

**PEMODELAN SEMIKONDUKTOR DARI KOMPLEKS  
Ni-TETRAPIROL: STUDI TEORITIS JENIS LIGAN DENGAN METODE  
DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) DAN KAJIAN PENGARUH  
SUBSTITUEN TERHADAP KOMPLEKS Ni-PTALOSIANIN**

Ajeng Santiara  
15/388402/PPA/04841

**INTISARI**

Telah dilakukan kajian teoritis pengaruh jenis ligan terhadap sifat semikonduktor dari senyawa organik, yaitu tetrapirrol dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) serta kajian pengaruh substituen terhadap kompleks Ni-ptalosianin. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui pengaruh jenis ligan terhadap kemampuan kompleks Ni-tetrapirrol sebagai semikonduktor. Kajian pengaruh substituen terhadap kompleks Ni-ptalosianin juga dipelajari dalam penelitian ini. Tahap yang dilakukan adalah optimasi struktur, perhitungan energi *band gap* ( $E_g$ ), pengukuran kelimpahan *Density of States* (DOS), pengukuran spektra serapan elektronik (UV-Vis dan IR).

Optimasi struktur dilakukan untuk mendapatkan struktur dengan geometri paling stabil. Optimasi dilakukan dengan metode DFT, fungsi densitas B3LYP (Becke's 3 parameters/Lee-Yang-Parr's exchange correlation function), dan himpunan basis LANL2DZ (Los Alamos National Laboratory no. 2-double zeta). Hasil optimasi adalah struktur kompleks dengan kemungkinan geometri optimum serta harga  $E_g$  yang digunakan dalam menyatakan sifat semikonduktor. Hasil optimasi ini selanjutnya digunakan sebagai *input* data dalam perhitungan kelimpahan DOS dan spektra serapan elektronik.

Hasil yang diperoleh menunjukkan ligan yang memiliki tambahan konjugasi dari *nitro-substitution* dan *benzo-annulation*, yaitu porfirazin dan ptalosianin memberikan harga  $E_g$  yang lebih kecil. Harga beda energi yang dihasilkan yaitu 2,821 eV untuk Ni-porfirazin dan 2,249 eV untuk Ni-ptalosianin. Harga kelimpahan DOS Ni-porfirazin dan Ni-ptalosianin menunjukkan harga yang lebih besar jika dibandingkan dengan ligan porfirin. Tambahan konjugasi dalam sistem tersebut akan meningkatkan performa Ni-ptalosianin sebagai semikonduktor. Kompleks dengan ligan ptalosianin dan porfirazin juga mampu menggeser panjang gelombang maksimum ke arah yang lebih tinggi.

Kata kunci: semikonduktor, Ni-tetrapirrol, pengaruh substituen, DFT

**MODELING OF SEMICONDUCTOR FROM Ni-TETRAPYRROLE COMPLEXES: THEORETICAL STUDY OF TYPE OF LIGAND USING DFT (DENSITY FUNCTIONAL THEORY) METHOD AND STUDY OF SUBSTITUENT EFFECT ON Ni-PHTHALOCYANINE COMPLEXES**

Ajeng Santiara  
15/388402/PPA/04841

**ABSTRACT**

Theoretical study of the influence of ligand type on the semiconductor properties of organic compounds, namely tetrapyrrole, has been carried out with Density Functional Theory (DFT) method and the study of substituent influence on Ni-ptalocyanin complex. The purpose of this research was to know the ligand type effect on Ni-tetrapyrrole ability as semiconductor. Study of substituent effect for Ni-phthalocyanine was also studied in this research. The steps done were several stages, namely structural optimization, energy band gap ( $E_g$ ) calculation, Density of States (DOS) abundance, and measurement of electronic absorption spectra (UV-Vis and IR).

Structural optimization was performed to obtain the structure with the most stable geometry. The optimization was done by DFT method, B3LYP density function (Becke's 3 parameters/ Lee-Yang-Parr's exchange correlation function), and base set of LANL2DZ (Los Alamos National Laboratory No. 2-double zeta). The optimization result was a complex structure with optimum geometry possibilities as well as the  $E_g$  price used in declaring semiconductor properties. The optimization results were then used as input data in the calculation of DOS abundance and electronic absorption spectra.

The results showed that ligands having additional conjugations of nitro-substitution and benzo-annulation, ie porphyrazine and phthalocyanine provide smaller  $E_g$  prices, that is 2.821 eV and 2.249 eV. DOS abundance of Ni-porphyrazine and Ni-phthalocyanine was also showed the greater value than complex with porphyrin ligands. This suggested that additional conjugation in the system will improve the performance of the compound as a semiconductor. Complexes with phthalocyanine and porphyrazine ligands were also capable of shifting the maximum wavelength to the higher direction.

**Keywords:** semiconductor, Ni-tetrapyrrole, substitution effect, DFT