

INTISARI

Adsorpsi *Dopamine* pada Nanodot *Fullerene* (C₆₀): Kajian Komputasi Berbasis *Density Functional Theory* (DFT)

Oleh

Nikmatul Jannah

18/430221/PA/18734

Telah dilakukan dengan kajian komputasi untuk mengetahui kestabilan energi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Analisis yang digunakan dengan menghitung energi adsorpsi pada sistem molekul obat yang diletakkan diluar *Fullerene C₆₀* dekat dengan gugus hexagonal. Kajian potensi *Fullerene C₆₀* sebagai sistem pembawa obat merupakan langkah awal yang dilakukan pada penelitian ini yang menjadi dasar perhitungan stabilitas energi sistem *C₆₀* dengan molekul obat. Kemudian dihitung energi adsorpsi dan transfer muatan dari sistem *Fullerene C₆₀* murni dan doping atom *Si*, *BN*, dan *Sn* dengan obat *dopamine*. Diperoleh nilai energi adsorpsi dan transfer muatan *Dopamine C₆₀*, *Dopamine C₅₉Si*, *Dopamine C₅₉Sn*, dan *Dopamine C₅₈BN* secara berurutan masing-masing -0,03 eV dan 0,09 e⁻; -1,45 eV dan 0,14 e⁻; -0,06 eV dan 0,17 e⁻; dan yang terakhir -0,05 eV dan 0,11 e⁻.

Kata kunci: *Fullerene C₆₀*, Sistem pembawa obat, *Dopamine*, DFT, Doping.

ABSTRACT

Dopamine Adsorption on Fullerene (C₆₀) Nanodot: Computational Studies Based on Density Functional Theory (DFT)

by

Nikmatul Jannah

18/430221/PA/18734

Computational studies have been carried out to determine energy stability using the Density Functional Theory (DFT) method. The analysis used is to calculate the adsorption energy on the drug molecule system that is placed outside the Fullerene C60 close to the hexagonal group. The study of the potential of Fullerene C60 as an introduction system is the first step carried out in this study which is the basis for calculating the energy stability of the C60 system with drug molecules. Then calculated the adsorption and charge transfer energy of the pure C60 Fullerene system and doping Si, BN, and Sn atoms with dopamine drugs. The values of the adsorption and charge transfer energies of Dopamine C60, Dopamine C59Si, Dopamine C59Sn, and Dopamine C58BN respectively were -0.03 eV and 0.09 eV; -1.45 eV and 0.14 eV; -0.06 eV and 0.17 eV; and finally -0.05 eV and 0.11 eV.

Keywords: *Fullerene C60, Drug delivery system, Dopamine, DFT, Doping.*