

## DAFTAR ISI

<b>ABSTRAK</b> .....	i
<b>ABSTRACT</b> .....	ii
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	iii
<b>DAFTAR ISI</b> .....	v
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	vii
<b>DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG</b> .....	xi
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	1
<b>1.1 Latar Belakang</b> .....	1
<b>1.2 Rumusan Masalah</b> .....	2
<b>1.3 Batasan Masalah</b> .....	3
<b>1.4 Tujuan Penelitian</b> .....	3
<b>1.5 Manfaat Penelitian</b> .....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	4
<b>2.1 Kimia Komputasi</b> .....	4
<b>2.2 Metode Ab Initio</b> .....	5
2.1.1 Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	6
2.1.2 Teori HF ( <i>Hartree-Fock</i> ).....	6
<b>2.3 Himpunan basis</b> .....	Error! Bookmark not defined.
<b>2.4 Imidazol</b> .....	9
<b>2.5 Senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol</b> .....	10
<b>2.6 Mekanisme Korosi</b> .....	10
<b>2.7 Optimasi Geometri Struktur</b> .....	12
<b>2.8 Parameter Sifat Elektronik</b> .....	13
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b> .....	16
<b>3.1 Waktu dan Tempat Penelitian</b> .....	16
<b>3.2 Bahan, Alat, dan Instrumentasi</b> .....	16
<b>3.3 Prosedur</b> .....	16
<b>BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN</b> .....	22
<b>4.1 Sifat Struktur Senyawa</b> .....	22
4.1.1 Optimasi Geometri.....	22
4.1.2 Muatan Mulliken.....	25
4.1.3 Kerapatan Elektron .....	26

<b>4.2</b>	<b>Sifat Elektronik Senyawa</b> .....	28
4.2.1	Celah energi .....	29
4.2.2	Momen Dipol.....	30
4.2.3	Potensial Kimia dan Keelektronegatifan .....	31
4.2.4	<i>Global Hardness</i> dan <i>Global Softness</i> .....	32
<b>BAB V</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN</b> .....	35
<b>5.1</b>	<b>Kesimpulan</b> .....	35
<b>5.2</b>	<b>Saran</b> .....	35
	<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	36
	<b>SUBJEK INDEKS</b> .....	39
	<b>LAMPIRAN A</b> .....	40
	<b>LAMPIRAN B</b> .....	41
	<b>LAMPIRAN C</b> .....	69

