

INTISARI

Kajian Stabilitas Struktur dan Interaksi Fullerena-Nukleobasa: Pemodelan Density Functional Theory

Oleh
Nur Anggita Sari
19/442411/PA/19160

Sebuah penelitian komputasi telah dilakukan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) untuk mengidentifikasi stabilitas energi sistem dari molekul nukleobasa DNA/RNA pada Fullerena C₆₀ sebagai potensi sistem pengiriman gen. Analisis yang digunakan dengan memodelkan interaksi antara Fullerena C₆₀ yang terdoping atom Si dengan molekul nukleobasa DNA/RNA. Hasil penelitian menunjukkan bahwa secara geometri, molekul C₅₉Si mampu berikatan dengan molekul nukleobasa Sitosin, Guanin, Timin, dan Urasil. Berdasarkan analisis tersebut, urutan jarak terdekat antara fullerena dan nukleobasa terkuat hingga terlemah adalah U > G > C > T > A. Selain itu, dilakukan perhitungan energi adsorpsi untuk memperoleh pemahaman lebih dalam mengenai stabilitas sistem yang diusulkan sebagai sistem pengiriman gen. Energi adsorpsi pada interaksi antara Fullerena C₅₉Si dengan masing-masing molekul nukleobasa adalah 1,7735 eV untuk Adenin, 0,4154 eV untuk Sitosin, 0,8948 eV untuk Guanin, 1,1527 eV untuk Timin, dan 0,8986 eV untuk Urasil. Urutan energi adsorpsi dari yang paling kuat hingga yang paling lemah adalah T > U > G > C > A. Temuan ini menunjukkan potensi interaksi kuat antara molekul nukleobasa DNA/RNA dengan Fullerena C₆₀ yang terdoping atom Si, yang dapat digunakan sebagai sistem pengiriman gen.

Kata kunci: DFT, Doping, Fullerena C₆₀, Nukleobasa, Sistem penghantar gen

ABSTRACT

Stability and Interaction Studies of Fullerene-Nucleobase Complexes: Density Functional Theory Modeling

By

Nur Anggita Sari
19/442411/PA/19160

A computational study has been conducted using Density Functional Theory (DFT) method to identify the energy stability of the system comprising DNA/RNA nucleobase molecules on Fullerene C₆₀ as a potential gene delivery system. The analysis involved modeling the interaction between Si-doped Fullerene C₆₀ and DNA/RNA nucleobase molecules. The research findings indicate that geometrically, the C₅₉Si molecule is capable of binding with nucleobase molecules such as Cytosine, Guanine, Thymine, and Uracil. Based on the analysis, the closest proximity between fullerene and nucleobase follows the order of strength: $U > G > C > T > A$. Furthermore, adsorption energy calculations were performed to gain a deeper understanding of the proposed system's stability as a gene delivery system. The adsorption energies for the interactions between C₅₉Si Fullerene and each nucleobase molecule were determined as follows: 1.7735 eV for Adenine, 0.4154 eV for Cytosine, 0.8948 eV for Guanine, 1.1527 eV for Thymine, and 0.8986 eV for Uracil. The order of adsorption energy from strongest to weakest is: $T > U > G > C > A$. These findings demonstrate the potential for strong interactions between DNA/RNA nucleobase molecules and Si-doped Fullerene C₆₀, which can be utilized as a gene delivery system.

Keywords: DFT, Doping, Fullerene C₆₀, Gene delivery system, Nucleobases