

KAJIAN TEORITIK PENGARUH JUMLAH DAN POSISI SUBSTITUEN TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT SEMIKONDUKTOR KOMPLEKS LOGAM ALKALI TANAH (Be, Mg, DAN Ca) PORFIRIN DENGAN METODE TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN

KEYMAN

16/403620/PPA/05137

INTISARI

Telah dilakukan kajian teoritik pengaruh jumlah dan posisi substituen terhadap struktur dan sifat semikonduktor pada kompleks logam alkali tanah (Be, Mg, dan Ca) porfirin dengan metode teori fungsional kerapatan. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari pengaruh ukuran ion pusat, jumlah, dan posisi substituen terhadap celah pita energi.

Penelitian ini diawali dengan melakukan optimasi geometri terhadap kompleks logam alkali tanah (Be, Mg, dan Ca) porfirin untuk memperoleh parameter struktur molekul, struktur elektronik, dan profil energi menggunakan metode fungsional kerapatan dengan himpunan basis LANL2DZ dan fungsi hibrid B3LYP.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa bertambahnya ukuran ion pusat menyebabkan turunnya celah energi. Bertambahnya jumlah substituen secara umum menyebabkan turunnya celah pita energi. Kompleks yang tersubstitusi *meso* memiliki celah pita energi yang lebih rendah dibanding yang tersubstitusi *beta*, sedangkan yang tersubstitusi *trans* memiliki celah pita energi yang lebih rendah jika dibandingkan dengan yang tersubstitusi *cis*.

Kata kunci: celah pita energi, porfirin, semikonduktor

THEORETICAL STUDY OF SUBSTITUENT NUMBER AND POSITION EFFECT ON STRUCTURE AND SEMICONDUCTOR PROPERTIES OF ALKALINE EARTH METAL (Be, Mg, AND Ca) PORPHYRIN USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

KEYMAN
16/403620/PPA/05137

ABSTRACT

Theoretical study of substituent effect on structure and semiconductor properties of alkaline earth metal (Be, Mg, and Ca) porphyrin had been performed using density functional theory method. The objective of the study is to determine the effect of central ion size, substituent number and position on structure and semiconductor properties which is band gap energy.

The step of the study was conducting geometry optimization on the alkaline earth metal (Be, Mg, and Ca) porphyrin complexes to acquire molecular structure, electronic structure, and energy profile using density functional theory method with a basis set of LANL2DZ and B3LYP hybrid function.

Computational results showed that big size of central ion tends to decrease band gap energy. Increase of substituent number tends to decrease band gap energy. Complexes substituted meso has lower band gap energy than complexes substituted beta. Complexes substituted trans has lower band gap energy than complexes substituted cis.

Keywords: energy band gap, porphyrin, semiconductor