

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	iv
<b>PRAKATA</b>	v
<b>DAFTAR ISI</b>	vi
<b>DAFTAR TABEL</b>	viii
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	ix
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	x
<b>INTISARI</b>	xi
<b>ABSTRACT</b>	xii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
I. 1 Latar Belakang	1
I. 2 Tujuan Penelitian	3
I. 3 Manfaat Penelitian	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Polimer tercetak molekul	4
II.1.2 MIP sebagai pelepas lambat bahan kimia	5
II.1.2 Komputasi pada MIP	6
II.1.3 Teori kerapatan fungsional	7
II.1.4 Basis set	13
II.1.5 PCM ( <i>Polarizable Continuum Model</i> )	16
II.1.6 Simulasi dinamika molekul	17
II.1.7 Ikatan hidrogen	20
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	21
II.2.1 Perumusan hipotesis	21
II.2.2 Rancangan penelitian	23
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	24
III.1 Alat dan Materi	24
III.1.1 Materi penelitian	24
III.1.2 Alat	24
III.2 Metode	24

III.2.1	Pemodelan mekanika kuantum DFT pada efek PCM	24
III.2.2	Simulasi dinamika molekul	25
<b>BAB IV</b>	<b>HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN</b>	<b>26</b>
IV.1.	Permodelan dengan Metode DFT B3LYP 6-31+G (d)	26
IV.2	Simulasi Prekompleksasi MIP	31
IV.3	Pertimbangan Hasil Analisis	44
<b>BAB V</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>47</b>
V.1	Kesimpulan	47
V.2	Saran	47
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>		<b>48</b>
<b>LAMPIRAN</b>		<b>52</b>