

ABSTRAK

Chronic Kidney Disease (CKD) merupakan penyakit tidak menular yang ditandai dengan akumulasi urea dalam tubuh, sehingga memerlukan terapi hemodialisis dengan membran semipermeabel. Modifikasi kitosan menjadi karboksimetil kitosan (CMCs) dilakukan untuk meningkatkan interaksi membran dengan urea melalui penambahan gugus karboksimetil. Posisi gugus fungsi karboksimetil pada CMCs dapat mempengaruhi efektivitas difusi urea. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh perbedaan posisi gugus fungsi pada CMCs terhadap energi interaksi dan celah energi dengan urea menggunakan mekanika kuantum, serta menentukan solvasi dan koefisien difusi urea menggunakan mekanika klasik. Perhitungan mekanika kuantum dilakukan pada O-CMCs, N-CMCs, N,O-CMCs, dan N,N-CMCs dengan metode DFT basis set B3LYP/6-31++G** dengan koreksi D3. Simulasi dinamika molekul dilakukan menggunakan parameterisasi OPLS-AA dengan model air SPC/E, 5-mer CMCs, serta urea (10 dan 50 molekul). Tahapan simulasi meliputi minimisasi, ekuilibrasi (NVE, NVT, NPT), dan produksi (NVE) selama 5 ns pada 310,15 K. Hasil menunjukkan bahwa N,N-CMCs memiliki energi interaksi moderat yaitu -69,96 kJ/mol serta celah energi terendah sebelum (4,925 eV) dan sesudah interaksi (5,192 eV), yang menandakan kestabilan interaksi sekaligus kemudahan pelepasan urea. Pada simulasi klasik, N,N-CMCs menghasilkan solvasi urea optimal serta koefisien difusi tertinggi $4,516 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$. Dengan demikian, N,N-CMCs merupakan posisi gugus fungsi paling potensial untuk diaplikasikan sebagai membran hemodialisis.

Kata kunci : hemodialisis, membran, CMCs, urea, difusi