

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

Hafiz Aji Aziz

11/313187/PA/13651

INTISARI

Telah dilakukan kajian pengaruh substituen terhadap sifat semikonduktor pada kompleks Hg(II)-porfirin (HgP-R) dengan metode *Density Functional Theory/Time Dependent-Density Functional Theory (DFT/TD-DFT)*. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari pengaruh gugus substituen terhadap sifat elektronik dan optik molekul kompleks yang dapat digunakan sebagai parameter sifat semikonduktor yaitu energi *band gap* (E_g), *density of states* (DOS) dan spektra serapan elektronik.

Tahap pertama penelitian adalah melakukan optimasi geometri terhadap kompleks HgP-R untuk memperoleh parameter struktur molekul, struktur elektronik dan profil energi menggunakan metode DFT dengan fungsional *hybrid Becke's 3 parameters/Lee-Yang-Parr's exchange correlation function (B3LYP)* dan himpunan basis dari Los Alamos National Laboratory no. 2-double zeta (LANL2DZ). Struktur yang telah teroptimasi kemudian digunakan sebagai *input* untuk perhitungan DOS dan spektra serapan elektronik dengan metode TD-DFT.

Hasil perhitungan menunjukkan bagaimana substituen yang berbeda mempengaruhi E_g , DOS dan spektra serapan elektronik. Gugus pendorong elektron cenderung akan menurunkan nilai E_g dan kelimpahan DOS sedangkan gugus penarik elektron cenderung akan menaikkan nilai panjang gelombang puncak serapan pada spektra serapan elektronik.

Kata kunci: semikonduktor, Hg(II)-porfirin, pengaruh substituen

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

Hafiz Aji Aziz

11/313187/PA/13651

ABSTRACT

Study of substituent effect on properties of Hg(II)-porphyrin (HgP-R) had been performed using Density Functional Theory/Time Dependent-Density Functional Theory (DFT/TD-DFT) method. The objectives of the study is to determine the effect of substituent group on the electronic and optical properties of the complexes that can be used as parameter of semiconductor properties which are band gap energy (E_g), density of states (DOS) and electronic absorption spectra.

The first step of the study is conducting geometry optimization on the HgP-R complexes to acquire molecular structure, electronic structure and energy profile using DFT method, Becke's 3 parameters/Lee-Yang-Parr's exchange-correlation function and Los Alamos National Laboratory no. 2 double-zeta (LANL2DZ). Optimized structures then were used as the input for the calculation of DOS and electronic absorption spectra using TD-DFT.

Computational results showed how different groups affecting E_g , DOS and electronic absorption spectra. Electron donating groups tend to decrease E_g and DOS abundance while electronwithdrawing tend to increase the maximum wavelength of the electronic absorption spectra.

Keywords: semiconductor, Hg(II)-porphyrin, substituen effect