



DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I. 1 Latar Belakang	1
I. 2 Tujuan Penelitian	4
I. 3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II. 1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Polimer tercetak molekul	5
II.1.2 Teori fungsional kerapatan	7
II.1.3 Solvasi <i>polarizable continuum model</i> (PCM)	12
II.1.4 Simulasi dinamika molekular	14
II. 2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	19
II.2.1 Perumusan hipotesis	19
II.2.2 Rancangan penelitian	19
BAB III METODE PENELITIAN	21
III. 1 Bahan	21
III. 2 Peralatan	21
III. 3 Prosedur	21
III.3.1 Optimasi geometri molekul	21
III.3.2 Protokol simulasi	22
III.3.3 Analisis trajektori	22
III.3.4 Pemodelan dengan metode solvasi PCM	23
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	24
IV.1 Kondisi Sistem MIP dalam Simulasi Dinamika Molekular	24



IV.2 Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekular	31
IV.3 Analisis Hasil Pemodelan dengan PCM	43
IV.4 Analisis Rasio Optimum Molekul Templat dan Monomer Fungsional	47
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	50
DAFTAR PUSTAKA	51
LAMPIRAN	57