

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN	I
SURAT PERNYATAAN ORISINALITAS	II
HALAMAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR SKRIPSI UNTUK TUJUAN AKADEMISI.....	III
RIWAYAT HIDUP	IV
ABSTRAK ^v	
ABSTRACT.....	VI
KATA PENGANTAR	VII
DAFTAR ISI	IX
DAFTAR GAMBAR.....	XI
DAFTAR TABEL.....	XII
DAFTAR LAMPIRAN	XIII
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. LATAR BELAKANG	1
1.2. BATASAN MASALAH	3
1.3. RUMUSAN MAASALAH.....	4
1.4. TUJUAN PENELITIAN	4
1.5. MANFAAT PENELITIAN	5
BAB II TINJAUAN TEORITIS	6
2.1. BENZAMIDA.....	6
2.2. KIMIA KOMPUTASI.....	11
2.2.1. <i>Density Functional Theory (DFT)</i>	12
2.3. PERANGKAT LUNAK DALAM PERHITUNGAN KIMIA KOMPUTASI	12
2.3.1. <i>Software NWChem (NorthWest Computational Chemistry)</i>	12
2.3.2. <i>Software Avogadro</i>	13
2.3.1. <i>Jmol</i>	13
2.3.3. <i>Linux</i>	14
2.4. METODE KIMIA KOMPUTASI.....	14
2.4.1. <i>Ab initio</i>	15
2.4.2. <i>Semiempiris</i>	16
2.4.2. <i>Mekanika molekular</i>	16
2.5. METODE <i>DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)</i>	16
BAB III METODE PENELITIAN	18
3.1. WAKTU DAN TEMPAT	18
3.2. PERANGKAT PENELITIAN.....	18

3.2.1. Perangkat Keras.....	18
3.2.2. Perangkat lunak.....	18
3.3 PROSEDUR PENELITIAN.....	18
3.4 DESAIN PENELITIAN KIMIA KOMPUTASI	20
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	22
4.1 HASIL PENELITIAN	22
4.1.1 Data Hasil Perhitungan.....	22
4.1.2 Visualisasi hasil perhitungan komputasi.....	25
4.2 PEMBAHASAN.....	27
4.2.1 Penentuan Perubahan Entalpi Pembentukan Senyawa Benzamida dan Turunananya.....	27
4.2.2 Penentuan Perubahan Entalpi.....	31
4.2.3 Besarnya Energi dan Turunan Reaksi Senyawa Benzamida.....	34
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	36
5.1. KESIMPULAN.....	36
5.2. SARAN.....	37
DAFTAR PUSTAKA	38
LAMPIRAN.....	41



 THE
Character Building
 UNIVERSITY

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Struktur Senyawa Turunan Benzamida.....	6
Gambar 2.2. Skema Turunan Benzamida.....	8
Gambar 2.3. Struktur Kimia Benzamida	8
Gambar 2.4. Turunan Amida.....	10
Gambar 2.5. Contoh Senyawa.....	11
Gambar 2.6. Bagan Pengelompokan Perhitungan Kimia Komputasi.....	15
Gambar 3.1. Bagan Alir Perhitungan Kimia Komputasi	20
Gambar. 4.1. Struktur Hasil Visualisasi Dengan Perangkat Lunak Jmol Untuk Senyawa Benzamida.....	25
Gambar. 4.2. Struktur Hasil Visualisasi Dengan Perangkat Lunak Jmol Untuk Senyawa (4- Klorokarbonil - Benzial) - Karbamik Asam Piridin – 3- Ilmetil Ester	25
Gambar. 4.3. Struktur Hasil Visualisasi Dengan Perangkat Lunak Jmol Untuk Senyawa (4- Fenilkarbamil Benzil) – Karbamik Asam Piridin – 3- Ilmetil Ester	26
Gambar. 4.4. Struktur Hasil Visualisasi Dengan Perangkat Lunak Jmol Untuk Senyawa [4-(2-Nitro - Fenil Karbamoil) – Benzil] – Karbamik Asam Piridin – 3- Ilmetil Ester	26
Gambar. 4.5. Struktur Hasil Visualisasi Dengan Perangkat Lunak Jmol Untuk Senyawa [4 – 2 (Amino - Fenil Karbamil) – Benzil] – Karbamik Asam Piridin – 3- Ilmetil Ester	27

THE
Character Building
UNIVERSITY

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Nilai I_{c50} Benzamida Dan Turunannya	9
Tabel 3.1. Struktur Yang Diamati	21
Tabel 4.1. Hasil Perhitungan Kimia Komputasi Menggunakan Fungsi Hibrid/Basis Set B3lyp/3-2g.....	23
Tabel 4.2. Persamaan Reaksi Pada Turunan Senyawa Benzamida	24
Tabel 4.3. Data Hasil Energi Reaksi Dalam Pembentukan Senyawa Benzamida .	31
Tabel 4.4. Nilai I_{c50} Benzamida Dan Turunan.....	32
Table 4.5. Turunan Reaksi Pembentukan Senyawa Turunan Benzamida	34



DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN 1 INPUT DATA SENYAWA BENZAMIDA.....41
LAMPIRAN 2 HASIL PERHITUNGAN KOMPUTASI42



THE
Character Building
UNIVERSITY