

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i	
ABSTRACT	ii	
DAFTAR ISI	v	
DAFTAR GAMBAR	vii	
DAFTAR TABEL	viii	
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	x	
BAB I	PENDAHULUAN	1
1.1	Latar Belakang	1
1.2	Rumusan Masalah	3
1.3	Batasan Masalah	3
1.4	Tujuan Penelitian	3
1.5	Manfaat Penelitian	3
BAB II	TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1	Kimia Komputasi	4
2.2	Metode Kimia Komputasi	5
2.3	Teori Fungsi Rapatan (DFT)	6
2.4	Hartree-Fock (HF)	7
2.5	Basis Set	7
2.6	Korosi	9
2.7	Mekanisme Terbentuknya Korosi	10
2.8	Inhibitor Korosi	11
2.9	Imidazol	12
2.10	Senyawa Turunan Imidazol	13
BAB III	METODE PENELITIAN	15
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	15
3.2	Alat dan Bahan	15
3.3	Prosedur	16
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	18
4.1	Sifat Struktur Senyawa	18
4.1.1	Struktur Teroptimasi 2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro [9,10D] imidazol	19
4.1.2	Muatan Atom	23

4.1.3	Kerapatan Elektron	25
4.2	Sifat Elektron Senyawa	28
4.2.1	Energi HOMO-LUMO.....	29
4.2.2	Momen Dipol	33
4.2.3	Potensial Kimia dan Keelektronegatifan.....	34
4.2.4	Global Hardness dan Global Softness.....	35
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	39
5.1	Kesimpulan	39
5.2	Saran	39
	DAFTAR PUSTAKA	40
	LAMPIRAN A.....	42
	LAMPIRAN B.....	44
	LAMPIRAN C.....	44
	LAMPIRAN D.....	46