

Analysis of the electronic properties of DNA based on density functional theory using siesta program

Veronika Listyani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20242647&lokasi=lokal>

Abstrak

Selain peran utamanya sebagai molekul kehidupan, DNA telah menarik perhatian banyak peneliti karena diyakini memiliki sifat-sifat elektronik yang memungkinkannya untuk dapat dipergunakan sebagai divais elektronika molekuler. Namun penelitian-penelitian yang telah dilakukan ternyata menghasilkan temuan yang beragam mengenai karakteristik molekul tersebut. Sejumlah peneliti yang berbeda menyatakan bahwa DNA dapat bersifat sebagai isolator, semikonduktor dengan pita terlarang yang lebar, konduktor, ataupun superkonduktor. Karakteristik yang bervariasi ini disebabkan oleh berbagai faktor. Diantaranya yaitu perbedaan pada struktur molekul itu sendiri, atau penggunaan metode, substrat, elektrode, kontak logam, serta pengaruh lingkungan sekitar yang berbeda-beda pula. Untuk dapat menentukan sifat-sifat elektronik yang benar dari suatu molekul DNA, penelitian dan perhitungan yang akurat sangat diperlukan. Penelitian yang dilakukan pada skripsi ini bertujuan untuk mendapatkan sifat-sifat elektronik yang akurat dari suatu molekul DNA, yaitu "potongan" pasangan basa nitrogen A-T dan C-G. Perhitungan struktur elektronik dari kedua molekul ini dilakukan dengan menggunakan program SIESTA yang berlandaskan density functional theory. Saat ini DFT dipercaya sebagai metode yang paling akurat untuk melaksanakan perhitungan struktur elektronik. Delapan perhitungan dilakukan untuk 2 struktur molekul yang berbeda, menggunakan 2 metode DFT dan 2 nilai lattice constant yang berbeda pula. Pada SIESTA dan DFT, pertama-tama harus dibuat suatu pseudopotential untuk masing-masing atom yang menyusun molekul yang hendak dipelajari. Pseudopotential-pseudopotential ini harus memenuhi sejumlah persyaratan untuk dapat dikatakan sebagai 'norm-conserving' pseudopotential dan agar dapat digunakan untuk perhitungan molekul selanjutnya. Salah satu cara untuk memeriksa hal ini adalah dengan memperhatikan fungsi gelombangnya. Untuk perhitungan yang dilakukan pada skripsi ini, semua pseudopotential untuk atom-atom Karbon, Hidrogen, Nitrogen, dan Oksigen telah diperiksa dan memenuhi persyaratan 'norm-conserving'. Dilihat dari grafik pita energi setiap molekul yang dihasilkan dari perhitungan, secara umum terindikasi bahwa pasangan basa nitrogen A-T bersifat seperti semikonduktor tipe-p dengan lebar pita terlarang sebesar 3.7-3.8 eV, sementara pasangan basa nitrogen C-G bersifat seperti semikonduktor tipe-n dengan lebar pita terlarang sebesar 2.4 - 2.5 eV. Hasil paling baik didapatkan dari perhitungan yang menggunakan metode GGA dengan nilai lattice constant yang memberikan nilai energi total molekul paling kecil. Perbedaan karakteristik antara kedua molekul ini mungkin disebabkan karena lebih rendahnya nilai potensial reduksi-oksidasi pasangan basa C-G dibandingkan pasangan basa A-T.

.....Apart from its major role as the molecule of life, DNA has attracted many scientists' interest because of its electrical properties which can cause it being used as molecular electronic device. However, researches done have revealed its diverse characteristics. Some said that DNA is an insulator; others claim that it is a large band gap semiconductor, conductor, or even superconductor. These various characteristics are caused by its various structures, or by the diversity of measurement methods, electrodes, substrates, metal contacts, and environment conditions. To determine DNA's appropriate electronic properties, accurate research and

calculations are very important. Research done in this thesis aim to get accurate electronic properties of DNA in single base-pair level. A-T and C-G base pair electronic structure is calculated using SIESTA software package which is based on density functional theory. DFT is currently believed as the best method to perform electronic structure calculations accurately. Eight calculations are done with two molecular structures, two methods of DFT, and two given values of lattice constant. In SIESTA and DFT method, first we have to generate pseudopotentials for each atomic species used in the system we want to calculate. These pseudopotentials have to fulfill some requirements to be regarded as "norm-conserving" and able to be used for farther calculations. One of the ways to check these conditions is by observing their wavefunctions. For calculations done in this research, all pseudopotentials for Carbon, Hydrogen, Nitrogen, and Oxygen atoms present in DNA molecules are thoroughly checked and "norm-conserving". By looking at the band structures resulted by the calculations, it is generally indicated that A-T base-pair acts as p-type semiconductor with bandgap (HOMO-LUMO gap) value approximately 3.7-3.8 eV, while C-G base-pair acts as n-type semiconductor with bandgap value 2.4 - 2.5 eV. Best results are produced using GGA method and the value of lattice constant that corresponds to the minimum total energy of the molecules. The difference of the results for these two molecules is most likely being caused by the lower redox potential of C-G base-pair rather than that of A-T base-pair.