

**STUDY OF -NH₂ AND -NO₂ SUBSTITUENT EFFECTS TO
ASYMMETRICAL Pt(II)-PORPHYRIN SEMICONDUCTOR
COMPLEXES AS A SENSITIZER USING DENSITY FUNCTIONAL
THEORY/TIME DEPENDENT-DENSITY FUNCTIONAL THEORY
(DFT/TD-DFT) METHOD**

Roma Karisti Silalahi
15/386858/PA/17054

ABSTRACT

This study was conducted in aims of investigating the effects of contrasting substituents added to a Pt(II)-porphyrin complex compound on its novelty as a sensitizer. The optical and electronic properties of an asymmetrical Pt(II)-porphyrin with added substituents of an electron-donating and withdrawing group were examined using the Density Functional Theory (DFT) computational method. The evaluated parameters were its complex geometrical structure, band gap (E_g), Density of States (DOS), and UV-Vis spectra. The geometrical optimization was conducted using the computational method DFT/B3LYP/LANL2DZ, obtaining the molecular and electronic structure, as well as its energy profile. The optical parameters were also analyzed through the same method, obtaining the band gap (E_g), DOS, and UV-Vis spectra. The computational result showed that the asymmetrical Pt(II)P-R substituted complex possess sufficient properties of a sensitizer with the complex compound Pt(II)P-NH₂NO₂(8) giving the best result in terms of its optical parameters. Obtaining a maximum wavelength and band gap (E_g) of 707.8 nm and 1.848 eV, respectively, and therefore, can be recommended as a new semiconductor material.

Keywords: Platinum(II)-porphyrin, sensitizer, semiconductor, substituent effects

PENGARUH SUBSTITUEN -NH₂ DAN -NO₂ TERHADAP SIFAT KOMPLEKS SEMIKONDUKTOR Pt(II)-PORFIRIN ASIMETRIS SEBAGAI SENSITIZER DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY/TIME DEPENDENT-DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT/TD-DFT)*

Roma Karisti Silalahi
15/386858/PA/17054

INTISARI

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk mengamati efek dari substituen yang bersifat kontras satu dengan lainnya terhadap senyawa kompleks Pt(II)- porfirin pada kebaruannya sebagai *sensitizer*. Kajian dari pengaruh substituen terhadap Pt(II)-porfirin pada parameter elektronik dan optik menggunakan metode komputasi *Density Functional Theory (DFT)* telah dilakukan. Parameter yang dievaluasi adalah struktur geometrisnya yang kompleks, celah pita (E_g), *Density of States (DOS)*, dan spektrum UV-Vis. Optimasi geometri dilakukan dengan menggunakan metode komputasi DFT/B3LYP/LANL2DZ, memperoleh hasil struktur molekul dan elektronik, serta profil energinya. Parameter optik, celah pita (E_g), DOS, dan spektrum UV-Vis, juga diperoleh melalui metode yang sama. Hasil komputasi menunjukkan bahwa senyawa kompleks tersubstitusi Pt(II)P-R asimetris menunjukkan sifat sebagai *sensitizer* dengan senyawa kompleks Pt(II)P-NH₂NO₂(8) memberikan hasil terbaik dalam hal parameter optiknya, dengan panjang gelombang maksimum dan celah pita (E_g) sebesar 707,8 nm dan 1,848 eV. Oleh karena itu, senyawa kompleks tersebut dapat direkomendasikan sebagai bahan semikonduktor yang baru.

Kata kunci: Platina(II)-porfirin, *sensitizer*, semikonduktor, pengaruh substituen