

## Studi Simulasi dan Elektrokimia Deteksi Akrilamida Menggunakan Basa Purin = Simulation and Electrochemical Studies of Acrylamide Detection using Purine Bases

Listya Eka Anggraini, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20514233&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

Akrilamida merupakan senyawa karsinogen dan neurotoksin yang dapat menyebabkan berbagai gangguan kesehatan apabila dikonsumsi secara rutin, sehingga perlu dilakukan pengembangan sensor untuk senyawa akrilamida yang bisa diaplikasikan pada sampel makanan. Hingga saat ini, pengembangan DNA sebagai molekul pengenalan dalam biosensor akrilamida telah banyak dilakukan. Di lain pihak, sifat nukleofilitas guanin dan adenin menunjukkan reaktivitas yang kuat dengan suatu spesi elektrofil. Pada penelitian ini, studi pengembangan biosensor untuk mendeteksi senyawa akrilamida dilakukan dengan memanfaatkan basa purin menggunakan pendekatan teknik komputasi dan elektrokimia. Simulasi penambatan molekul menunjukkan bahwa DNA beruntai ganda memiliki energi bebas pengikatan Gibbs terendah dibandingkan dengan biomolekul lainnya dengan nilai  $G_{\text{binding}} -4,2759$  kkal/mol. Karakterisasi menggunakan spektrometer UV-Vis untuk pembentukan adduct akrilamida dengan basa purin memperlihatkan adanya pergeseran panjang gelombang dari 260 menjadi 257 nm. Karakterisasi dengan siklik voltametri menggunakan elektroda boron-doped diamond menunjukkan adanya puncak oksidasi yang tidak disertai puncak reduksi yang mengindikasikan bahwa reaksi yang terjadi adalah reaksi irreversible. Biosensor akrilamida berbasis guanin dan adenin menunjukkan aktivitas katalitik dan selektivitas yang baik pada rentang 0,2 – 1,0 M dengan limit deteksi dan limit kuantifikasi mencapai 0,1907 dan 0,6358 M ( $R^2= 0,9893$ ) untuk guanin, dan pada rentang 0,1 – 1,0 M dengan limit deteksi dan limit kuantifikasi mencapai 0,0486 dan 0,1619 M ( $R^2=0,9907$ ) untuk adenin. Metode yang diusulkan digunakan untuk penentuan AA dalam sampel kopi, dan divalidasi dengan instrumentasi HPLC dengan hasil yang baik

.....Acrylamide is a carcinogen and neurotoxin compound that can cause serious health problems if consumed frequently, so it is necessary to develop sensors for acrylamide compounds, especially those that can be applied to food samples. Until now, the development of DNA as a recognition molecule in acrylamide biosensor has been extensively studied. On the other hand, the nucleophilicity properties of guanine and adenine exhibit strong reactivity with an electrophile species. In this research, the acrylamide biosensor was carried out using by utilizing purine bases through computational and electrochemical approaches. The molecular docking simulation revealed that double-stranded DNA has the lowest Gibbs binding free energy compared to other biomolecules with  $G_{\text{binding}}$  value of  $-4.2759$  kcal/mol. UV-Vis spectrometer characterization for the formation of acrylamide adducts with

purine bases showed a shift in wavelength from 260 to 257 nm. Cyclic voltammetry using boron-doped diamond electrode's results showed the presence of an oxidation peak that was not accompanied by a reduction peak, which validated that the reaction was irreversible. The guanine and adenine based for acrylamide biosensors showed good catalytic activity and selectivity in the range 0.2–1.0 M with limit of detection and limit of quantification reaching 0.1907 and 0.6358 M ( $R^2 = 0.9893$ ) for guanine, and in the range 0.1–1.0 M with limit of detection and limit of quantification value of 0.0486 and 0.1619 M ( $R^2 = 0.9907$ ) for adenine. The proposed method was performed for the acrylamide determination in coffee samples and was validated by HPLC with good results