

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN PENGESAHAN	i
RIWAYAT HIDUP	ii
ABSTRAK	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
BAB I PENDAHULUAN	
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Batasan Masalah	3
1.3. Rumusan Masalah	3
1.4. Tujuan Penelitian	4
1.5. Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Nitrobenzena	6
2.2 Anilin	6
2.3 Pemanfaatan Nitrobenzena dan Anilin	7
2.3.1 Manfaat Nitrobenzena	7
2.3.2 Manfaat Anilin	7
2.4 Reduksi Nitrobenzena	8
2.5 Sintesis Nitrobenzena	9
2.6 Pengaruh Ion Halogen	11
2.7 Kimia komputasi	12
2.7.1 Basis Set	14
2.7.2 Basis Set Minimum	15
2.7.3 Metode Density Functional Theory (DFT)	15
2.8 NWChem (NorthWest Computational Chemistry)	17

2.8.1 Metode Kimia komputasi	18
2.8.2 Pemodelan Molekul	18
2.8.3 Optimasi Geometri	19
BAB III METODE PENELITIAN	
3.1 Tempat Dan Waktu Penelitian	21
3.2 Perangkat Penelitian	21
3.2.1 Perangkat Keras	21
3.2.2 Perangkat Lunak	21
3.3 Prosedur penelitian	21
3.4 Desain Penelitian Kimia Komputasi	23
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	
4.1 Hasil	25
4.2 Pembahasan	28
4.2.1 Hidrogenasi Nitrobenzena	28
4.2.2 Hidrogenasi 4-Flouronitrobenzena	29
4.2.3 Hidrogenasi 4-Kloronitrobenzena	30
4.2.4 Hidrogenasi 4-Bromonitrobenzena	31
4.3 Penentuan senyawa yang paling mudah terbentuk	31
4.4 Pengaruh panjang ikatan, sudut, efek induksi dan efek resonansi	33
4.4.1 Panjang ikatan dan Sudut	33
4.4.2 Efek induksi	34
4.4.3 Efek resonansi	34
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	
5.1 Kesimpulan	36
5.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	38