

ABSTRAK

Kestabilan pada interaksi fundamental material sensor biomagnetik telah dipastikan menggunakan metode *density functional theory*. Metode DFT yang digunakan merupakan DFT murni dengan hanya meninjau interaksi coulomb antar atom penyusun sistem. Dalam perhitungannya DFT murni mengabaikan beberapa faktor fisis seperti penambahan kalor, faktor koreksi *zero point*, massa atom dan lainnnya. Kestabilan sistem diperlukan untuk mengetahui adanya kemungkinan terbentuknya sistem Fe₂S₂ sisteina yang ditinjau dari minimisasi energi. Energi yang diperoleh memiliki nilai negatif sehingga reaksi pembentukan sistem dapat terjadi secara spontan. Selain penentuan kestabilan, analisis mengenai mekanisme interaksi pada Fe₂S₂ sisteina juga telah dilakukan. Mekanisme interaksi yang ditinjau mencakup transfer muatan, distribusi muatan dan struktur elektronik sistem. Hasilnya diketahui bahwa ikatan terbentuk antar unsur Fe dan S. Pembentukan ikatan ini didominasi dengan penarikan muatan oleh unsur S dengan sifat keelektronegatifan tinggi yang dimilikinya. Kajian selanjutnya mengenai reaksi *intermediate* untuk mengetahui energi *barrier* yang digunakan untuk melakukan pembentukan molekul H₂O pada sistem. Dari energi *barrier* tersebut diketahui bahwa reaksi pembentukan molekul H₂O merupakan reaksi endotermik. Molekul H₂O yang terbentuk diharapkan dapat terlepas dari sistem dan digantikan oleh ikatan O-H pada *Cryptochrome* untuk menjalankan fungsi magnetoreseptor. Penelitian selanjutnya diharapkan mampu menggambarkan interaksi antara sistem Fe₂S₂ sisteina dengan *Cryptochrome* dengan set dimensi yang diperbesar.

Kata kunci : Sisteina, Fe₂S₂, DFT (*Density Functional Theory*) dan Kestabilan

ABSTRACT

The stability of fundamental interactions of biomagnetics sensor material has been confirmed using DFT method. DFT method that used is a pure DFT by only reviewing the coulomb interaction between atoms making up the system. The calculations of Pure DFT ignores some physical factors such as addition of heat, zero point, correction factors, atomic mass and others. The stability of system is needed to determine the possibility of the formation of Cysteine Fe₂S₂ system in terms of energy minimization. The energy which had obtained, had a negative value so that the formation reaction system can occur spontaneously. In addition to the determination of stability, analyzed the mechanisms of interaction on Fe₂S₂ Cysteine has also been done. The mechanisms that are reviewed include charge transfer, charge distribution and electronic structure of the system. The results is revealed that a bond is formed between these elements Fe and S. This bond formation is dominated by the withdrawal of the charge by the element S to the nature of its high electronegativity. Further research on the intermediate reaction to know barrier energy that used to make the formation of H₂O molecule on the system. From the energy barrier is known that H₂O molecules forming reaction is endothermic. H₂O molecule that formed is expected to be detached from the system and replaced by bonding O-H on cryptochrome to perform the function magnetoreceptor. The next research are expected to describe the interactions between the system Fe₂S₂ Cysteine with cryptochrome to set the dimensions of the enlarged.

Keywords: Cysteine, Fe₂S₂, DFT, and stability.