

Research Article

Pendekatan Simulasi Medan Gaya Untuk Menganalisa Stabilitas Struktur Molekuler Cyanidin-3-Glucoside Menggunakan Avogadro: Studi pendahuluan

A Force Field Simulation Approach to Analyze the Molecular Structure Stability of Cyanidin-3-Glucoside Using Avogadro: A Preliminary Study

Permono Adi Putro*, Desi Wulandari, Devia Putri Wulandari, Fitriah Nurfaidah, M. Farid Ahdan, Seviana Chaerunnisa, Vina Umaya Octaviani

Department of Physics, Faculty of Science, Universitas Mandiri, Subang, Indonesia

*Corresponding Author: permonoadi29@gmail.com

ARTICLE INFO

Article history:

Received : 30 November 2024

Revised : 1 December 2024

Accepted : 3 December 2024

Available Online : 6 December 2024

Keywords:

Cyanidin-3-Glucoside
Computer Simulation
Force Field Theory
Avogadro
Molecular Stability

ABSTRACT

Cyanidin-3-glucoside (C3G) is a flavonoid compound that is an antioxidant and natural colorant widely found in berries and vegetables such as red cabbage. This study aims to explore the structural stability of C3G using computer simulations based on force field theory through Avogadro software. In this study, the Universal Force Field (UFF), Merck Molecular Force Field (MMFF94), and General Amber Force Field (GAFF) methods were used to analyze the stability of C3G. The energy optimization results showed that the Ghemical method produced a more stable structure than other methods, although there was a discrepancy with GAFF. The GAFF method was more stable than UFF, but required more energy to achieve stability. Overall, the difference in force field methods affected the molecule's stability through optimization energy and structure parameterization variations, which affected the distance and angle of atomic bonds. These findings provide an efficient picture of the stable conformation of C3G, which can be applied in the food, health, and cosmetic industries.

ABSTRAK

Kata kunci:

Cyanidin-3-Glucoside
Simulasi Komputer
Teori Medan Gaya
Avogadro
Stabilitas Molekuler

Cyanidin-3-glucoside (C3G) adalah senyawa flavonoid yang berperan sebagai antioksidan dan pewarna alami yang banyak ditemukan dalam buah beri dan sayuran seperti kubis merah. Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi stabilitas struktur C3G menggunakan simulasi komputer berbasis teori medan gaya (force field) melalui perangkat lunak Avogadro. Dalam penelitian ini, metode Universal Force Field (UFF), Merck Molecular Force Field (MMFF94), dan General Amber Force Field (GAFF) digunakan untuk menganalisis stabilitas C3G. Hasil optimasi energi menunjukkan bahwa metode Ghemical menghasilkan struktur yang lebih stabil dibandingkan metode lainnya, meskipun terdapat ketidaksesuaian dengan GAFF. Metode GAFF lebih stabil daripada UFF, namun membutuhkan energi lebih banyak untuk mencapai kestabilan. Secara keseluruhan, perbedaan metode medan gaya memengaruhi stabilitas molekul melalui variasi energi optimasi dan parameterisasi struktur, yang berdampak pada jarak dan sudut ikatan atom. Temuan ini memberikan gambaran efisien mengenai konformasi stabil C3G, yang dapat diterapkan dalam industri makanan, kesehatan, dan kosmetik.

Pendahuluan

Cyanidin-3-glucoside (C3G) adalah senyawa flavonoid yang termasuk dalam kelompok antosianin, yang umumnya ditemukan dalam buah-buahan berpigmen merah atau biru, seperti buah beri, serta pada sayuran seperti kubis merah dan zaitun. Selain itu, C3G juga ditemukan pada beberapa organ tubuh, termasuk otak, hati, ginjal, dan paru-paru pada berbagai model hewan yang diberi makanan kaya antosianin.¹ C3G memiliki berbagai manfaat, terutama sebagai antioksidan yang berperan melindungi tubuh dari kerusakan sel akibat radikal bebas. Senyawa ini juga digunakan sebagai pewarna alami dalam industri makanan dan minuman karena kemampuannya menghasilkan warna merah atau ungu yang menarik dan aman untuk dikonsumsi.²

Stabilitas C3G sangat dipengaruhi oleh perubahan kondisi lingkungan, terutama pH. Pada pH rendah (sekitar 1-3), C3G berada dalam bentuk kation flavylium yang stabil, yang menghasilkan warna merah cerah. Namun, saat pH meningkat (di atas pH 7), struktur molekul C3G mulai berubah, menurunkan stabilitasnya dan mengubah warna menjadi lebih pucat atau biru.² Stabilitas C3G juga dapat dipengaruhi oleh suhu, cahaya, dan enzim, yang sering menyebabkan degradasi senyawa ini. Oleh karena itu, penting untuk memahami secara mendalam faktor-faktor yang mempengaruhi stabilitas struktur C3G, agar dapat memaksimalkan manfaatnya dalam berbagai aplikasi, baik di industri makanan, kesehatan, maupun kosmetik.³

Untuk mempelajari stabilitas struktur C3G dalam kondisi lingkungan yang berbeda, pendekatan eksperimental seperti spektroskopi UV-Vis, HPLC, NMR, dan spektrometri massa sering digunakan. Namun, pendekatan ini memiliki keterbatasan, antara lain ketidakmampuan untuk mengamati interaksi molekuler secara rinci dan ketergantungan pada kondisi laboratorium yang tidak selalu mencerminkan kondisi alam.⁴ Sebagai alternatif, simulasi komputer dengan menggunakan metode kimia kuantum seperti *Density-Functional Theory* (DFT) dan *Density-Functional Tight-Binding* (DFTB) dapat memberikan wawasan yang lebih mendalam mengenai konformasi molekul dan stabilitas C3G dalam berbagai lingkungan.⁵ Metode ini mampu menghitung distribusi elektron dalam molekul dengan akurasi tinggi, meskipun membutuhkan waktu komputasi yang lama untuk molekul besar seperti C3G.

Namun, penelitian ini tidak akan menggunakan DFT atau DFTB, melainkan akan berfokus pada penggunaan teori medan gaya (*force field*) untuk simulasi stabilitas C3G. Teori medan gaya seperti *Universal Force Field* (UFF), *Merck Molecular Force Field* (MMFF94), dan *General Amber Force Field* (GAFF) menawarkan pendekatan yang lebih efisien dan cepat dalam menggambarkan interaksi molekuler dan dinamika molekul dalam sistem besar. Meskipun kurang akurat dibandingkan dengan metode kuantum seperti DFT, teori medan gaya lebih cocok untuk simulasi yang melibatkan sistem molekuler besar dan dapat memberikan gambaran yang baik mengenai stabilitas dan interaksi molekul dalam kondisi yang berbeda.⁶

Dalam penelitian ini, perangkat lunak Avogadro akan digunakan untuk mengoptimalkan geometri molekul dan menganalisa stabilitas C3G. Dengan menggunakan pendekatan teori medan gaya, diharapkan penelitian ini dapat memberikan gambaran yang lebih efisien mengenai konformasi stabil C3G dan interaksi molekuler yang mungkin terjadi dalam aplikasi farmasi dan biofisika.⁷ Dengan demikian, tujuan penelitian ini adalah untuk mengeksplorasi stabilitas struktur C3G menggunakan simulasi komputer berbasis teori medan gaya, yang dapat memberikan pemahaman lebih lanjut mengenai stabilitas molekul C3G.

Metodologi Penelitian

Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan pada tanggal 30 September hingga 01 Desember 2024 di Laboratorium Fisika, Fakultas Sains, Universitas Mandiri, Subang, Jawa Barat.

Alat dan Bahan

Penelitian ini menggunakan peralatan berupa perangkat keras laptop dengan spesifikasi RAM 8GB, Quad Core Processor (Intel R Core™ i5-1235U 1.30 GHz). Program Avogadro digunakan untuk mendesain dan visualisasi struktur model 3D.

Prosedur Penelitian

- Mengambil data dari PubChem

Proses dimulai dengan membuka aplikasi PubChem dan mencari senyawa yang diinginkan, seperti "Cyanidin-3-glucoside". Setelah memilih hasil yang sesuai, data terkait senyawa tersebut dapat diunduh dalam format CSV untuk memudahkan pengolahan lebih lanjut di Excel.

- Edit dan cek data dengan notepad

Setelah mengunduh data, file tersebut dibuka menggunakan Notepad++ untuk memeriksa dan mengedit kolom data yang diperlukan. Data yang tidak relevan dapat dihapus, kemudian file disimpan untuk diproses lebih lanjut.

- Import data ke Avogadro untuk visualisasi struktur molekul

Data struktur molekul diimpor ke dalam Avogadro dengan memilih file yang telah disiapkan. Setelah itu, struktur molekul akan ditampilkan dalam bentuk 3D. Untuk mendapatkan geometri molekul yang optimal, fitur "Optimize Geometry" digunakan untuk mengurangi energi dan mencapai struktur yang paling stabil.

- Mengoptimalkan kestabilan struktur molekul dengan teori force field

Pada tahap ini, berbagai teori force field seperti GAFF dan GHEMICAL digunakan untuk mengoptimalkan struktur molekul. Setiap force field diatur dengan parameter konvergensi dan iterasi yang sesuai, lalu proses optimasi dijalankan. Hasil dari setiap optimasi disimpan dan dicatat, termasuk nilai energi dan iterasi yang dicapai.

- Menganalisa parameter kestabilan struktur molekul

Setelah molekul dioptimalkan, analisis dilakukan menggunakan Avogadro untuk menghitung energi total dan dipole moment. Energi total dihitung berdasarkan interaksi antar-atom, sedangkan dipole moment dianalisis untuk memahami orientasi dan intensitasnya. Hasil perhitungan dan perubahan geometri molekul dicatat dan disimpan untuk dokumentasi lebih lanjut, seperti perbandingan antara struktur asli dan yang telah dioptimalkan.

Teknik Analisis Data

Untuk mendapatkan hasil presentase proporsi data dengan membandingkan energi awal dengan energi selanjutnya (yang sudah diurutkan) dapat dilihat pada persamaan (1).

$$\% \Delta \text{Energi optimasi} = \frac{\text{Energi selanjutnya} - \text{Energi awal}}{\text{Energi awal}} \times 100\% \quad (1)$$

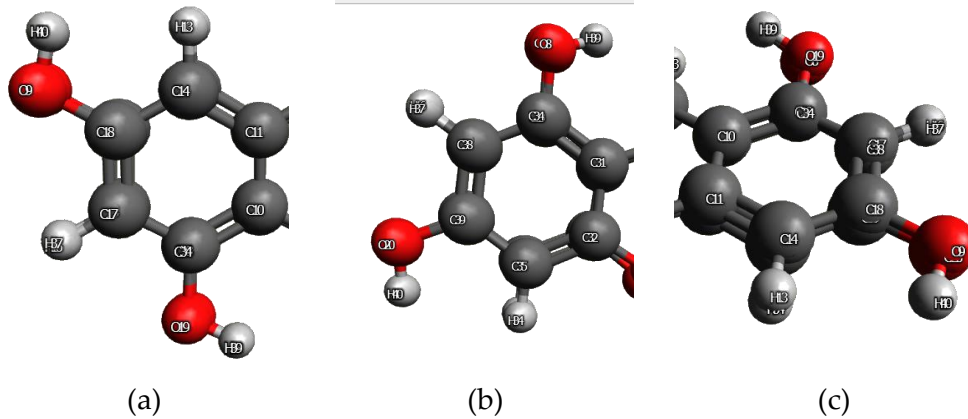
Energi awal yaitu nilai pertama dari set data yang telah diurutkan. Energi selanjutnya yaitu nilai lain dalam set data energi yang ingin dibandingkan dengan data awal. Persentase menunjukkan seberapa besar perubahan relatif antara kedua nilai tersebut, tanpa memerlukan data energi standar. Namun, jika memiliki lebih dari satu data energi awal (misalnya ingin membandingkan tiap elemen dengan elemen sebelumnya), maka menggunakan persamaan (2).

$$\% \Delta \text{Energi optimasi} = \left[\frac{(\text{Energi ke-}N) - \{\text{Energi ke-}(N-1)\}}{\{\text{Energi ke-}(N-1)\}} \right] \times 100\% \quad (2)$$

Hasil dan Diskusi

Analisa konformasi

- Struktur Molekul dengan Teori GAFF



Gambar 1. Visualisasi struktur molekul gabungan ke-0 dan ke-5 dengan teori GAFF: (a) bagian depan, (b) bagian belakang, dan (c) bagian samping.

Tabel 1. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-0 Dengan Teori GAFF

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,088	
C18-O9-H19	110,7	1,358 ^{a)}	0,971 ^{b)}
C17-H16		1,089	
C13-O8-H18	110,8	1,361 ^{a)}	0,972 ^{b)}

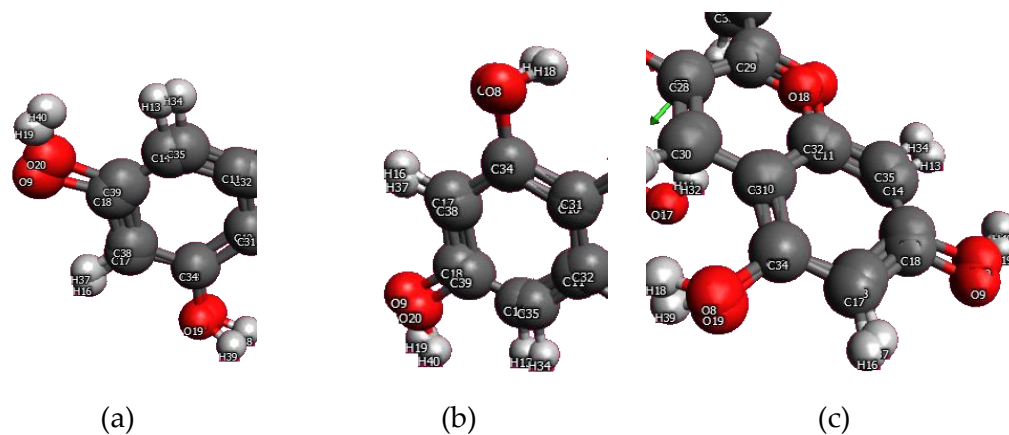
Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

Tabel 2. Ikatan atom, sudut, dan jarak ikatan pada struktur ke-5 dengan teori GAFF

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,088	
C18-O9-H19	111,0	1,358 ^{a)}	0,968 ^{b)}
C17-H16		1,089	
C13-O8-H18	110,3	1,360 ^{a)}	0,971 ^{b)}

Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

- Struktur Molekul dengan Teori GHEMICAL



Gambar 2. Visualisasi struktur molekul gabungan ke-0 dan ke-5 dengan teori GHEMICAL: (a) bagian depan, (b) bagian belakang, dan (c) bagian samping.

Tabel 3. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-0 Dengan Teori GHEMICAL

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,084	
C18-O9-H19	112,2	1,394 ^{a)}	0,950 ^{b)}
C17-H16		1,084	
C13-O8-H18	111,1	1,393 ^{a)}	0,950 ^{b)}

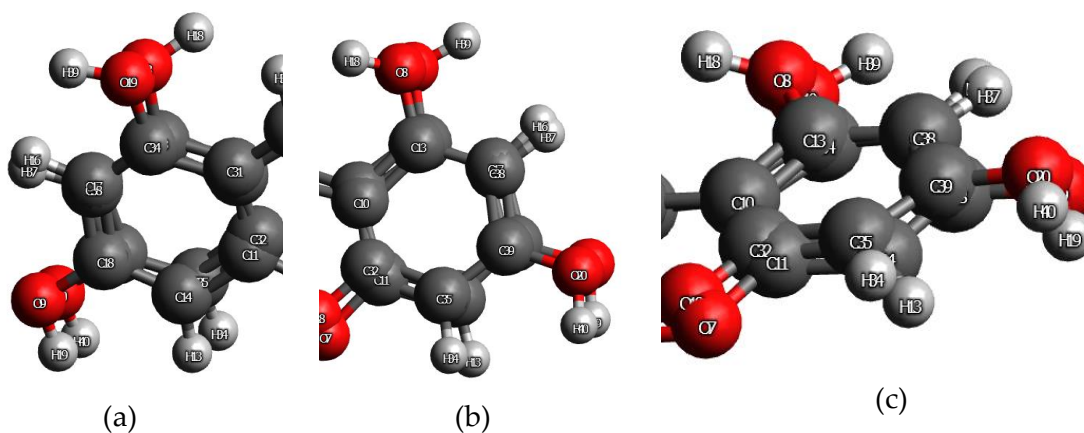
Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

Tabel 4. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-5 Dengan Teori GHEMICAL

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,084	
C18-O9-H19	112,2	1,394 ^{a)}	0,950 ^{b)}
C17-H16		1,084	
C13-O8-H18	111,1	1,393 ^{a)}	0,950 ^{b)}

Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

• Struktur Molekul dengan Teori MMFF94



Gambar 3. Visualisasi struktur molekul gabungan ke-0 dan ke-5 dengan teori MMFF94: (a) bagian depan, (b) bagian belakang, dan (c) bagian samping.

Tabel 5. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-0 Dengan Teori MMFF94

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,084	0,973
C18-O9-H19	111,8	1,361 ^{a)}	0,974
C17-H16		1,088	
C13-O8-H18	110,3	1,367 ^{a)}	0,976 ^{b)}

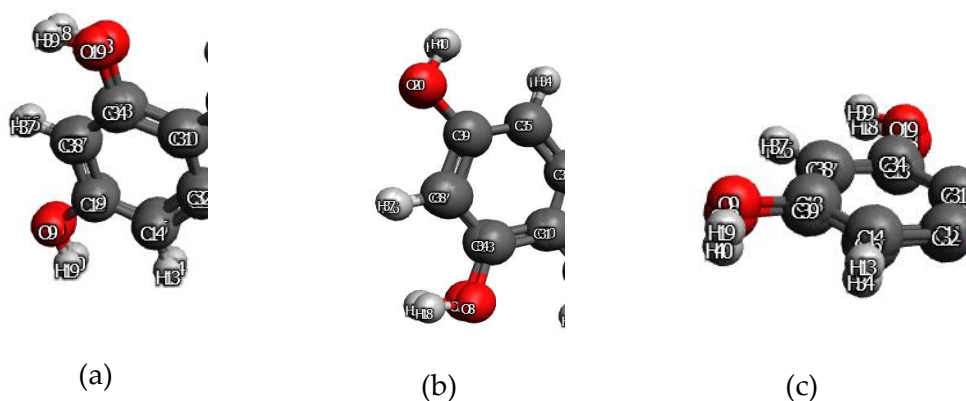
Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

Tabel 6. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-5 Dengan Teori MMFF94

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,084	0,973
C18-O9-H19	111,8	1,361 ^{a)}	0,974 ^{b)}
C17-H16		1,088	1,088
C13-O8-H18	110,3	1,367 ^{a)}	0,976 ^{b)}

Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

- Struktur Molekul dengan Teori MMFF94S



Gambar 4. Visualisasi struktur molekul gabungan ke-0 dan ke-5 dengan teori MMFF94S: (a) bagian depan, (b) bagian belakang, dan (c) bagian samping

Tabel 7. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-0 Dengan Teori MMFF94S

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,084	
C18-O9-H19	111,8	1,361 ^{a)}	0,974 ^{b)}
C17-H16		1,088	
C13-O8-H18	110,3	1,367 ^{a)}	0,976 ^{b)}

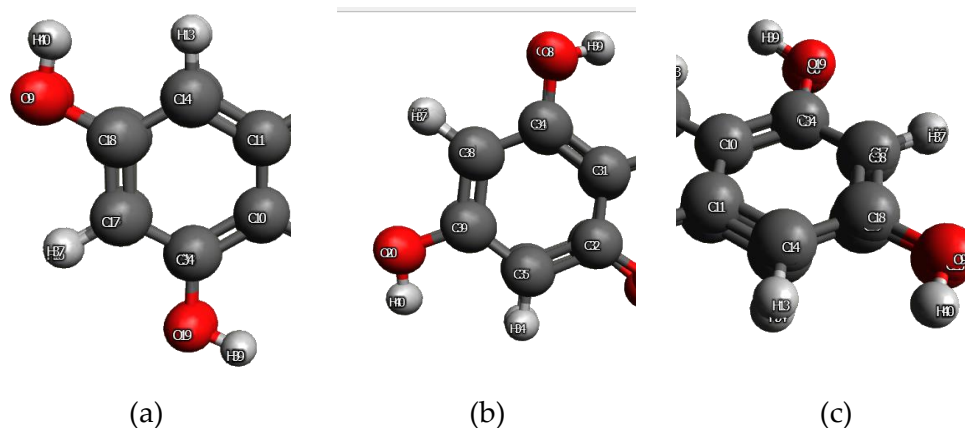
Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

Tabel 8. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-5 Dengan Teori MMFF94S

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,084	
C18-O9-H19	111,8	1,361 ^{a)}	0,974 ^{b)}
C17-H16		1,088	
C13-O8-H18	110,3	1,367 ^{a)}	0,976 ^{b)}

Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

• Struktur Molekul dengan Teori UFF



Gambar 5. Visualisasi struktur molekul gabungan ke-0 dan ke-5 dengan teori UFF: (a) bagian depan, (b) bagian belakang, dan (c) bagian samping.

Tabel 9. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-0 Dengan Teori UFF

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,083	
C18-O9-H19	122,2	1,349 ^{a)}	0,968 ^{b)}
C17-H16		1,083	
C13-O8-H18	125,3	1,352 ^{a)}	0,964 ^{b)}

Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

Tabel 10. Ikatan Atom, Sudut, Dan Jarak Ikatan Pada Struktur Ke-5 Dengan Teori UFF

Ikatan Atom	Sudut (°)	Jarak Ikatan (Å)	
		1	2
C14-H13		1,083	
C18-O9-H19	122,2	1,348 ^{a)}	0,968 ^{b)}
C17-H16		1,083	
C13-O8-H18	125,3	1,352 ^{a)}	0,964 ^{b)}

Keterangan: a) jarak pada ikatan C-O; b) jarak pada ikatan O-H

Perubahan struktur molekul, seperti jarak antar atom dan sudut ikatan, dapat dijelaskan secara rinci menggunakan interaksi molekuler, gaya internal, dan pengaruh lingkungan.⁸ Berikut merupakan beberapa faktor yang menyebabkan perubahan struktur berdasarkan jarak antar atom dan sudutnya. Berikut beberapa faktor yang menyebabkan perubahan struktur.

• Energi Internal Molekul

Molekul secara alami berusaha mencapai energi total terendah. Proses optimasi menghitung energi total molekul berdasarkan gaya tarik menarik dan tolak menolak antar atom. Ketika suatu molekul berada dalam konfigurasi energi minimum, jarak antar atom dan sudut ikatan disesuaikan untuk mengurangi distorsi dan interaksi sterik nonideal.⁹

Pada struktur awal (0), jarak C14-H13 sebesar 1,087 Å, sedangkan pada struktur teroptimasi (5) sebesar 1,088 Å. Perubahan kecil ini mencerminkan penyesuaian energi pengikat untuk mencapai stabilitas. Setelah optimasi dengan GAFF, sudut C18-O9-H40 berubah dari

108,9° menjadi 111,0°. Hal ini menunjukkan adanya pergeseran geometri untuk meminimalkan energi tolak-menolak antara pasangan elektron bebas.

- Medan Gaya (Force Field)

Perhitungan optimasi menggunakan model seperti GAFF, Ghemical, dan MMFF94 memperhitungkan interaksi gaya antar atom, seperti tarikan kovalen, tolakan elektrostatik, dan kontribusi pasangan elektron bebas.¹⁰

Medan gaya yang berbeda menyebabkan perubahan jarak dan sudut. Misalnya, pada struktur yang diselesaikan dengan MMFF94, jarak C55-H53 meningkat dari 1,087 Å (struktur 0) menjadi 1,088 Å (struktur 5), yang menunjukkan perubahan kecil akibat energi relaksasi.

Perubahan sudut dari 108,9° menjadi 111,0° (GAFF) menunjukkan penyesuaian interaksi elektrostatik dan energi ikatan. Model GAFF lebih sensitif terhadap interaksi non-kovalen, sehingga menghasilkan perubahan sudut lebih besar dibandingkan model lain seperti Ghemical

Analisa energi optimasi

Perbedaan dan penurunan energi hasil optimasi biasanya berkaitan dengan proses pencarian struktur yang lebih stabil dalam ruang energi potensial suatu molekul. Proses ini melibatkan penyesuaian geometri molekul sehingga total energinya mencapai nilai minimum yang mencerminkan keadaan stabil. Energi hasil optimasi mengecil dari langkah pertama hingga langkah kelima karena setiap langkah optimasi mendekatkan struktur molekul ke posisi yang lebih rendah dalam kurva energi potensial. Hal ini disebabkan oleh algoritma optimasi yang digunakan dalam perangkat lunak kimia komputasi, seperti algoritma gradien atau metode kuasi-Newton, yang bertujuan untuk menemukan posisi keseimbangan energi minimum global atau lokal.¹¹

Tabel 11. Energi Optimasi dan % Δ Energi Pptimasi

Medan gaya	Energi Optimasi (kJ/mol)	% Δ Energi optimasi (data ke-N)
Ghemical	11,939	1747,48
GAFF	220,201	85,10
UFF	407,592	79,67
MMFF94	732,328	1,12
MMFF94s	740,522	0

Berdasarkan Tabel 11, metode Ghemical menghasilkan energi optimasi yang jauh lebih kecil dibandingkan metode lainnya, dengan kenaikan drastis pada metode GAFF, UFF, dan MMFF94 saat dibandingkan secara berurutan (persamaan 2), menunjukkan peningkatan energi yang signifikan. Perubahan terbesar terjadi pada metode UFF dan MMFF94, sedangkan metode MMFF94 dan MMFF94s menunjukkan perbedaan yang sangat kecil (hanya 1,12%), menandakan hasil energi yang hampir sama. Jika dibandingkan dengan nilai awal (Ghemical), setiap metode menunjukkan peningkatan energi yang jauh lebih besar, dengan MMFF94s memiliki energi tertinggi. Oleh karena itu, MMFF94s dapat menjadi pilihan optimal untuk stabilitas energi karena memberikan energi tertinggi dengan perubahan minimal dibandingkan metode sebelumnya. Analisis lebih lanjut diperlukan untuk memahami faktor penyebab perubahan signifikan antar metode.

Dari hasil kelima metode, terdapat tiga kategori energi optimasi: rendah (Ghemical), sedang (GAFF, UFF), dan tinggi (MMFF94, MMFF94s). Metode MMFF94s memiliki nilai energi tertinggi, mengindikasikan kemampuannya dalam menangani sistem molekul kompleks dengan akurasi tinggi. Pemilihan metode tergantung pada kebutuhan simulasi: untuk struktur sederhana, Ghemical memadai, sementara untuk simulasi kompleks, MMFF94s menjadi pilihan terbaik.

Analisa momen dipol

Nilai momen dipol dari perbandingan teori medan gaya (force field) seperti Ghemical, GAFF, UFF, MMFF94, dan MMFF94s mencerminkan perbedaan dalam cara masing-masing force field memodelkan distribusi muatan di dalam molekul.

Momen dipol adalah ukuran distribusi muatan dalam suatu molekul, yang menggambarkan seberapa besar molekul tersebut bersifat polar. Nilainya ditentukan oleh jarak antara pusat muatan positif dan negatif serta besarnya muatan tersebut. Nilai yang diberikan oleh berbagai force fields berbeda karena masing-masing metode menggunakan pendekatan yang berbeda dalam representasi geometri molekul, parameterisasi distribusi muatan parsial, dan perhitungan interaksi elektrostatik.

Tabel 12. Momen Dipol

Medan gaya	Momen dipol (D)
Ghemical	11,090
GAFF	12,238
UFF	12,904
MMFF94	9,522
MMFF94s	11,155

Berdasarkan Tabel 12, Ghemical (11,090) menunjukkan Force field yang lebih sederhana dan mungkin menggunakan parameterisasi umum, sehingga menghasilkan nilai momen dipol yang moderat. GAFF (12,238) sering memberikan distribusi muatan yang lebih terperinci, menghasilkan nilai momen dipol yang lebih tinggi karena GAFF dirancang untuk molekul organik. UFF (12,904) memberikan parameter universal untuk berbagai molekul, dan nilainya yang tinggi dapat menunjukkan pendekatan yang lebih sensitif terhadap distribusi muatan. MMFF94 (9,522) menunjukkan force field yang lebih terspesialisasi untuk molekul kecil, memberikan nilai yang lebih rendah, kemungkinan karena parameterisasi yang lebih ketat. Sedangkan, MMFF94s (11,155) memiliki beberapa modifikasi dalam parameterisasi elektrostatik, menghasilkan nilai momen dipol yang lebih mendekati Ghemical.

Perbedaan nilai momen dipol menunjukkan bagaimana tiap force field memodelkan polarisasi molekul. Nilai-nilai ini penting untuk aplikasi tertentu, seperti simulasi interaksi antar-molekul atau perhitungan sifat fisik (misalnya, kelarutan atau aktivitas biologis). Tidak ada satu nilai yang benar secara absolut; pilihan force field tergantung pada konteks penelitian dan jenis molekul yang sedang dikaji.

Kesimpulan

Analisis energi optimasi menunjukkan bahwa metode Ghemical menghasilkan struktur yang lebih stabil dibandingkan metode lainnya, meskipun terdapat ketidaksesuaian dengan metode GAFF. GAFF lebih stabil daripada UFF, namun membutuhkan energi lebih banyak untuk mencapai kestabilan. Metode MMFF94 dan MMFF94s menunjukkan perubahan energi

yang minimal, dengan hasil yang konsisten dan stabil. Secara keseluruhan, perbedaan metode medan gaya memengaruhi stabilitas molekul melalui variasi energi optimasi dan parameterisasi struktur yang berpengaruh pada jarak dan sudut ikatan atom.

Pendanaan

Penelitian ini tidak menerima pendanaan dari sumber manapun.

Ucapan Terima Kasih

Kami ucapkan terima kasih kepada Program Studi Fisika yang mendukung dalam proses penelitian hingga penulisan artikel ini.

Konflik kepentingan

Penulis dalam penulisan artikel ini menyatakan tidak ada konflik kepentingan.

Kontribusi Penulis

Permono Adi Putro: supervision, conceptualization, methodology, writing – review & editing. **Desi Wulandari dan Devia Putri Wulandari:** software, validation, formal analysis, resources, data curation, writing – original draft, visualization. **Fitriah Nurfaidah, M. Farid Ahdan, Seviana Chaerunnisa, dan Vina Umaya Octaviani:** software, formal analysis, resources, data curation, visualization

Daftar Pustaka

1. Sandoval-Ramírez, B. A., Catalán, Ú., Fernández-Castillejo, S., Pedret, A., Llauradó, E., & Solà, R. (2020). Cyanidin-3-glucoside as a possible biomarker of anthocyanin-rich berry intake in body fluids of healthy humans: a systematic review of clinical trials. *Nutrition Reviews*, 78(7), 597–610. <https://doi.org/10.1093/nutrit/nuz083>
2. Tan, J., Li, Y., Hou, D. X., & Wu, S. (2019). The effects and mechanisms of cyanidin-3-glucoside and its phenolic metabolites in maintaining intestinal integrity. *Antioxidants*, 8(10), 1–16. <https://doi.org/10.3390/antiox8100479>
3. Utami, Y. P., Farmasi, B. B., Tinggi, S., & Farmasi, I. (2021). *Pharmacy Medical*. 4(1), 20–23.
4. Lin, Y., Li, C., Shao, P., Jiang, L., Chen, B., & Farag, M. A. (2022). Enzymatic acylation of cyanidin-3-O-glucoside in raspberry anthocyanins for intelligent packaging: Improvement of stability, lipophilicity and functional properties. *Current Research in Food Science*, 5(November), 2219–2227. <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2022.11.008>
5. Makkar, P., & Ghosh, N. N. (2021). A review on the use of DFT for the prediction of the properties of nanomaterials. *RSC Advances*, 11(45), 27897–27924. <https://doi.org/10.1039/d1ra04876g>
6. O'Carroll, D., & English, N. J. (2023). Multi-Theory Comparisons of Molecular Simulation Approaches to TiO₂/H₂O Interfacial Systems. *Crystals*, 13(7). <https://doi.org/10.3390/cryst13071122>
7. Mannold, E. R., Kubinyi, H., & Folkers, G. (2006). *Related Titles Methods and Principles in Medicinal Chemistry Previous Volumes of this Series : BioNMR in Drug Research Chemogenomics in Drug Discovery Chemoinformatics in Drug Discovery Drug Bioavailability G Protein-Coupled Receptors as Drug Discovery Pr.*
8. Wang, J., Wolf, R. M., Caldwell, J. W., Kollman, P. A., & Case, D. A. (2004). Development and testing of a general amber force field. *Journal of Computational Chemistry*, 25(9), 1157–1174.

9. Henkelman, G., & Jónsson, H. (2000). Improved tangent estimate in the nudged elastic band method for finding minimum energy paths and saddle points. *The Journal of Chemical Physics*, 113(22), 9978–9985.
10. Halgren, T. A. (1996). Merck molecular force field. I. Basis, form, scope, parameterization, and performance of MMFF94. *Journal of Computational Chemistry*, 17(5–6), 490–519.
11. Pamungkas, E. B., Prasetya, A. T., & Alauhdin, M. (2013). Pengaruh Enkapsulasi Fe dan Cu pada BNNT terhadap Parameter NMR Menggunakan DFT. *Indonesian Journal of Chemical Science*, 2(1), 24–28.