

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR GAMBAR	vi
DAFTAR TABEL.....	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	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
II.1 Difusi.....	4
II.2 Toksin Uremik	6
II.3 Kimia Komputasi	10
II.4 Mekanika Kuantum.....	10
II.5 Density Functional Theory (DFT)	12
II.6 Optimasi Geometri Struktur Molekul	13
II.7 Mekanika Molekul	14
II.8 Simulasi Dinamika Molekul	17
II.9 Interaksi Antarmolekul	19
II.10 Ikatan Hidrogen	20
II.11 Analisis Hasil	20
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	25

III.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	25
III.2 Alat dan Bahan.....	25
III.3 Variabel Penelitian.....	26
III.4 Prosedur Penelitian	26
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	33
IV.1 Optimasi Geometri dan Parameterisasi <i>Force Field</i> Struktur Molekul..	33
IV.2 Densitas dan Koefisien Difusi Model-Model Molekul Air	34
IV.3 Pengaruh Konsentrasi Urea terhadap Solvasi dan Difusi Urea dalam Air	36
IV.4 Pengaruh Konsentrasi Kreatinin terhadap Solvasi dan Difusi Kreatinin dalam Air	45
BAB V PENUTUP.....	55
V.1 Kesimpulan	55
V.2 Saran	55
DAFTAR PUSTAKA	56
LAMPIRAN.....	62