

**STUDY OF -NH₂ AND -NO₂ SUBSTITUENTS EFFECTS TO
ASYMMETRICAL Cd(II) -PORPHYRIN AND Hg(II) -PORPHYRIN
COMPLEXES AS A DYE SENSITIZER USING DENSITY FUNCTIONAL
THEORY**

Nadiya Liqa Anjani
17/408301/PA/17654

ABSTRACT

This study was conducted to study and compare the electronic properties of -NH₂ and -NO₂ substituted metal porphyrin complexes, in particular complex compound structures of cadmium (II)-porphyrin and mercury (II)- porphyrin to be used in sensitizers, based on the substituents and its central metal atoms. The porphyrin complexes were simulated using Density Functional Theory (DFT) approach.

Varieties of the aforementioned metal complexes were optimized geometrically using TD-DFT with CAM-B3LYP and LANL2DZ hybrid function. The density of states (DOS), complexation energy, and HOMO-LUMO gap of the most stable structure were then calculated. Additionally, UV-VIS spectra of said structure were also simulated, also using the same method of TD-DFT/CAM-B3LYP/LANL2DZ.

It was found from this study that having opposing substituents in the same complex lessen its effects on its electronic parameters. It was also found that HgP-R complexes, in particular HgP-(NH₂)₂NO₂ (4), who had more electron-donating group substituent, was the most suitable as a sensitizer, as it had the lowest HOMO-LUMO gap and highest maximum wavelength in electronic absorption spectra.

Keywords: Cadmium (II)-porphyrin metal complexes, density functional theory simulations, DFT/CAM-B3LYP/LANL2DZ, mercury (II)-porphyrin metal complexes, sensitizer.

STUDI EFEK SUBSTITUEN -NH₂ DAN -NO₂ PADA KOMPLEKS Cd (II)-PORPHYRIN DAN Hg (II)-PORPHYRIN ASIMETRIS SEBAGAI SENSITIZER MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

Nadiya Liqa Anjani
17/408301/PA/17654

INTISARI

Penelitian ini dilakukan untuk mempelajari dan membandingkan sifat elektronik kompleks porfirin dengan logam yang tersubstitusi -NH₂ dan -NO₂, yaitu struktur senyawa kompleks kadmium(II)-porfirin dan merkuri(II)-porfirin yang dapat digunakan dalam *sensitizer*, berdasarkan sifat substituenya dan atom intinya. Kompleks porfirin disimulasikan menggunakan pendekatan Density Functional Theory (DFT).

Varietas kompleks porfirin dengan logam dioptimalkan secara geometris menggunakan TD-DFT dengan fungsi hibrida CAM-B3LYP dan LANL2DZ. Rapat Keadaan (*density of states*, atau DOS), energi kompleksasi, dan kesenjangan energi HOMO-LUMO dari struktur yang paling stabil kemudian dikalkulasi. Selain itu, spektrum UV-VIS dari struktur tersebut juga disimulasikan, kembali lagi menggunakan metode TD-DFT/CAM-B3LYP/LANL2DZ.

Dari penelitian ini ditemukan bahwa memiliki substituen yang berlawanan dalam kompleks yang sama akan mengurangi pengaruhnya terhadap parameter elektroniknya. Ditemukan juga bahwa kompleks HgP-R, khususnya HgP-(NH₂)₂NO₂ (4), yang memiliki lebih banyak substituen gugus donor elektron, adalah yang paling cocok sebagai sensitizer, karena memiliki kesenjangan energi HOMO-LUMO terendah dan panjang gelombang maksimum tertinggi.

Kata kunci: DFT/CAM-B3LYP/LANL2DZ, kompleks logam kadmium(II)-porfirin, kompleks logam merkuri(II)-porfirin, sensitizer, simulasi density functional theory.