



Perubahan Panjang Lokalisasi dan Kerapatan Keadaan Elektron pada Molekul DNA Poli(dA)-Poli(dT) karena Medan Magnet

Efta Yudiarsah, Andi Muhammad Risqi

Departemen Fisika, FMIPA, Universitas Indonesia, Depok 16424, Indonesia

Email korespondensi: e.yudiarsah@sci.ui.ac.id

Submitted 17 Mei 2018, accepted 25 Oktober 2018

ABSTRACT-The localization length and the *Density Of State* (DOS) of electron in a Poly(dA)-Poly(dT) DNA molecule at two temperatures have been calculated for several values of magnetic field. The understanding of electron localization length and DOS under the influence of magnetic fields and temperature is essential in understanding the electronic properties of DNA molecule. The calculation are carried out on a DNA molecule model that consists of adenine (A) and Thymine (T) nucleobases and sugar-phosphate backbone. The DNA molecule is modeled in tight binding Hamiltonian approach with semiempirical Slater-Koster theory and Peierls phase factor for introducing the effect of temperature and magnetic field, respectively. In the model, electron is allowed to move between nucleobase sites, backbone sites, and between backbone site and nucleobase site. The localization length is obtained from the smallest Lyapunov exponent which is calculated using transfer matrix method along with Gram-Schmidt orthonormalization procedure. The DOS is calculated using Green's function method by taking into account the presence of metallic electrode at both ends of the DNA molecule. The localization length and the DOS change as a result of the change in electron wave phase due to magnetic field. The change is observed at both temperature used in the study, but the change at lower temperature is larger than the one at higher temperature. Thermally agitated vibrational twisting motion perturbs electron motion in the DNA molecule such that the influence of magnetic field on the localization length and the DOS of electron at higher temperature becomes smaller.

KEYWORD: DNA Molecule, DOS, Localization Length, Poly(dA)-Poly(dT)

I. PENDAHULUAN

Beberapa tahun terakhir, mekanisme perpindahan muatan pada molekul DNA telah menarik perhatian banyak ilmuwan. DNA berpotensi untuk dijadikan sebagai kawat molekular (*molecular wire*) pada aplikasi nanoteknologi (Porath *et al.* 2000; Park *et al.* 2011), komponen dasar pembuatan biosensor (Zaffino *et al.* 2014), dan transistor molekular serta divais yang lain (Nokhrin *et al.* 2007). Setelah Eley dan Spivey melaporkan sifat konduksi molekul DNA pada tahun 1962 (Eley and Spivey 1962), berbagai penelitian eksperimen dan teori telah dilakukan dalam usaha memahami sifat transport muatan pada molekul ini di berbagai kondisi (Bezerril *et al.* 2009; Guo *et al.* 2008; Yamada *et al.* 2005). Eksperimen pada DNA periodik untai ganda poli(dG)-poli(dC) menunjukkan bahwa molekul

DNA jenis ini dapat berperilaku sebagai semi konduktor (Porath *et al.* 2000) dan juga dapat berperilaku sebagai konduktor (Fink dan Schönenberger 1999). Tetapi, pengukuran karakteristik I-V molekul DNA aperiodik memperlihatkan bahwa molekul ini dapat berperilaku sebagai isolator (Zhang *et al.* 2002) dan superkonduktor pada temperatur yang rendah (Kasumov *et al.* 2001).

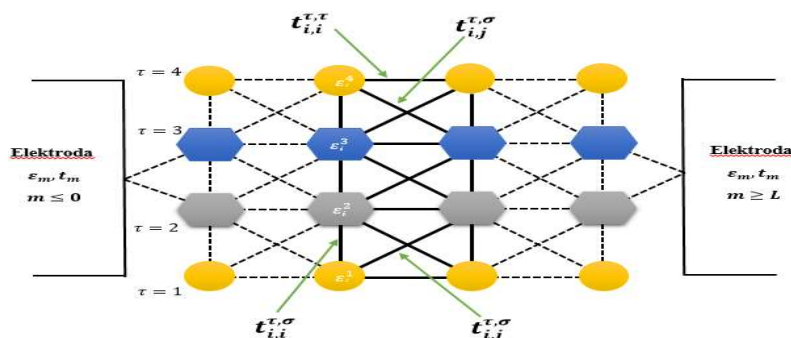
Keragaman hasil pengukuran ini mengindikasikan bahwa sifat transport molekul DNA dipengaruhi oleh beragam faktor. Faktor - faktor yang mempengaruhi sifat transport molekul ini antara lain susunan pasangan basa dari DNA itu sendiri (Wang *et al.* 2010; Jo *et al.* 2003; Klotsa *et al.* 2005; Roche 2003), termasuk ketidaksesuaian pasangan basa (Kratochvílová *et al.* 2010), dan pengaruh

lingkungan sekitar DNA seperti medium atau substrat (Guo *et al.* 2008; Roche 2003). Selain interaksi molekul DNA dengan ion-ion di medium ataupun permukaan substrat, pengaruh lingkungan dapat disebabkan oleh temperatur (Gutiérrez *et al.* 2005). Agitasi termal lingkungan menyebabkan gerakan basa penyusun DNA berupa vibrasi internal molekul (Jo *et al.* 2003; Muren *et al.* 2012). Selain hal-hal di atas, keberadaan medan magnet (Khatir *et al.* 2014; Wong *et al.* 2015) dan medan listrik serta interaksi molekul dengan elektroda (Kang *et al.* 2011) dapat memberikan hasil pengukuran yang berbeda. Telah dilaporkan bahwa secara eksperimen medan magnet mengganggu transport muatan di molekul DNA sehingga terjadi penurunan arus di molekul DNA saat medan magnet diperbesar (Khatir *et al.* 2014).

Dugaan keterlibatan proses transfer muatan listrik pada beberapa proses biologi di DNA telah menyebabkan sifat transfer dan transport muatan molekul ini semakin menarik minat peneliti. Peristiwa transfer muatan ditengarai terlibat pada proses pendeteksian dan perbaikan kerusakan (Dandliker *et al.* 1997; Boon *et al.* 2003) secara mandiri di DNA. Selain itu, transfer muatan mungkin pula terjadi pada proses mutasi DNA (Miller *et al.* 2015). Sistem sensor dan pensinyalan pada molekul DNA (Sontz *et al.* 2012; Genereux *et al.* 2010) mungkin melibatkan kemampuan DNA untuk

mengalirkan muatan listrik dari satu tempat ke tempat lain sebagai pembawa pesan.

Belum lama ini, Khatir dkk melaporkan bahwa potensi untuk mengubah sifat transport salah satu molekul DNA (DNA G4) dengan menerapkan medan magnet dan mengubah temperatur (Khatir *et al.* 2015). Karena itu, kami memutuskan untuk mempelajari pengaruh temperatur dan medan magnet pada molekul DNA periodik poli(dA)-poli(dT). Karena DNA merupakan molekul panjang dan fleksibel, kami melibatkan pengaruh gerakan osilasi memutar pasangan basa akibat agitasi termal dalam perhitungan. Selain mempengaruhi energi elektron di basa DNA, gerakan memutar pasangan basa juga mempengaruhi konstanta loncatan elektron antarbasa di DNA. Konstanta loncatan ini dinyatakan dengan teori semi-empiris Slater-Koster (Endress *et al.* 2004). Dalam penelitian ini, sifat transport muatan dipelajari dengan menghitung panjang lokalisasi dan *density of state* (DOS) elektron di molekul DNA. Panjang lokalisasi fungsi gelombang elektron dihitung dengan metode matriks transfer dan DOS elektron dihitung dengan menggunakan fungsi Green. Hasil perhitungan memperlihatkan bahwa medan magnet luar mempengaruhi panjang lokalisasi dan DOS elektron. Tetapi pengaruh medan magnet ini mengalami penurunan di temperatur tinggi.



Gambar 1 Model molekul DNA Poli(dA)-Poli(dT) yang diapit dua elektroda. *Strand* 1 dan 4 merupakan *backbone*, sementara *strand* 2 dan 3 masing-masing disusun oleh basa Adenin dan Timin. Garis yang menghubungkan tiap nukleotida (adenin, timin) dan *backbone* menyatakan jalur lintasan elektron yang mungkin.

II. METODE PENELITIAN

Dalam penelitian ini, kami menggunakan model DNA poli(dA)-poli(dT) dengan *backbone* (gula dan posfat) pada tiap-tiap basanya. Dalam perhitungan panjang lokalisasi elektron digunakan molekul DNA yang panjangnya 102 pasangan basa. Pada perhitungan DOS elektron, molekul DNA yang digunakan terdiri atas 32 pasangan basa dan dihubungkan ke elektroda di kedua ujungnya. Perbedaan jumlah pasangan basa ini bertujuan untuk mengefisienkan waktu dalam melakukan perhitungan. Karena susunan basa pada DNA poli(dA)-poli(dT) selalu berulang secara periodik seperti struktur kristal, perhitungan DOS dengan menggunakan 32 pasangan basa sudah cukup baik untuk melihat DOS elektron molekul DNA poli(dA)-poli(dT).

Tahun 2013, Qi dkk, memperlihatkan bahwa keberadaan *backbone* (gula dan

posfat) sangat perlu diperhitungkan dalam pemodelan (Qi *et al.* 2013). Pada model ini, keberadaan *backbone* sebagai jalur pergerakan elektron pun dilibatkan. Selain dapat berpindah antarbasa karena tumpang tindih orbital π ataupun antara basa dan *backbone*, elektron dapat pula berpindah dari satu situs *backbone* ke situs *backbone* terdekat. Dengan demikian, pada model DNA yang digunakan semua jalur loncatan elektron, hingga tetangga terdekat kedua, telah dilibatkan. Model ini sangat baik dalam memodelkan molekul DNA yang sesungguhnya (*real DNA molecule*). Gambar 1 memperlihatkan diagram skema molekul DNA yang diapit oleh dua elektroda metal. Gambar ini memperlihatkan semua jalur loncatan elektron pada molekul yang dilibatkan pada perhitungan. Model molekul DNA dinyatakan dengan model Hamiltonian ikatan kuat (*tight-binding*) sebagai berikut.

$$H_{DNA} = \sum_{i=1}^L \sum_{\tau=1}^4 \left\{ \varepsilon_i^{\tau} + \phi_i^{\tau} |i, \tau\rangle \langle i, \tau| + \sum_{\sigma=1}^4 \left(t_{i,i}^{\tau,\sigma} |i, \tau\rangle \langle i, \sigma| + t_{i,i+1}^{\tau,\sigma} |i, \tau\rangle \langle i+1, \sigma| + h.c \right) \right\} \quad (1)$$

dengan

$$\phi_i^{\tau} = b_{i-1,i}^{\tau} (\cos \Delta_{i-1,i}^{\tau,\sigma} - \cos \varphi_{eq}) + b_{i,i+1}^{\tau} (\cos \Delta_{i,i+1}^{\tau,\sigma} - \cos \varphi_{eq}) \quad (2)$$

dan

$$\Delta_{i-1,i}^{\tau,\sigma} = \varphi_{eq} - (\varphi_{i-1}^{\tau} - \varphi_i^{\sigma}); \Delta_{i,i+1}^{\tau,\sigma} = \varphi_{eq} - (\varphi_i^{\tau} - \varphi_{i+1}^{\sigma}). \quad (3)$$

Indeks i di persamaan (1) menyatakan nomor situs dan mempunyai jumlah maksimum L , jumlah pasangan basa pada molekul DNA poli(dA)-poli(dT) yang digunakan. Nomor untai (*strand*) di molekul DNA dinyatakan dengan indeks τ dan σ . Untai 1 dan 4 merupakan untai *backbone*, sementara untai 2 dan 3 masing-masing merupakan untai yang terdiri atas basa adenin (A) dan timin (T). ε_i^{τ} merupakan *onsite* energi basa atau *backbone* di situs i dan untai τ . *Onsite* energi basa yang digunakan untuk adenin sebesar 8,22 eV dan timin sebesar 9,06 eV, sedangkan *onsite* energi *backbone* diatur bernilai 9,6 eV (Suhendro *et al.* 2010). Parameter $t_{i,i+1}^{\tau,\sigma}$ menyatakan amplitudo loncatan elektron antarsitus, baik diuntai yang sama (*intra-strand*) maupun di untai yang berbeda (*inter-strand* diagonal). Parameter $t_{i,i}^{\tau,\sigma}$

menyatakan amplitudo loncatan elektron pada situs yang sama namun berbeda untai (*inter-strand* vertikal). Amplitudo loncatan elektron antarbasa DNA ini dinyatakan dengan model semi empirik Slater-Koster yang dijelaskan pada referensi (Endress *et al.* 2004). Setelah dilakukan ekspansi secara matematis diperoleh persamaan berikut (Rahmi dan Yudiarsah 2018). Amplitudo loncatan elektron diuntai yang sama dinyatakan di persamaan (4) dengan $\alpha^{pa} = 6.73$ dan $\beta^{pa} = 6.26$. Persamaan (5) merupakan amplitudo loncatan *inter-strand* diagonal dengan $\alpha^{da} = 1.39$ dan $\beta^{da} = 2.85$. Sementara amplitudo loncatan elektron *inter-strand* vertical diwakili persamaan (6) dengan $\alpha^{ve} = 1.00$ dan $\beta^{ve} = 11.5$.

$$t_{i,i+1}^{\tau,\tau} = t_{i,i+1}^{pa} \left[1 - \alpha_{i,i+1}^{pa} \sin^2 \left(\frac{\Delta_{i,i+1}^{\tau,\tau}}{2} \right) \right] \times \exp[-\beta_{i,i+1}^{pa} (\cos \varphi_{eq} - \cos \Delta_{i,i+1}^{\tau,\tau})] / \left[1 - \alpha_{i,i+1}^{pa} \sin^2 \left(\frac{\varphi_{eq}}{2} \right) \right], \quad (4)$$

$$t_{i,i+1}^{\tau,\sigma} = t_{i,i+1}^{da} \left[1 - \alpha_{i,i+1}^{da} \cos^2 \left(\frac{\Delta_{i,i+1}^{\tau,\sigma}}{2} \right) \right] \times \exp[\beta_{i,i+1}^{da} (\cos \varphi_{eq} - \cos \Delta_{i,i+1}^{\tau,\sigma})] / \left[1 - \alpha_{i,i+1}^{da} \cos^2 \left(\frac{\varphi_{eq}}{2} \right) \right] \quad (5)$$

$$t_{i,i}^{\tau,\sigma} = t_{i,i}^{ve} \left[1 + \alpha_{i,i}^{ve} \sin^2 \{ (\varphi_i^\tau - \varphi_i^\sigma) / 2 \} \right] \times \exp[\beta_{i,i}^{ve} \sin^2 \{ (\varphi_i^\tau - \varphi_i^\sigma) / 2 \}] \quad (6)$$

Variabel φ_i^τ pada persamaan (2) menyatakan perubahan *onsite* energi basa karena gerakan vibrasi memuntir pasangan basa akibat pengaruh temperatur lingkungan pada molekul DNA. Besaran $b_{i-1,i}^\tau$ dan $b_{i,i+1}^\tau$ merupakan ukuran kekuatan interaksi antara elektron dengan gerakan memuntir pasangan basa. Nilai parameter ini dan juga amplitudo loncatan elektron dapat dilihat di ref. (Rahmi dan Yudiarsah 2018). φ_i^τ adalah sudut puntir basa di situs i relatif terhadap posisi keseimbangannya. Nilai sudut puntir basa diasumsikan terdistribusi mengikuti distribusi Gaussian, dengan nilai rata-rata nol dan standar deviasi $\sqrt{k_b T / (I \omega^2)}$, dengan T adalah temperatur, k_b adalah konstanta Boltzmann, I adalah momen inersia basa, dan ω frekuensi gerak memuntir pasangan basa molekul DNA (Yakushevich 2004). Dalam penelitian ini digunakan frekuensi sebesar 1,02 meV pada temperatur 4,2 K dan 30 K. Dalam keadaan seimbang dua pasangan basa berdekatan membentuk sudut φ_{eq} yang dipilih sebesar 36° (Guo *et al.* 2008; Ramos *et al.* 2011).

Pada penelitian ini, pengaruh medan magnet dimodelkan dengan faktor fase Peierls yang menyebabkan amplitudo loncatan dari posisi r ke $r+\Delta$ menjadi $t_{r,r+\Delta} \exp(i e \theta_{r,r+\Delta} / \hbar)$ (Peierls 1933). $\theta_{r,r+\Delta}$ adalah factor fase Peierls. Untuk medan magnet dalam arah sejajar sumbu z (sepanjang molekul DNA), perpindahan elektron dari situs i ke situs j mengakibatkan faktor fase Peierls sebesar

$$\theta_{i,j} = -\frac{eB}{2\hbar} (x_j - x_i)(y_j + y_i) \quad (7)$$

dengan,

$$x_i = R \cos(i \varphi_{eq} + \varphi_i) \quad (8)$$

dan

$$y_i = R \sin(i \varphi_{eq} + \varphi_i + \pi) \quad (9)$$

merupakan koordinat posisi basa atau *backbone* molekul DNA, serta R adalah posisi situs dari sumbu simetri DNA poli(dA)-poli(dT), yaitu untuk backbone, adenine, dan Timin masing-masing 10\AA , $4,2\text{\AA}$, dan $5,2\text{\AA}$ (Yakushevich 2004).

Panjang lokalisasi fungsi gelombang elektron dihitung menggunakan metode transfer matrik seperti dijelaskan pada referensi (Klotsa *et al.* 2005; Suhendro *et al.* 2010). Pada metode ini, dilakukan proses perkalian matriks transfer dalam arah peningkatan nilai indeks situs dengan matrik transfer dalam arah pengurangan nilai indeks situs secara berulang. Untuk menghindari nilai fungsi gelombang yang membesar secara eksponensial, setiap lima kali perkalian matrik dilakukan proses ortonormalisasi Gram-Schmidt pada matrik hasil perkalian. Koefisien yang diperoleh dari proses ini kemudian digunakan untuk menghitung eksponen Lyapunov menggunakan formula

$$\gamma_{cl} = \left(\frac{\ln \left(\prod \alpha_{cl}^m \right)}{2K(N-1)} \right) \quad (10)$$

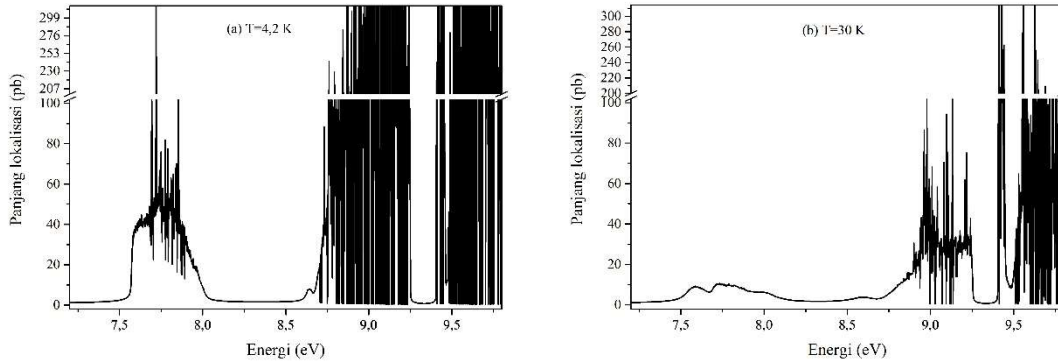
dengan α_{cl}^m adalah koefisien hasil ortonormalisasi (indeks m menyatakan jumlah ortonormalisasi dan indeks cl menyatakan urutan kolom matriks). K adalah jumlah keseluruhan perkalian tranfer matriks yang dilakukan dan N adalah banyaknya situs pada molekul DNA. Kemudian, panjang lokalisasi (λ) diperoleh dari invers nilai terkecil γ_{cl} . Densitas keadaan elektron molekul DNA poli(dA)-poli(dT) dihitung menggunakan fungsi Green. Fungsi Green yang digunakan dinyatakan dengan persamaan

$$G(\varepsilon, t) = [(\varepsilon + i\eta)[I] - H(t) - \sum(t)]^{-1} \quad (11)$$

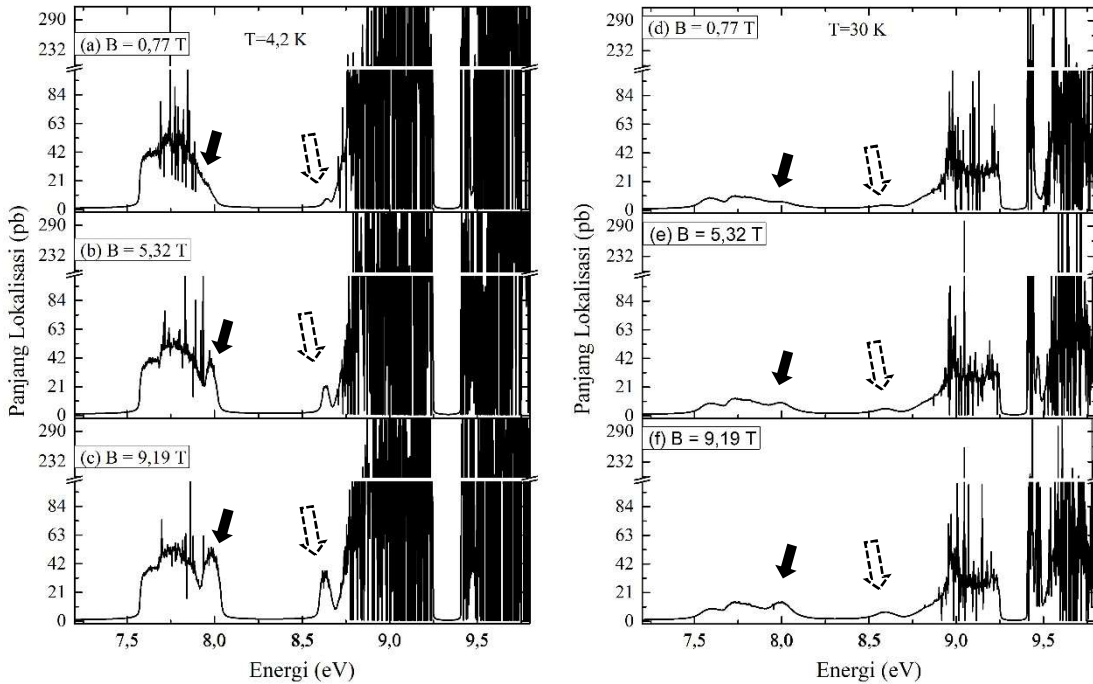
ε dan η masing-masing merupakan energi elektron di molekul DNA dan bilangan positif yang bernilai sangat kecil. Suku $H(t)$ merupakan matriks Hamiltonian molekul

DNA yang ditinjau. $\sum(t)$ merupakan matriks *self energy* akibat kontak antara molekul DNA dan elektroda. Kemudian, nilai DOS dihitung menggunakan formula

$$DOS(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \sum \text{Im Tr}[G(\varepsilon, t)]. \quad (12)$$



Gambar 2 Panjang lokalisasi gelombang elektron di molekul DNA poli(dA)-poli(dT) yang dihitung tanpa pengaruh medan magnet pada frekuensi gerak memutar $\omega=1,02$ meV serta temperatur (a) 4,2 K dan (b) 30 K.



Gambar 3 Panjang lokalisasi gelombang elektron di molekul DNA poli(dA)-poli(dT) yang dihitung pada frekuensi gerak memutar $\omega=1,02$ meV dan temperatur 4,2 K {30 K} dalam pengaruh medan magnet (a) 0,77 T, (b) 5,32 T dan (c) 9,19 T {(d) 0,77 T, (e) 5,32 T dan (f) 9,19 T}.

III. HASIL DAN PEMBAHASAAN

Gambar 2 memperlihatkan panjang lokalisasi gelombang elektron di molekul DNA poli(dA)-poli(dT) berukuran panjang

102 pasangan basa yang dihitung pada temperatur 4,2 K dan 30 K tanpa pengaruh medan magnet. Pada temperatur 4,2 K, spektrum panjang lokalisasi memperlihatkan

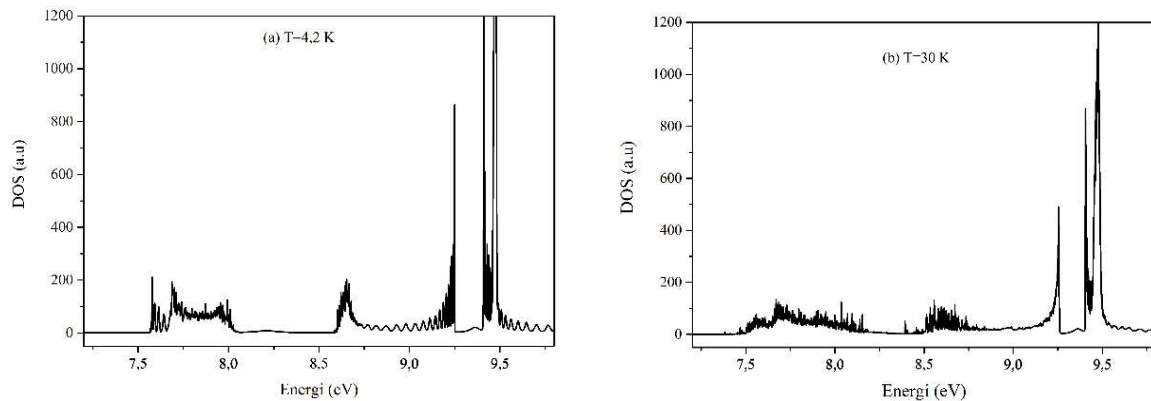
tiga pita energi dengan panjang lokalisasi bernilai cukup besar, yaitu pita di rentang energi sekitar 7,55-8,05 eV, 8,6-9,25 eV, dan 9,4-9,9 eV. Pita-pita tersebut dipisahkan oleh celah energi dengan panjang lokalisasi sangat kecil yaitu di rentang energi sekitar 8,05-8,6 eV dan 9,25-9,4 eV. Di celah ini, elektron berada di keadaan terlokalisasi.

Pada temperatur 4,2 K (gambar 2.a), banyak keadaan di pita dengan energi lebih dari 8,7 eV mempunyai panjang lokalisasi lebih dari panjang DNA. Energi-energi tersebut merupakan keadaan *extended*. Pada keadaan-keadaan ini elektron dapat bergerak dalam jarak yang lebih dari ukuran molekul DNA. Keadaan-keadaan pada pita-pita dengan energi lebih dari 8,7 eV ini mengalami penurunan panjang lokalisasi dengan kenaikan temperatur. Selain itu, celah di rentang energi sekitar 8,05-8,6 eV di temperatur 4,2 K mengalami penyempitan karena panjang lokalisasi keadaan di tepi celah membesar dengan temperatur. Pada temperature 30 K, keadaan *extended* menjadi semakin sedikit (lihat gambar 2.b). Hal ini memperlihatkan bahwa gerak memuntir pasangan basa karena agitasi termal memperburuk kemampuan konduksi listrik molekul DNA. Hasil ini sesuai dengan hasil perhitungan dengan model tanpa keberadaan *backbone* yang dilaporkan di ref (Suhendro *et al.* 2010).

Panjang lokalisasi yang dihitung dalam pengaruh medan magnet sebesar 0,77 T, 5,32 T, dan 9,19 T pada temperatur 4,2 K berturut-turut diperlihatkan di gambar 3(a), 3(b), dan 3(c). Pada medan magnet kecil (0,77 T) perubahan pada panjang lokalisasi kurang tampak. Tetapi, dengan peningkatan medan magnet, perubahan panjang lokalisasi semakin terlihat. Hal ini dapat diamati, sebagai contoh, pada keadaan di energi sekitar 8,0 eV (panah hitam) dan 8,6 eV (panah putus-putus). Di kedua daerah energi ini panjang lokalisasi meningkat dengan pertambahan medan magnet. Panjang lokalisasi di energi lain juga mengalami perubahan, tetapi tidak terlihat

jelas seperti pada kedua daerah energi ini. Hal ini terjadi karena keberadaan medan magnet hanya mengubah fase fungsi gelombang elektron. Perubahan fase ini menyebabkan jangkauan fungsi gelombang berubah. Karena itu, pada energi tertentu panjang lokalisasi bertambah sementara di energi lain panjang lokalisasi berkurang. Perubahan panjang lokalisasi ini sangat kecil jika dibandingkan dengan panjang lokalisasi daerah *extended*. Karena itu, perubahan panjang lokalisasi di pita energi *extended* menjadi sulit teramati. Selain perubahan panjang lokalisasi, terjadi pula perubahan lebar celah energi di energi sekitar 8,1-8,7 eV. Celah energi ini menyempit dengan perubahan medan magnet dari 0,77 T ke 9,19 T. Perubahan lebar celah ini terjadi karena keadaan elektron yang awalnya mempunyai panjang lokalisasi sangat kecil, mengalami perubahan fase gelombang sehingga panjang lokalisasinya meningkat. Sementara pada celah energi 9,25-9,4 eV, perubahan lebar celah yang terjadi hampir tidak teramati.

Perubahan panjang lokalisasi karena perubahan medan magnet juga teramati pada hasil perhitungan panjang lokalisasi di temperature 30 K, lihat panah penuh dan panah putus-putus di gambar berturut-turut 3(d), 3(e), dan 3(f). Tetapi perubahan panjang lokalisasi pada temperatur ini tidak sedramatis perubahan yang terjadi di temperatur 4,2 K. Pada temperatur 30 K terjadi kompetisi antara pengaruh vibrasi gerak memutar pasangan basa dengan medan magnet pada fase gelombang elektron sedemikian hingga pengaruh medan magnet menjadi lebih lemah. Hal ini mempengaruhi gelombang-gelombang elektron yang tiba di satu situs melalui beragam rute sehingga gelombang elektron hasil superposisi mengalami pelemahan. Panjang lokalisasi elektron yang dihitung dalam pengaruh medan magnet-medan magnet yang dijelaskan sebelumnya pada temperatur 30 K masing-masing diperlihatkan di gambar 3(d), 3(e), dan 3(f).



Gambar 4. DOS elektron di molekul DNA poli(dA)-poli(dT) yang dihitung tanpa pengaruh medan magnet pada frekuensi gerak memutar $\omega=1,02$ meV serta temperatur (a) 4,2 K dan (b) 30 K

DOS elektron pada molekul DNA poli(dA)-poli(dT) berukuran panjang 32 pasangan basa yang di hitung pada temperatur 4,2 K dan 30 K tanpa pengaruh medan magnet diperlihatkan di gambar 4. Pada kedua temperatur, spektrum DOS elektron di kedua temperature ini terlihat merepleksikan profil panjang lokalisasi yang didiskusikan di muka berupa tiga pita energi dengan DOS yang cukup tinggi. Bentuk profile yang sesuai dengan profil panjang lokalisasi ini memperlihatkan bahwa keberadaan elektroda metal di kedua ujung molekul DNA tidak mempengaruhi sifat transport, sehingga dapat disimpulkan bahwa hasil perhitungan DOS merefleksikan DOS elektron di molekul DNA tanpa elektroda. Pada temperatur 4,2 K (gambar 4.a) pita-pita tersebut terlihat di rentang energi sekitar 7,56-8,05 eV, 8,57-9,25 eV dan 9,4-9,9 eV. Pita-pita tersebut dipisahkan oleh celah energi dengan DOS yang cukup kecil yaitu celah di rentang energi sekitar 8,05-8,57 eV dan 9,25-9,4 eV. Di celah ini, densitas keadaan elektron bernilai rendah, sehingga kontribusi ke proses transport keadaan-keadaan ini pun menjadi minimal. Pita energi keadaan *extended* memperlihatkan nilai DOS yang tinggi. Beberapa energi memiliki nilai DOS yang sangat tinggi. Pada energi-energi ini terjadi singularitas van Hove.

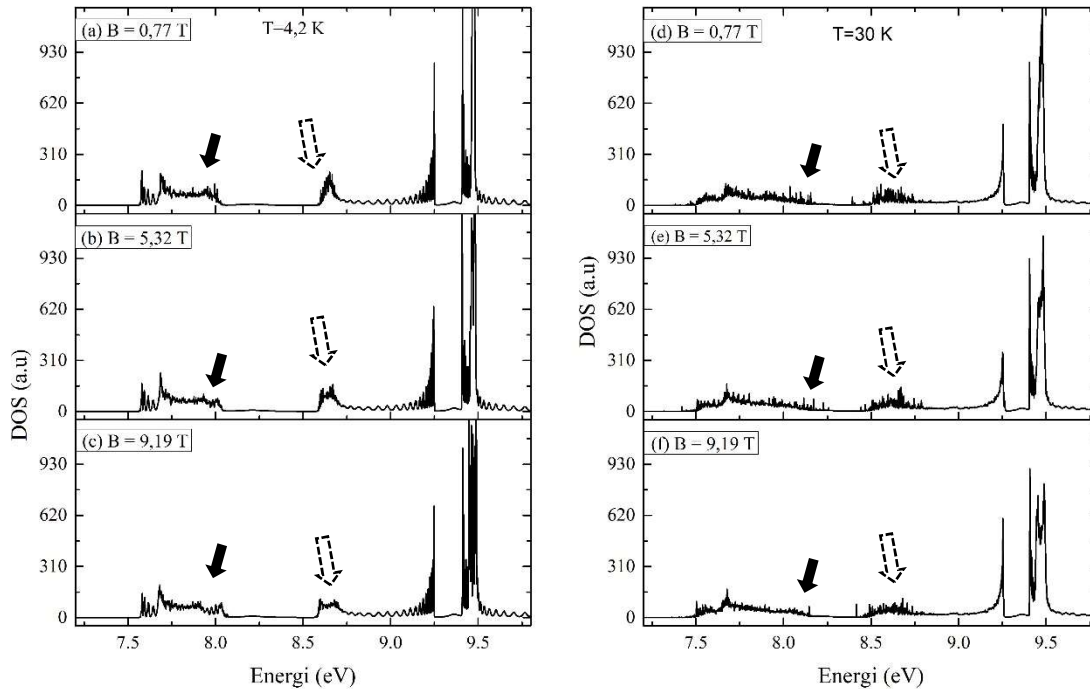
Seperti pada panjang lokalisasi, spektrum DOS elektron pun mengalami perubahan dengan perubahan temperatur. Pada temperature 30 K (gambar 4.b), secara umum nilai DOS elektron di pita keadaan *extended*

menjadi lebih rendah daripada di temperatur 4,2 K. Pengurangan DOS elektron dengan temperatur ini mengkonfirmasi hasil penelitian dengan model tanda keberadaan *backbone* (Suhendro *et al.* 2010) bahwa kemampuan konduksi listrik molekul DNA dilemahkan oleh gerak memuntir pasangan basa. Selain penurunan DOS, pita keadaan *extended* dengan energi di bawah 9,3 eV mengalami pelebaran akibat peningkatan DOS elektron di tepi pita sehingga lebar celah mengecil. Walaupun secara umum terjadi perubahan nilai DOS elektron, terutama pada energi rendah, gambar 4.b memperlihatkan bahwa pengaruh gerakan vibrasi memuntir pada DOS di energi tinggi, lebih dari 9,3 eV tidak begitu besar. Singularitas Van Hove di energi lebih dari 9,3 eV masih tetap teramati.

DOS elektron di molekul DNA poli(dA)-poli(dT) dalam pengaruh medan magnet pada temperatur 4,2 K dan 30 K diperlihatkan di gambar 5. Pada medan rendah (0,77 T), nilai DOS sangat mirip dengan nilai DOS di kondisi tanpa medan magnet. Hal ini teramati baik di temperatur 4,2 K (gambar 5.a) maupun temperatur 30 K (gambar 5.d). Sama dengan kecenderungan yang terjadi pada panjang lokalisasi, pengaruh medan magnet pada DOS di temperatur 4,2 K (gambar 5.b dan 5.c) lebih menonjol dari di temperature 30K (gambar 5.e dan 5.f). Pada temperature 4,2 K, perubahan medan magnet menjadi 5,32 T dan 9,19 T telah meningkatkan besar DOS elektron di sekitar energi 8,0 eV (lihat panah hitam) sehingga terjadi

pengecilan gap antara dua pita. Peningkatan DOS ini disertai dengan perubahan profil dan

penurunan DOS keadaan elektron di sekitar energi 8,7 eV (lihat panah putus-putus).



Gambar 5 DOS elektron di molekul DNA poli(dA)-poli(dT) yang dihitung pada frekuensi gerak memutar $\omega=1,02$ meV dan temperatur 4,2 K {30 K} dalam pengaruh medan magnet (a) 0,77 T, (b) 5,32 T dan (c) 9,19 T {(d) 0,77 T, (e) 5,32 T dan (f) 9,19 T}.

IV. KESIMPULAN

Sifat transport muatan DNA poli(dA)-poli(dT) di bawah pengaruh medan magnet (0,77 T, 5,32, dan 9,19 T) telah dipelajari dengan menghitung panjang lokalisasi dan DOS elektron pada temperatur 4,2 K dan 30 K dengan frekuensi vibrasi memuntir pasangan basa 1,02 meV. Kehadiran medan magnet menyebabkan perbedaan fase gelombang elektron yang tiba di satu situs melalui beragam lintasan sehingga mengubah panjang lokalisasi dan DOS elektron. Perubahan panjang lokalisasi dan DOS teramati terutama di energi kurang dari 9,3 eV. Perubahan ini berupa peningkatan besar panjang lokalisasi dan DOS elektron pada energi tertentu sehingga terjadi perubahan ukuran pita dengan nilai panjang lokalisasi dan DOS elektron cukup besar. Peningkatan nilai DOS di beberapa energi disertai dengan penurunan nilai DOS di beberapa energi lain. Kompetisi antara medan magnet dan vibrasi memuntir pasangan basa melemahkan pengaruh medan magnet. Hasil perhitungan panjang lokalisasi dan DOS

elektron dengan model ini mengkonfirmasi hasil perhitungan dengan model lain bahwa gerak memuntir pasangan basa karena agitasi termal memperburuk sifat transport molekul DNA.

V. UCAPAN TERIMA KASIH

Penelitian didanai sebagian oleh Universitas Indonesia melalui Hibah Publikasi Internasional Terindeks untuk Tugas Akhir (PITTA) Tahun Anggaran 2017, no. kontrak: 648/UN2.R3.1/HKP.05.00/2017. Penulis mengucapkan terima kasih kepada Daniel K. Suhendro untuk parameter-parameter yang digunakan pada penelitian ini. Serta terima kasih juga kepada lab. CISCO dep. Fisika Universitas Indonesia atas izin menggunakan fasilitas laboratorium.

VI. DAFTAR PUSTAKA

Bezerril, L. M., Moreira, D. A., Albuquerque, E. L., Fulco, U. L., de Oliveira, E. L., & de Sousa, J. S., 2009, Current-voltage characteristics of double-strand DNA

- sequences, *Physics Letters A* 373: 3381-3385.
- Boon, E. M., Livingston, A. L., Chmiel, N. H., David, S. S., & Barton, J. K., 2003, DNA-mediated charge transport for DNA repair, *Proceeding of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 100: 12543–12547.
- Dandliker, P. J., Holmlin, R. E., & Barton, J. K., 1997, Oxidative Thymine Dimer Repair in the DNA Helix, *Science*, 275: 1465–1468.
- Eley, D. D., & Spivey, D. I., 1962, Semiconductivity of Organic Substances. Part 9.—Nucleic Acid in the dry state, *Transactions of the Faraday Society* 58, 411.
- Endress, R. G., Cox, D. L., & Singh, R. R. P., 2004, Colloquium: The quest for high-conductance DNA, *Reviews of Modern Physics*, 76: 195–214.
- Fink, H. W., & Schönenberger, C., 1999, Electrical conduction through DNA molecules, *Nature* 398: 407-10.
- Genereux, J. C., Boal, A. K., & Barton, J. K., 2010, DNA-mediated charge transport in redox sensing and signaling, *Journal of the American Chemical Society*, 132: 891–905.
- Guo, A.-M., Xiong, S.-J., Yang, Z., & Zhu, H.-J., 2008, Enhancement of transport in DNA-like systems induced by backbone disorder, *Physical Review E* 78, 0619221–0619225.
- Gutiérrez, R., Mandal, S., & Cuniberti, G., 2005, Quantum Transport through a DNA Wire in a Dissipative Environment, *Nano Letters* 5, 1093.
- Jo, Y.-S., Lee, Y., & Roh, Y., 2003, Current-voltage characteristics of λ - and poly-DNA, *Materials Science and Engineering: C* 23: 841–846.
- Kang, D., Jiang, H., Sun, Z., Qu, Z., & Xie, S., 2011, Magnetic field tuned charge transport in a G4-DNA molecular devices, *IOP Physics: Condensed Matter* 23, 055302.
- Kasumov, A. Y., Kociak, M., Guéron, S., Reulet, B., Volkov, V. T., Klinov, D. V., & Bouchiat, H., 2001, Proximity induced superconductivity in DNA, *Science* 291, 280.
- Khatir, N. M., Abdul-Malek, Z., & Banihashemian, S. M., 2015, Influences of Magnetic Fields on Current-voltage characteristics of gold-DNA-gold structure with variable gaps, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 36, pp. 134–139.
- Khatir, N. M., Malek, Z. A., & Banihashemian, S.M., 2014, Temperature and magnetic field driven modification in the I-V features of gold-DNA-gold structure, *Sensors* 14: 19229 – 19241.
- Klotsa, D., Romer, R.A., & Turner, M.S., 2005, Electronics Transport in DNA, *Biophysical Journal* 89, 2187.
- Kratochvílová, I., Todorciuc, T., Král, K., Němec, H., Buncěk, M., Šebera, J., Záliš, S., Vokáčová, Z., Sychrovský, V., Bednářová, L., Mojzeš, V., & Schneider, B., 2010, Charge transport in DNA oligonucleotides with various base-pairing patterns, *The Journal of Physical Chemistry B* 114: 5196–5205.
- Miller Jr, J. H., Villagrán, M. Y. S., Maric, S., & Briggs, S. M., 2015, Normal and Impaired charge transport in biological system, *Physica B: Condensed Matter*, 460: 119-125.
- Muren, N. B., Olmon, E. D., & Barton, J. K., 2012, Solution, surface, and single molecule platforms for the study of DNA-mediated charge transport, *Physical Chemistry Chemical Physics* 14: 13754–13771.
- Nokhrin, S., Baru, M., & Lee, J. S., 2007, A field-effect transistor available in M-DNA, *Nanotechnology* 18: 095205-095210.
- Park, M. J., Fujitsuka, M., Kawai, K., & Majima, T., 2011, Direct measurement of the dynamics of excess electron transfer through consecutive thymine sequence in DNA, *Journal of the American Chemical Society* 133: 15320-15323.
- Peierls, R., 1933. Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen, *Zeitschrift Für Physik*, 80(11–12), 763–791.
- Porath, D., Bezryadin, A., de Vries, S., & Dekker, C., 2000, Direct measurement of electrical transport through DNA molecules, *Nature* 403: 635-638.
- Qi, J., Edirisinghe, N., Rabbani, M. G., & Anantram, M. P., 2013, Unified model for conductance through DNA with the

- Landauer-Büttiker formalism, *Physical Review B* 87, 085404.
- Rahmi, K. A. & Yudiarsah, E., 2018, "I-V Characteristics Of A Four-Chain DNA Model In Environment Disorder", akan terbit.
- Ramos, M. M. D. & Correia, H. M. G., 2011, "Electric field induced charge transfer through single- and double-stranded DNA polymer molecules," *Soft Matter*, 7, 10091.
- Roche, S., 2003, Sequence dependent DNA-mediated conduction, *Physical Review Letters* 91: 1081011–1081014.
- Sontz, P. A., Muren, N. B., & Barton, J. K., 2012, DNA charge transport for sensing and signaling, *Accounts of Chemical Research*, 45: 1792–1800.
- Suhendro, D. K., Yudiarsah, E., & Saleh, R., 2010, "Effect of phonons and backbone disorder on electronic transport in DNA," *Physica B: Condensed Matter*, 4059(23), 4806–4811.
- Wang, X. F., Chakraborty, T., & Berashevich, J., 2010, Quantum transport anomalies in DNA containing mispairs, *Nanotechnology* 21, 485101.
- Wong, J. R., Lee, K. J., Shu, J.-J., & Shao, F., 2015, Magnetic fields facilitate DNA-mediated charge transport, *Biochemistry*, 54(21), 3392–3399.
- Yakushevich, L. V., 2004, Nonlinear physics of DNA 2nd ed (Weinheim: Wiley-VCH).
- Yamada, H., Starikov, E. B., Henning, D., & Archilla, J. F. R., 2005. Localization properties of electronic states in a polaron model of poly(dG)-poly(dC) and poly(dA)-poly(dT) DNA polymers, *The European Physical Journal E* 17, 149.
- Zaffino, R. L., Mir, M., & Samitier, J., 2014. Label-free detection of DNA hybridization and single point mutations in a nano-gap biosensor, *Nanotechnology* 25, 105501.
- Zhang, Y., Austin, R. H., Kraeft, J., Cox, E. C., & Ong, N. P., 2002, Insulating behavior of λ -DNA on the micron scale, *Physical Review Letters* 89, 198102.