia VMD ?
5	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menggambar struktur molekul dua dimensi menggunakan <i>software</i> ?
6	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menggambar struktur molekul tiga dimensi menggunakan <i>software</i> ?
7	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menentukan panjang ikatan suatu molekul ?
8	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menentukan situs aktif dari sebuah protein ?
9	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menentukan energi ikatan sebuah molekul ?
10	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara memvisualisasikan proses pemutusan/pengikatan suatu ikatan kimia ?
11	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara memvisualisasikan proses adsorpsi/desorpsi sebuah molekul pada suatu padatan ?
12	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara memvisualisasikan proses solvasi ion dalam larutan ?
13	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menghitung energi kesetimbangan dari sebuah interaksi ?
14	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara menghitung jarak kesetimbangan dari sebuah interaksi ?
15	Apakah Bapak/Ibu mengetahui cara memvisualisasikan distribusi muatan parsial dari sebuah molekul ?

### Pelaksanaan

#### Pelatihan Penggunaan *Software* Komputasi Kimia

Proses pelatihan dilakukan dengan menggunakan metode ceramah dimana peserta akan diberikan informasi tentang bagaimana cara kerja *software* VMD dan Avogadro (Gambar 4). Tiap topik tersebut dimulai dengan tata cara instalasi, kemudian 4 sesi pelatihan (2 VMD dan 2 Avogadro) yakni 1) Pemodelan air; 2) Pemodelan situs aktif virus Covid-19; 3) Solvasi ion metal dalam air; dan 4) Adsorpsi molekul pada material padatan yang disertai dengan contoh. Di akhir sesi, setiap peserta akan diminta untuk membuat satu atau dua contoh mandiri tentang aplikasi VMD dan Avogadro. Proses ini kemudian dimonitoring, dan diukur dengan

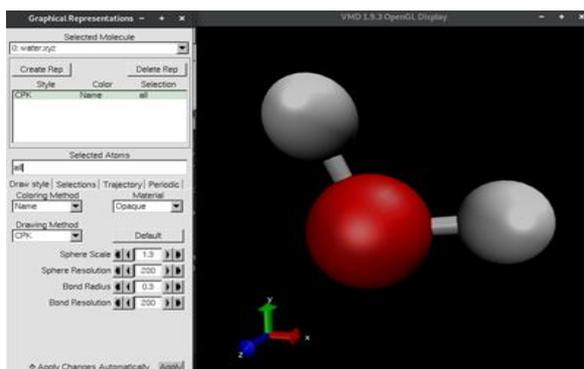
menggunakan instrumen kuesioner *post-test*. Di akhir kegiatan, setiap peserta akan diminta untuk mengevaluasi seluruh proses kegiatan.



**Gambar 4.** Proses pelatihan *software* VMD dan Avogadro

#### a. Pemodelan air

Sesi ini dimulai dengan menggambar molekul air menggunakan *software* Avogadro. Setelah strukturnya dioptimasi, molekul ini kemudian disimpan dalam bentuk koordinat *Cartesian* (\*.xyz). Koordinat ini ditampilkan kembali dengan menggunakan VMD. Setelah itu, visual dari molekul air ini dioptimasi kembali sehingga menampilkan hasil akhir seperti [Gambar 5](#).



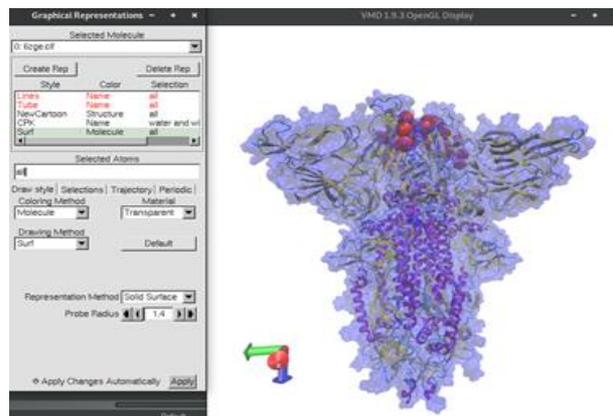
**Gambar 5.** Hasil akhir optimasi visual molekul air dengan *software* VMD

Alasan pemilihan contoh ini adalah karena selain tahapannya yang sangat mudah, juga agar para peserta dapat mulai mengoperasikan dan terbiasa dengan *software-software* yang dilatihkan. Dengan mulai menggambar dan memvisualisasikan suatu molekul sederhana, para peserta akan dengan sendirinya menemukan pertanyaan-pertanyaan terkait dengan bagaimana agar molekul yang dimodelkan dapat ditampilkan sesuai dengan keinginan para peserta.

#### b. Pemodelan situs aktif virus Covid-19

Dalam sesi kali ini, model yang digunakan adalah *spike* dari virus SARS-Cov-2 yang didapatkan

dari protein data bank dengan nomor kode 6ZGE. Model ini kemudian divisualisasikan dengan VMD. Langkah selanjutnya adalah optimasi visual hingga menghasilkan hasil akhir seperti [Gambar 6](#).

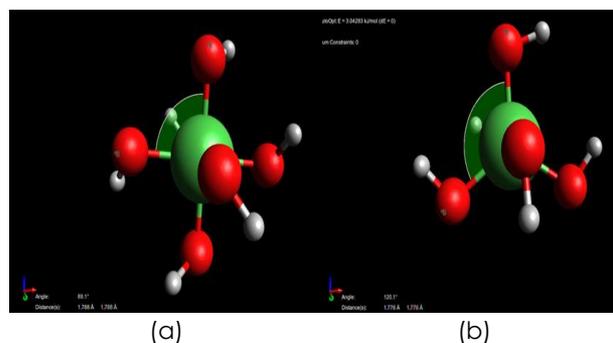


**Gambar 6.** Hasil akhir optimasi visual *spike* protein virus SARS-Cov-2 dengan *software* VMD

Dalam sesi kali ini para peserta akan lebih banyak mengeksplor *tools* serta pilihan tampilan pada VMD. Dengan begitu para peserta tidak hanya terpaku pada satu model visual saja melainkan dapat disesuaikan dengan keinginan visual dari tiap peserta.

#### c. Solvasi ion metal dalam air

Di sesi ini para peserta akan memodelkan, menghitung, dan menentukan geometri molekul kompleks terhadap jumlah ligan air yang terikat pada ion logam Nikel. Pertama-tama molekul kompleks yang terdiri dari satu ion Nikel dan 6 ligan air digambar menggunakan Avogadro. Setelah itu molekul kompleks ini dioptimasi struktural dan ditentukan geometrinya ([Gambar 7a](#)). Setelah itu, satu ligan air akan dihapus, diikuti dengan proses optimasi struktur, dan penentuan geometri ([Gambar 7b](#)).

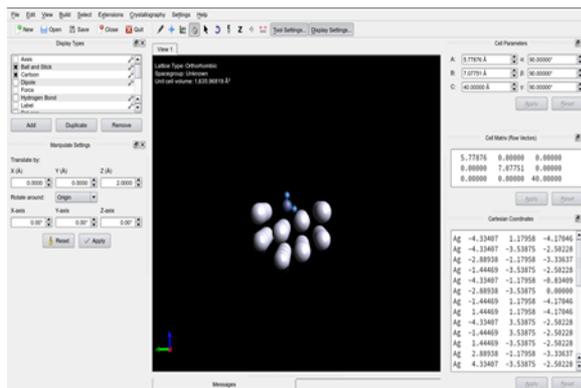


**Gambar 7.** a. Hasil akhir optimasi geometri Nikel kompleks dengan 6 ligan air; b. Hasil akhir optimasi geometri Nikel kompleks dengan 5 ligan air menggunakan *software* Avogadro

Di sesi ini para peserta akan lebih banyak diperkenalkan dengan *tools* dari *software* Avogadro seperti navigasi, metode perhitungan, serta penentuan geometri. Hal ini dilakukan agar nantinya para peserta dapat melakukan perhitungan secara mandiri dengan model sesuai dengan keinginan tiap-tiap peserta.

#### d. Adsorpsi molekul pada material padatan

Di sesi ini para peserta akan memodelkan, dan menghitung adsorpsi molekul air pada permukaan logam Pt (111). Pertama-tama, dua jendela kerja disiapkan untuk menggambar dan mengoptimasi molekul air dan padatan Pt (111). Kemudian dengan menggunakan *manipulation tool* kedua model ini digabungkan ke dalam satu *frame*. Setelah berhasil digabungkan, model ini kemudian dioptimasi kembali secara struktural dan dilihat seberapa besar energi interaksi yang dihasilkan (Gambar 8)



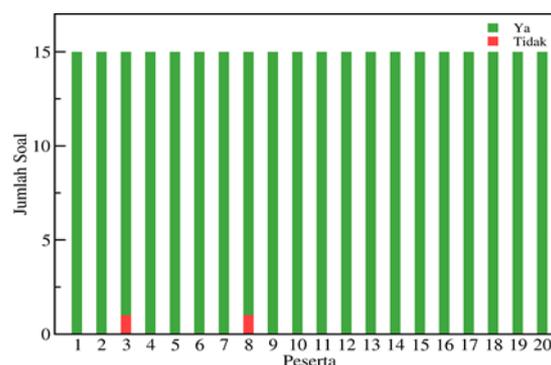
**Gambar 8.** Hasil akhir optimasi geometri adsorpsi air pada permukaan Pt (111)

#### Evaluasi Post-Test

Untuk melihat apakah materi yang disampaikan selama proses kegiatan dapat dipahami dan diaplikasikan dengan baik, maka proses evaluasi dalam bentuk kuis dilakukan (*post-test*) yang mana sebelum itu setiap peserta diwajibkan untuk memberikan satu sampai dua contoh reaksi dan visualisasi dengan menggunakan *software* VMD dan Avogadro. Setelah itu, data dibandingkan dengan hasil dari *pre-test*. Hasilnya, sebanyak 98 % peserta mampu mengaplikasikan kembali materi yang diajarkan (Gambar 9).

Salah satu alasan yang menyebabkan terjadinya peningkatan signifikan ini adalah karena antusiasme peserta dalam mengupgrade model pembelajaran baru. Dari hasil wawancara singkat ditemukan bahwa pada kenyataannya setiap peserta sudah memiliki gambaran rancangan pembelajaran yang baik agar siswa dapat lebih

memahami suatu proses reaksi kimia dengan mudah. Namun, karena pada dasarnya proses reaksi ini bersifat abstrak dan juga keterbatasan media pembelajaran, maka dalam praktiknya para peserta biasanya menggunakan contoh secara manual yakni menggambar di papan tulis atau dengan menggunakan model set kit molekul. Selain itu, faktor lain yang menyebabkan peningkatan ini adalah usia rata-rata dari para peserta yang masuk dalam kategori *milenial* sehingga sudah sangat familiar dengan tata cara menjalankan *software* secara umum.



**Gambar 9.** Grafik hasil pre-test

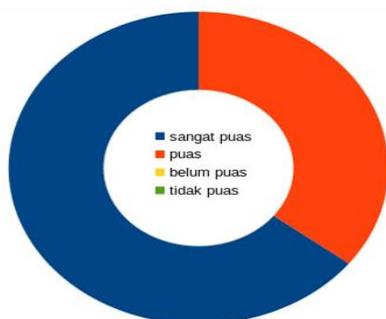
Hasil 2 % sebaran merah (tidak) pada Gambar 5 didapatkan karena beberapa faktor diantaranya adalah umur dari peserta tersebut yang sudah cukup senior sehingga butuh waktu yang lama dalam memproses materi khususnya pada bagian adsorpsi pada permukaan logam dan visualisasi sebaran muatan parsial dimana materi ini dapat dikategorikan sebagai materi yang cukup *advance*. Faktor lainnya adalah karena sebagian besar peserta yang merupakan guru-guru muda cukup cepat dalam memproses materi serta penyelesaian tugas yang menyebabkan guru-guru senior mau tidak mau harus mengikuti ritme belajar dari guru-guru muda tersebut. Meskipun demikian, dengan melihat peningkatan signifikan dari hasil *pre-test* ke *post-test* maka dapat dikatakan bahwa kegiatan ini cukup berhasil sehingga kedepannya, apabila kegiatan ini dilakukan lagi di kabupaten kota yang lain di provinsi Maluku Utara, hasil dari kegiatan saat ini akan digunakan sebagai model dasar untuk kegiatan berikutnya dengan pertimbangan umur dari target peserta yang akan diajarkan.

#### Evaluasi kegiatan

Proses evaluasi dilakukan untuk melihat respon dari peserta terhadap seluruh rangkaian kegiatan agar kualitas dari kegiatan dapat lebih ditingkatkan. Detail lembar evaluasi dapat dilihat pada Tabel 2 dan hasil direpresentasikan pada Gambar 10.

**Tabel 2.** Detail lembar evaluasi

No	Pertanyaan
1	Aspek Pendukung (Fasilitator memberikan materi, demo, praktek/latihan, tugas dan membuat rangkuman di akhir sesi)
2	Aspek Pelayanan dan Fasilitas meliputi kejelasan dalam petunjuk yang disertai dengan adanya bahan paparan/PPT yang jelas dan informatif
3	Aspek manajemen Bimtek (Pengaturan jadwal kegiatan, disiplin waktu)
4	Aspek Media Laboratorium (Komputer yang tersedia mendukung kegiatan Bimtek dan mendukung kegiatan praktek, sehingga membuat peserta lebih tertarik dan termotivasi untuk belajar)
5	Aspek Fasilitator/Master Trainers (Penguasaan materi, alur Bimtek, kemampuan komunikasi, kemampuan melibatkan peserta dalam pembelajaran)
6	Aspek Media (paparan PPT yang digunakan fasilitator, kejelasan alur, kejelasan materi dalam bahan paparan, tampilannya menarik dan interaktif, ukuran tulisan mudah dibaca di media zoom, dll)
7	Aspek Kualitas Jaringan Internet yang digunakan panitia dan fasilitator
8	Secara umum Bimtek Pengenalan Software Kimia VMD dan Avogadro ini membantu dalam memahami materi Komputasi
9	Penilaian terhadap modul online (kesesuaian materi dengan capaian pembelajaran, kemudahan dalam penggunaan, kesesuaian materi dengan topik, bahasa yang mudah dipahami, termasuk ukuran tulisan)
10	Aspek strategi pembelajaran (dimulai dari pertanyaan pemantik, game, pertanyaan reflektif, pemahaman konsep, implementasi dan demonstrasi)
11	Aspek Fasilitas dan Layanan (mencakup Modul pembelajaran, bahan paparan, ATK, Konsumsi)



**Gambar 10.** Grafik hasil evaluasi

Hasil menunjukkan bahwa kegiatan ini sangat direspon positif oleh peserta. Hal ini dilihat dari sebaran sangat puas dan puas yang mencakup 70 % dan 30 % dari total respon. Sedangkan, untuk respon yang lain seperti tidak puas dan belum puas tidak ditemukan.

## KESIMPULAN

Pelatihan penggunaan *software* komputasi kimia ini adalah merupakan bagian dari kegiatan pengabdian kepada masyarakat (PKM) yang ditujukan untuk guru MGMP kimia se-kota Ternate Maluku Utara. Pelatihan ini bertujuan agar para peserta (guru) dapat menggunakan *software* komputasi kimia sebagai salah satu media belajar agar siswa dapat lebih memahami suatu reaksi kimia yang biasanya abstrak untuk dijelaskan. Dari hasil kegiatan, ditemukan bahwa 98 % peserta dapat mengoperasikan dan mengimplementasikan kembali materi yang diajarkan. 2 % sebaran tidak didapatkan karena faktor umur dari peserta tersebut sehingga membutuhkan waktu yang lama untuk memproses beberapa materi yang masuk dalam kategori *advanced*. Meskipun demikian, peningkatan signifikan yang dicapai oleh peserta saat ini dapat menjadi indikator bahwa kegiatan ini cukup berhasil dan dapat dijadikan sebagai model dasar untuk kegiatan serupa berikutnya, tentu saja dengan pertimbangan umur dari target peserta. Sedangkan secara keseluruhan, kegiatan ini mendapat respon yang sangat positif. Diharapkan agar kedepannya pelatihan serupa dapat dilakukan di daerah-daerah lain dalam rangka pemerataan dan peningkatan kualitas pendidikan di provinsi Maluku Utara.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada Fakultas Keguruan Ilmu Pendidikan (FKIP) Universitas Khairun atas pembiayaannya melalui skema dipa FKIP Unkhair. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada kepala sekolah SMA Negeri 1 kota Ternate atas kesediaannya menjadi mitra pelatihan ini.

## DAFTAR PUSTAKA

- Ananto, A. D., Muliastari, H., & Saputra, A. (2020). Pelatihan Kimia Komputasi untuk Guru dan Mahasiswa di SMKN 3 Mataram. *WIDYABHAKTI Jurnal Ilmiah Populer*, 2(2), 112–116. <http://widyabhakti.stikom-bali.ac.id/index.php/widyabhakti/article/view/170>
- Avogadro, A. (2022). An open-source molecular builder and visualization tool. Avogadro. <https://avogadro.cc/>
- Eargle, J., Wright, D., & Luthey-Schulten, Z. (2006). Multiple Alignment of protein structures and sequences for VMD. *Bioinformatics*, 22(4), 504–506. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bti825>
- Frishman, D., & Argos, P. (1995). Knowledge-based protein secondary structure assignment. *Proteins: Structure*,

- Function, and Bioinformatics, 23(4), 566–579. <https://doi.org/10.1002/prot.340230412>
- Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4(1), 17. <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>
- Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)
- Johnson, L. E., & Engel, T. (2011). Integrating Computational Chemistry into the Physical Chemistry Curriculum. *Journal of Chemical Education*, 88(5), 569–573. <https://doi.org/10.1021/ed900064n>
- Kobayashi, R., Goumans, T. P. M., Carstensen, N. O., Soini, T. M., Marzari, N., Timrov, I., Poncé, S., Linscott, E. B., Sewell, C. J., Pizzi, G., Ramirez, F., Bercx, M., Huber, S. P., Adorf, C. S., & Talirz, L. (2021). Virtual Computational Chemistry Teaching Laboratories—Hands-On at a Distance. *Journal of Chemical Education*, 98(10), 3163–3171. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c00655>
- Mulatsari, E., Mumpuni, E., Nurhidayati, L., Purwanggana, A., & Pratami, D. K. (2021). Pelatihan Visualisasi Molekul Kimia Dengan Software Chems sketch Untuk Siswa Tingkat Sekolah Menengah Atas. *Magistrorum et Scholarium: Jurnal Pengabdian Masyarakat*, 2(1), 102–112. <https://doi.org/10.24246/jms.v2i12021p102-112>
- Rodríguez-Becerra, J., Cáceres-Jensen, L., Díaz, T., Druker, S., Bahamonde Padilla, V., Perna, J., & Aksela, M. (2020). Developing technological pedagogical science knowledge through educational computational chemistry: a case study of pre-service chemistry teachers' perceptions. *Chemistry Education Research and Practice*, 21(2), 638–654. <https://doi.org/10.1039/C9RP00273A>
- Sanner, M. F., Olson, A. J., & Spehner, J.-C. (1995). Fast and robust computation of molecular surfaces. *Proceedings of the Eleventh Annual Symposium on Computational Geometry - SCG '95*, 406–407. <https://doi.org/10.1145/220279.220324>
- Sharma, R., Zeller, M., Pavlovic, V. I., Huang, T. S., Lo, Z., Chu, S., Zhao, Y., Phillips, J. C., & Schulten, K. (2000). Speech/gesture interface to a visual-computing environment. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 20(2), 29–37. <https://doi.org/10.1109/38.824531>
- Stone, J. E., Gullingsrud, J., & Schulten, K. (2001). A system for interactive molecular dynamics simulation. *Proceedings of the 2001 Symposium on Interactive 3D Graphics*, 191–194. <https://doi.org/10.1145/364338.364398>
- Tuvi-Arad, I. (2022). Computational Chemistry in the Undergraduate Classroom – Pedagogical Considerations and Teaching Challenges. *Israel Journal of Chemistry*, 62(1-2), e202100042. <https://doi.org/10.1002/ijch.202100042>
- Varshney, A., Brooks, F. P., & Wright, W. V. (1994). Computing smooth molecular surfaces. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 14(5), 19–25. <https://doi.org/10.1109/38.310720>
- Yuanita, E., Sudirman, S., Ulfa, M., Dharmayani, N. K. T., Sumarlan, I., & Sudarma, I. M. (2018). Aplikasi Chemdraw Dan Avogadro Untuk Meningkatkan Pemahaman Dan Minat Dalam Bidang Kimia. *Jurnal Pendidikan Dan Pengabdian Masyarakat*, 1(2), 209–216. <http://jurnal.fkip.unram.ac.id/index.php/JPPM/article/view/846>
- Yun, Y. F. (2021). pengembangan pembelajaran jarak jauh bidang kimia pemanfaatan teknologi informasi dalam pembelajaran kimia. *Jurnal Abdimas Kartika Wijayakusuma*, 2(1), 50–57. <https://doi.org/10.26874/jakw.v2i1.97>