

Studi pengaruh medan listrik luar terhadap panjang lokalisasi dan density of States (DOS) elektron di DNA poli(dA)-poli(dT) = Study of external electric field influence on electron localization length and Density of states (DOS) in a poly(dA)-poly(dT) DNA molecules

Fathiya Rahmani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20481918&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Banyak faktor yang dapat mengubah struktur energi DNA, dan pada akhirnya, hal tersebut berpengaruh kepada transpor elektron pada molekul DNA. Studi yang dilakukan berfokus kepada pengaruh medan listrik pada properti transpor muatan dari molekul DNA poly(dA)-poly(dT). Model DNA pada studi ini memperbolehkan elektron untuk mengalir dari backbone ke backbone. Model hamiltonian tight-binding digunakan dengan melibatkan medan listrik dan temperatur. Medan listrik diatur sejajar dengan sumbu heliks DNA. Medan listrik dimodelkan dengan mengacu pada formula Miller-Abraham yang mengubah konstanta hopping antar-sites dalam DNA. Metode transfer-matrix dan ortonormalisasi Gram-Schmidt digunakan untuk menghitung panjang lokalisasi. Retarded Green Function digunakan untuk menghitung DOS. Hasil yang didapatkan menunjukkan bahwa ketika medan listrik meningkat, terjadi pelebaran celah pada panjang lokalisasi dan DOS. Sedangkan peningkatan suhu meningkatkan disorder pada sistem.

ABSTRACT

There are many factors that can change the energy structure of DNA, and in the end it can affects electronic transport in DNA molecules. The study will focus on the influence of the electric field on the charge transport properties of the poly(dA)-poly (dT) DNA molecule. The DNA model in this study allows electrons to propagate from the backbone to backbone. The tight-binding Hamiltonian model is used by taking into account the electric field and temperature influence. The electric field is applied parallel to the helical axis of DNA. The electric field which change the hopping constant between sites in DNA will be modeled by using the Miller-Abraham formula. The transfer-matrix method and Gram-Schmidt orthonormalisation method are used to calculate the length of localization. Retarded Green Function is used to calculate DOS. The results obtained show that when electric field increases, there will be widening of the gap at the localization length and DOS. While the increase in temperature will increase disorder in the system.