

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI .....	iv
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	vii
DAFTAR LAMPIRAN .....	viii
DAFTAR SIMBOL .....	ix
GLOSARIUM.....	x
ABSTRAK .....	xi
<i>ABSTRACT</i> .....	xii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Tujuan Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....	6
II.1. Hemodialisis .....	6
II.2. Membran.....	7
II.3. Karboksimetil Kitosan (CMCs).....	8
II.4. Urea.....	10
II.5. Kimia Komputasi.....	12
II.6. Optimasi Geometri Struktur Molekul.....	13
II.7. Mekanika Kuantum .....	14
II.8. <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	15
II.9. Mekanika Molekul.....	16
II.10. Simulasi Dinamika Molekul .....	19
II.11. Model Molekul Air .....	20
II.12. Interaksi Antarmolekul .....	22
II.13. Ikatan Hidrogen .....	23
II.14. Analisis Hasil.....	24

II.14.1.Energi Interaksi .....	24
II.14.2.Celah Energi.....	24
II.14.3. <i>Radial Distribution Function</i> (RDF).....	26
II.14.4.Mean Square Displacement (MSD) .....	28
BAB 3 METODOLOGI .....	30
III.1.Waktu dan Tempat Penelitian.....	30
III.2.Alat dan Bahan .....	30
III.3.Variabel Penelitian.....	31
III.4.Prosedur Penelitian.....	32
BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN.....	37
IV.1.Energi Interaksi .....	37
IV.2.Celah Energi .....	43
IV.3. <i>Radial Distribution Function</i> (RDF) dan Bilangan koordinasi.....	48
IV.4. <i>Mean Square Displacement</i> (MSD) dan Koefisien Difusi (D) .....	64
BAB 5 PENUTUP .....	68
V.1.Kesimpulan .....	68
V.2.Saran.....	68
DAFTAR PUSTAKA .....	69
LAMPIRAN.....	76