

INTISARI

Adsorpsi molekul obat *Hydroxyurea* dan *Paracetamol* pada Fullerena Terdoping Atom Silikon : Studi Komputasi Berbasis Density Functional Theory

Oleh

YOSEPHINE NOVITA APRIATI

20/466385/PPA/05951

Telah dilakukan kajian komputasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) terhadap adsorpsi struktur Fullerena C_{60} dan SiC_{59} terhadap molekul obat *Paracetamol* (PARA) dan *Hydroxyurea* (HU) sebagai potensi sistem *drug delivery*. Dilakukan kajian pendahuluan terhadap Fullerena C_{60} dengan molekul kecil H_2 , H_2O , NH_3 , O_2 , dan O_3 untuk melihat potensi struktur sistem *drug delivery*. Diperoleh hasil bahwa hanya H_2 dan H_2O yang stabil di dalam C_{60} dengan energi inklusi -0,02 eV dan 0,01 eV. Untuk sistem molekul kecil yang diletakkan di luar C_{60} hanya O_2 dan O_3 yang dapat berinteraksi dengan C_{60} dengan terbentuknya ikatan. Kemudian, dilakukan analisis terhadap molekul obat PARA dan HU yang dilakukan pada sistem yang terdiri dari Fullerena C_{60} dan SiC_{59} . Diperoleh hasil bahwa struktur C_{60} berinteraksi sangat lemah dengan masing-masing molekul obat. Diperlihatkan bahwa struktur SiC_{59} merupakan struktur yang lebih stabil dalam interaksi adsorpsi antara molekul obat dengan Fullerena SiC_{59} . Hal ini ditunjukkan oleh nilai energi adsorpsi yang lebih tinggi, energi formasi yang lebih rendah, terbentuknya ikatan antara molekul obat dengan atom doping Si, dan terdapat *charge transfer* yang berasal dari Fullerena SiC_{59} ke molekul obat PARA dan HU. Besar nilai muatan yang tertransfer pada saat terjadi adsorpsi adalah $\sim 0,2$ elektron.

Kata kunci : *Fullerene C_{60} , sistem transport obat, Hydroxyurea, Paracetamol, DFT.*

ABSTRACT

Adsorption of Drug Molecules Hydroxyurea and Paracetamol on Silicon-doped Fullerene : A Computational Study Based on The Density Functional Theory

By

YOSEPHINE NOVITA APRIATI

20/466385/PPA/05951

A computational study using the Density Functional Theory Method have been done to analyze the adsorption between Fullerene C_{60} and SiC_{59} with drug molecules *Paracetamol* (PARA) and *Hydroxyurea* (HU) as a potential drug delivery system. The research are first concluded to see the interaction between small molecules H_2 , H_2O , NH_3 , O_2 , and O_3 with C_{60} . The result found that only H_2 and H_2O have negative inclusion energi -0,02 and -0,01 eV. While, for the small molecules that being put outside the C_{60} only O_2 , and O_3 perform bond with the C_{60} . After that, the adsorption between C_{60} and SiC_{59} with PARA and HU are being investigated. The result show that C_{60} is almost inert with drug molecules PARA and HU. Thus, the system of SiC_{60} is better structure to be drug delivery system for PARA and HU molecules. This is supported by the data of higher adsorption energy, lower formation energy, bond created between drug and Si atom, and there is charge transferred from SiC_{59} to the drugs. The charge transferred when there is an adsorption between them is $\sim 0,2$ elektron.

Key word : *Fullerene C_{60} , drug delivery system, Hydroxyurea, Paracetamol, DFT.*