

Analisis Proses Permeasi Molekul Karbon Dioksida melalui Dinding Sel Mikroalga menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler = Analysis of the Carbon Dioxide Molecule Permeation Process through Microalgae Cell Walls using Molecular Dynamics Simulation

Nasution, Fakhri Putra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920546364&lokasi=lokal>

Abstrak

Fiksasi biologis yang melibatkan mikroalga adalah proses kompleks yang masih belum sepenuhnya dipahami karena keterbatasan metode eksperimental saat ini yang hanya menyediakan analisis pada skala makroskopik. Dalam penelitian ini, kami menyelidiki mekanisme permeasi molekul CO₂ melalui membran sel mikroalga menggunakan simulasi dinamika molekuler. Kami memodelkan membran sel mikroalga sebagai molekul DPPC (Dipalmitoylphosphatidylcholine), sebuah jenis fosfolipid yang dominan dalam membran sel makhluk hidup. Kami menggunakan model atom lengkap dengan gaya medan CHARMM (Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics). Semua simulasi, termasuk minimisasi, ekuilibrisasi, dan pengumpulan data, dilakukan menggunakan paket perangkat lunak LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Hasil penelitian menunjukkan bahwa molekul CO₂ dapat menembus membran sel mikroalga, dengan hambatan energi tinggi pada antarmuka antara wilayah lipid dan air. Koefisien difusi molekul CO₂ melalui membran sel mikroalga berkisar antara 1.81 hingga 2.69 x 10⁻⁵ cm²/s, dan permeabilitasnya berkisar antara 0.17 hingga 0.22. Variasi suhu antara 300 dan 320 K tidak menunjukkan efek signifikan pada karakteristik perpindahan molekul CO₂.

.....Biological fixation involving microalgae is a complex process that remains poorly understood due to the limitations of current experimental methods, which only provide macroscopic analysis. In this research, we investigate the mechanism of CO₂ molecule permeation through the microalgae cell membrane using molecular dynamics simulations. We model the microalgae cell membrane as DPPC (Dipalmitoylphosphatidylcholine), a dominant phospholipid in living cell membranes. We use an all-atom model with the CHARMM (Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics) force field. All simulations, including minimization, equilibration, and data collection, are conducted using the LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) software package. The results show that CO₂ molecules can permeate through the microalgae cell membrane, encountering a high energy barrier at the interface between the lipid and water regions. The diffusion coefficient of CO₂ molecules through the microalgae cell membrane ranges from 1.81 to 2.69 x 10⁻⁵ cm²/s, and the permeability ranges from 0.17 to 0.22. The temperature variation between 300 and 320 K shows no significant effect on the transport properties of CO₂ molecules.