

**KAJIAN PENGARUH SUBSTITUEN TERHADAP SIFAT SEMIKONDUKTOR  
KOMPLEKS Pd(II)-PORFIRIN MENGGUNAKAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL  
THEORY/TIME DEPENDENT-DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT/TD-DFT)***

Yuliana Diah Puspita Sari  
12/331556/PA/14763

**INTISARI**

Telah dilakukan penelitian tentang pengaruh substituen terhadap sifat semikonduktor kompleks Pd(II)-porfirin tersubstitusi dengan metode *Density Functional Theory/Time Dependent-Density Functional Theory (DFT/TD-DFT)*. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengkaji pengaruh variasi substituen terhadap geometri kompleks Pd(II)-porfirin dan sifat optik molekul kompleks yang dapat digunakan sebagai parameter sifat semikonduktor. Parameter tersebut adalah energi celah pita ( $E_g$ ), *density of states* (DOS) dan spektra serapan elektronik (UV-Vis).

Penelitian dilakukan dengan optimasi geometri senyawa kompleks Pd(II)P-H dan Pd(II)P-R dengan menggunakan metode DFT/B3LYP/LANL2DZ. Struktur yang telah teroptimasi digunakan untuk menghitung nilai  $E_g$ , DOS dan spektra serapan elektronik kompleks Pd(II)-porfirin dan Pd(II)-porfirin tersubstitusi. Spektra serapan elektronik kompleks Pd(II)-porfirin dan Pd(II)-porfirin tersubstitusi dihitung menggunakan metode TD-DFT.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa secara umum senyawa kompleks PdP-H dan PdP-R memiliki potensi sebagai material semikonduktor dengan nilai  $E_g$  berada pada rentang 1,5 – 4,0 eV. Senyawa kompleks PdP-NH<sub>2</sub> memiliki performa terbaik ditinjau dari parameter  $E_g$  paling rendah yaitu 2,09 eV, sehingga dapat direkomendasikan sebagai material semikonduktor.

Kata kunci: semikonduktor, Pd(II)-porfirin, efek substituen, *Density Functional Theory, Density of State*

**STUDY OF SUBSTITUENT EFFECT ON SEMICONDUCTOR PROPERTIES OF Pd(II)-PORPHYRIN COMPLEXES USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY/TIME DEPENDENT-DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT/TD-DFT) METHOD**

Yuliana Diah Puspita Sari  
12/331556/PA/14763

**ABSTRACT**

Study of substituents effect on semiconductor properties of Pd(II)-porphyrin complexes had been performed using *Density Functional Theory/Time Dependent-Density Functional Theory* (DFT/TD-DFT) method. The purpose from this research were to determine the substituent effect on the geometry and optical properties of the Pd(II)-porphyrin complexes that can be used as parameter of semiconductor properties. The parameters were band gap energy ( $E_g$ ), density of states and electronic absorption spectra (UV-Vis).

The research was conducted by geometry optimization on the Pd(II)P-H and Pd(II)P-R complexes use DFT/B3LYP/LANL2DZ method. The optimized structures were used to calculation of  $E_g$ , DOS and electronic absorption spectra Pd(II)P-H and Pd(II)P-R complexes using TD-DFT method.

Computational results showed that PdP-H and PdP-R complexes had potential as semiconductor materials with  $E_g$  value on 1.5 – 4.0 eV. The PdP-NH<sub>2</sub> complexes was recommended for semiconductor materials with minimum band gap energy 2.09 eV.

**Keywords:** semiconductor, Pd(II)-porphyrin, substituent effect, *Density Functional Theory*, *Density of State*