

Studi sifat transport molekul DNA poly DA-poly DT : peran hopping pada pasangan watson-crick dan pengaruh medan magnet = Study of charge transport properties molecule DNA poly DA poly DT hopping role in watson crick pairs and influence of magnetic field

Andi Muhammad Risqi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20465624&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Molekul DNA, sebagai devais elektronik molekular memiliki sifat yang sangat sensitif terhadap lingkungan baik itu lingkungan eksternal maupun internal. DNA dapat berada dalam kondisi tidak seimbang dan itu akan berpengaruh pada proses transpor muatan di DNA. Molekul DNA dapat berifat sebagai konduktor, semikonduktor atau isolator yang kemungkinan disebabkan dari lingkungannya. Oleh karena itu, pada studi ini penulis akan mempelajari pengaruh medan magnet dan konstanta hopping di pasangan Watson-Crick terhadap sifat transpor muatan di DNA Poly dA -Poly dT . Hamiltonian tight binding dan teori semi empirik Slater-Koster digunakan dalam memodelkan molekul. Dalam studi ini, semua jalur loncatan elektron dimungkinkan terjadi termasuk jalur loncatan antar-backbone. Transpor muatan di molekul DNA dipelajari dari menghitung density of state DOS , panjang lokalisasi, probabilitas transmisi, dan karakteristik I-V. DOS dihitung dengan menggunakan fungsi Green yang mempertimbangkan elektoda di kedua ujung molekul DNA. Panjang lokalisasi dihitung menggunakan metode transfer matriks dan ortonormalisasi Gram-Schmidt. Probabilitas transmisi dihitung menggunakan metode transfer matriks dan matriks hamburan, kemudian hasilnya digunakan untuk menghitung karakteristik I-V dengan menggunakan formula Landauer-Buttiker. Pengaruh medan magnet pada transpor muatan di molekul DNA dapat dilihat dari perubahan nilai panjang lokalisasi dan DOS elektron di DNA dengan perubahan nilai medan magnet. Konstanta hopping di pasangan Watson-Crick tidak memberikan pengaruh secara signifikan terhadap transpor muatan di molekul DNA. Hal ini ditandai dengan tidak banyaknya perubahan yang terjadi pada probabilitas transmisi dan karakteristik I-V ketika nilai konstanta hopping divariasikan.

<hr>

ABSTRAK

DNA molecule, an element of molecular electronic device is very sensitive to the environment both external and internal environment. DNA may be in unequilibrium condition and it will affect charge transport process in DNA. DNA molecule can behave as a conductor, semiconductor or insulator which is maybe caused by the environment. Therefore, in this study we will study the effect of magnetic field and hopping constant on the Watson Crick pairs in the charge transport of DNA poly dA poly dT . Tight binding Hamiltonian and the empirical Slater Koster theory are used in modeling the molecule. In this study, all electron hopping paths are considered, including backbone backbone hopping paths. Charge transport DNA is studied by calculating density of state DOS , localization length, transmission probability, and I V characteristic. DOS is calculated using Green function by considering the electrodes at both ends of the DNA molecule. The localization length is calculated using the matrix transfer method along with Gram Schmidt orthonormalization. The transmission probability is calculated using matrix transfer and scattering matrix

method, then it is used in calculating the I V characteristic by using Landauer Buttiker formula. The effect of the magnetic field on charges transport in DNA molecule can be seen from the decreasing and increasing of the value of localization length and electron rsquo s DOS in DNA as magnetic field is varied. Hopping constant on the Watson Crick pairs does not have a significant effect on the charge transport DNA molecule. This characteristic is indicated by the lack of changes in the transmission probability and the I V characteristic when the value of the hopping constants is varied.