

**KAJIAN TEORITIS UNTUK MENENTUKAN CELAH ENERGI PORFIRIN  
TERKONJUGASI LOGAM KALSIMUM MENGGUNAKAN TEORI FUNGSIONAL  
KERAPATAN (DFT)**

**A THEORETICAL STUDIES TO DETERMINE BAND GAP OF CONJUGATED  
PORPHYRIN WITH CALCIUM METAL USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY  
(DFT)**

**Gawang Pamungkas and I Gusti Made Sanjaya**

*Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural sciences*

*State University of Surabaya*

*e-mail: igmass@gmail.com*

**Abstrak.** Telah dilakukan kajian teoritis untuk menentukan celah energi porfirin terkonjugasi logam kalsium (Ca). Metode komputasi yang digunakan adalah teori fungsional kerapatan (DFT) dengan basis set 6-31\*G/B3LYP/grid=fine(x-fine)/Restricted Kohn-Sam (RKS). Celah energi porfirin terkonjugasi logam Ca ditentukan melalui selisih antara energi *HOMO* dan *LUMO*, celah energi yang kecil ( $E_g \sim 1,1$  eV) menyebabkan daya serapan yang besar. Hasil penelitian menunjukkan celah energi dari Ca-porfirin adalah 1.09555756 eV. Celah energi itu mencerminkan kemudahan dalam eksitasi elektron, yang menyebabkan peningkatan sifat fotosensitivitas Ca-porfirin. Celah energi juga mempengaruhi kerapatan elektron pada masing-masing sumbu (x, y, dan z). Oleh karena itu, Ca-Porfirin berpotensi digunakan sebagai detektor inframerah (sensor optik).

**Kata kunci:** *porfirin, DFT, HOMO, LUMO, celah energi*

**Abstract.** A Theoretical study to determine band gap of conjugated porphyrin with calcium metal (Ca) has done. Density Functional Theory (DFT) with basis set 6-31 G\*/B3LYP/grid = fine (x-fine)/Restricted Kohn-Sham (RKS) was used in computational method. Band gap of conjugated porphyrin with Ca was determined by the energy difference between the HOMO and LUMO, a small band gap ( $E_g \sim 1.1$  eV) caused a large absorption power. The result showed band gap of Ca-porphyrin is 1.09555756 eV. This band gap reflecting ease in excitation of electron, causing increased of photosensitivity properties Ca-porphyrin. Band gap affect the electron density in each axis (x, y, and z). Therefore, Ca-Porphyrin potentially to be used as infrared detector (optical sensor).

**Keywords:** *porphyrin, DFT, HOMO, LUMO, band gap*

## **PENDAHULUAN**

Dewasa ini banyak penggunaan senyawa organik yang dikonjugasikan dengan atom logam sebagai bahan pembuatan sensor. Satu diantara senyawa organik itu adalah porfirin. Struktur porfirin mempunyai ikatan rangkap terkonjugasi yang memungkinkan terjadinya proses serapan gelombang elektromagnetik yang mengeksitasi elektron-elektron dari tingkat dasar ke tingkat eksitasi. Senyawa ini merupakan bahan semikonduktor organik yang mampu

menyerap sinar gelombang elektromagnetik. Apabila porfirin dikonjugasikan dengan atom logam kemungkinan sifat semikonduktornya bertambah. Sifat semikonduktor porfirin berhubungan erat dengan celah energi (band gap). Celah energinya yang kecil menyebabkan daya serapan yang besar, sehingga senyawa ini berpotensi menjadi detektor inframerah organik dan cahaya tampak yang menghasilkan spektra UV-Vis dan inframerah [1].

Kajian terhadap porfirin yang dikonjugasikan dengan logam mulai dilakukan oleh Pedersen [1]. Porfirin dikonjugasikan dengan beberapa logam, seperti dengan ion Zn(II), Mg, dan Ni. Ketiga logam tersebut dikonjugasikan dengan porfirin pada posisi pusat (*central*) menggunakan metode *ab-initio*. Diperoleh bahwa Zn-porfirin dan Ni-Porfirin memiliki peluang dijadikan detektor inframerah organik dan cahaya tampak karena memiliki celah energi yang kecil yaitu 0,63 eV.

Selanjutnya dilakukan oleh Susi sudanti [2]. Porfirin dikonjugasikan dengan 2 atom logam, masing-masing adalah atom Ag dan atom Cu. Penelitian ini mengkonjugasikan atom Ag dan Cu dengan metode mekanika kuantum semiempirik ZINDO/1 pada posisi meso (*sentral*) terhadap senyawa porfirin. Hasil penelitiannya menunjukkan bahwa celah energi dari porfirin terkonjugasi atom Cu dan Ag, masing-masing sebesar 4,49 eV ( $7,18 \cdot 10^{-19}$  J) dan 2,12 eV ( $3,39 \cdot 10^{-19}$  J). Sementara daerah serapan inframerah untuk porfirin terkonjugasi atom Cu dan Ag, masing-masing berada pada panjang gelombang 4,22  $\mu\text{m}$  ( $4,22 \cdot 10^{-6}$  m) dan 5,08  $\mu\text{m}$  ( $5,08 \cdot 10^{-6}$  m).

Salah satu bagian yang berperan penting dalam sifat semikonduktor yang dimiliki porfirin terkonjugasi adalah jenis atom logam yang dikonjugasikan. Logam yang memiliki energi ionisasi kecil akan mudah melepaskan elektron pada saat dikonjugasikan dengan porfirin. Semakin mudah melepaskan elektron, maka sifat konduktivitasnya (semikonduktor dan konduktor) akan bertambah. Sedangkan metode kimia komputasi sangat mempengaruhi keakuratan hasil perhitungan celah energi (*band gap*), spektra UV-Vis, dan inframerah

Kalsium adalah elemen kimia dengan simbol Ca dan bernomor atom 20. Kalsium juga merupakan ion terabaikan kelima terbanyak di air laut dilihat dari segi molaritas dan massanya, setelah natrium, klorida, magnesium, dan sulfat. Logam kalsium berwarna putih keperakan dan memiliki sifat yang mudah melepas elektron dibandingkan dengan logam-logam yang digunakan pada penelitian terdahulu. Logam kalsium memiliki orbital d yang kosong sehingga dimungkinkan dapat terjadi transisi elektronik jika logam tersebut dikonjugasikan dengan porfirin.

Modeling senyawa menggunakan metode komputasi *Density Functional Theory (DFT)*. Metode ini dipilih karena memodelkan sistem molekul dengan akurat dan memberikan data dalam tingkat mikroskopik yang berkorelasi signifikan dengan hasil eksperimen laboratorium. Metode DFT yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Restricted Kohn-Sham (RKS)* atau *Closed Shell Kohn-Sham (CLKS)*. Metode tersebut digunakan karena molekul merupakan sebuah sistem yang tertutup dan logam pusat hanya saling berinteraksi dengan atom nitrogen dan cincin pirol. Sedangkan fungsional yang digunakan adalah fungsional *hybrid (B3LYP)*. Fungsional *hybrid (B3LYP)* digunakan karena senyawa yang diprediksi sifat dan struktur elektroniknya merupakan senyawa organik yang mengandung logam.

Set basis yang digunakan adalah *6-31G\**. Notasi *6-31G\** menandakan di dalam set basis ini terdapat enam fungsi Gaussian yang mewakili orbital ini, tiga fungsi Gaussian untuk orbital elektron valensi bagian yang berkontraksi, dan satu untuk bagian yang berdifusi. Notasi (\*) menunjukkan fungsi polarisasi pada atom non hidrogen (dalam senyawa di atas adalah atom C dan N).

Dengan metode komputasi, perhitungan akan aras-aras energi akan dapat ditentukan, terutama dalam penentuan energi HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbitals*) dan energi LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbitals*), sehingga celah energi di dapat dirumuskan selisih antara energi LUMO ( $E_{\text{LUMO}}$ ) dengan energi HOMO ( $E_{\text{HOMO}}$ ).

Pada penelitian ini akan dikaji porfirin yang dikonjugasikan dengan atom logam Ca. Harapannya, porfirin yang dikonjugasikan atom logam Ca memiliki celah energi (*band gap*) yang kecil ( $E_g \sim 1,1$  eV), sehingga dapat dijadikan devais semikonduktor untuk pembuatan sensor optik.

## METODE PENELITIAN

### Perangkat keras dan lunak

Perhitungan dilakukan menggunakan komputer dengan spesifikasi prosesor Intel (R) Core™ i5 M460 @2,53 GHz dan RAM 4 GB. Perhitungan komputasi menggunakan sistem operasi *Windows 7 Home Premium* dan *Linux*

*Ubuntu 10.1*, sedangkan untuk perangkat lunak digunakan Gabedit 2.2.12, MPQC 2.3.1-6, Molden 5.0, Ghemical 2.99.2, dan Avogadro 1.0.1. *Software* Gabedit 2.2.12 digunakan untuk membuat *input file* MPQC, selanjutnya MPQC 2.3.1-6 digunakan untuk melakukan semua perhitungan komputasi molekul meliputi optimasi geometri dan perhitungan energi satu titik serta  $E_{\text{HOMO}}$  dan  $E_{\text{LUMO}}$ . Ghemical 2.99.2 dan molden 5.0 digunakan untuk memvisualisasikan kerapatan elektron dan orbital HOMO-LUMO dalam bentuk 3D. Avogadro 1.0.1 digunakan untuk visualisasi molekul 3D.

### Prosedur penelitian

#### Pembuatan model awal

Untuk melakukan penelitian ini dibutuhkan struktur 3 dimensi dari molekul porfirin dan porfirin terkonjugasi atom logam Ca dengan bentuk serta konfigurasi yang tepat. Langkah pertama adalah memodelkan senyawa tersebut secara 2 dimensi. Selanjutnya, senyawa tersebut dibuat struktur 3 dimensi dengan menggunakan program Gabedit 2.2.12. Untuk mendapatkan konfigurasi yang tepat, diambil informasi dari literatur dan penelitian terdahulu [2]. Untuk konfirmasi konfigurasi yang lebih tepat, diambil juga data dari situs [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com).

Dengan demikian, diperoleh konfigurasi yang benar dan tepat. Struktur yang sudah jadi tersebut disimpan dengan jenis file gabedit. Selanjutnya digunakan sebagai senyawa awal pada penelitian ini.

#### Optimasi geometri

Langkah kedua yaitu meminimisasi struktur dengan menjalankan optimasi geometri terhadap senyawa porfirin terkonjugasi hasil dari langkah pertama. Sebelum dilakukan optimasi geometri, terlebih dahulu dibuat *simple input file* dan *object oriented file* melalui menu terminal. Pada *simple input file* diatur metode perhitungan dengan Teori Fungsional Kerapatan (DFT) dengan basis set yang digunakan adalah 6-31G\*. Pada *object oriented file* diatur *write\_pdb = 1*. Tujuannya adalah agar hasil running MPQC tersimpan dalam file.pdb (protein data bank), sehingga dapat divisualisasikan dalam beberapa *software* komputasi.

Setelah itu pada menu terminal ketik perintah : *mpqc file.in >> file.out*, hal ini

bertujuan untuk mencatat semua hasil perhitungan. Selanjutnya, program MPQC 2.3.1 mulai melakukan konvergensi sampai diperoleh energi potensial permukaan minimum.

#### Penentuan celah energi (*band gap*)

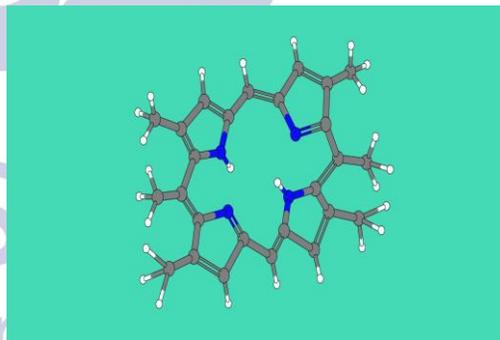
Langkah selanjutnya, menentukan celah energi. Celah energi merupakan selisih antara energi LUMO ( $E_{\text{LUMO}}$ ) dengan energi HOMO ( $E_{\text{HOMO}}$ ). HOMO adalah orbital tertinggi pada pita valensi yang ditempati elektron. Sedangkan LUMO adalah orbital terendah pada pita konduksi yang tidak ditempati elektron.

Penghitungan celah energi ini dilakukan baik untuk senyawa porfirin maupun porfirin terkonjugasi. Setelah itu, dianalisis mengenai celah energi yang dihasilkan terhadap sifat fotosensitifitasnya, sehingga bahan tersebut mempunyai peluang untuk dikembangkan sebagai detektor inframerah organik atau sensor.

### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### Proses Komputasi Senyawa Porfirin Terkonjugasi Logam

Pemodelan molekul dilakukan dengan menggunakan *software* Gabedit 2.2.12. Sebagai contoh adalah pada struktur molekul porfirin, ditampilkan pada Gambar 1



Gambar 1 Visualisasi porfirin menggunakan *Software* Gabedit 2.2.12.

Setelah dilakukan pemodelan, molekul porfirin terkonjugasi dioptimasi dengan menggunakan metode *density functional theory* (DFT) untuk mendapatkan struktur paling stabil dengan tingkat energi minimum. Selanjutnya dilakukan perhitungan energi satu titik (*single point energy calculation*) untuk mengoptimasi fungsi gelombang sehingga didapatkan tingkat energi yang lebih minimum dibanding energi

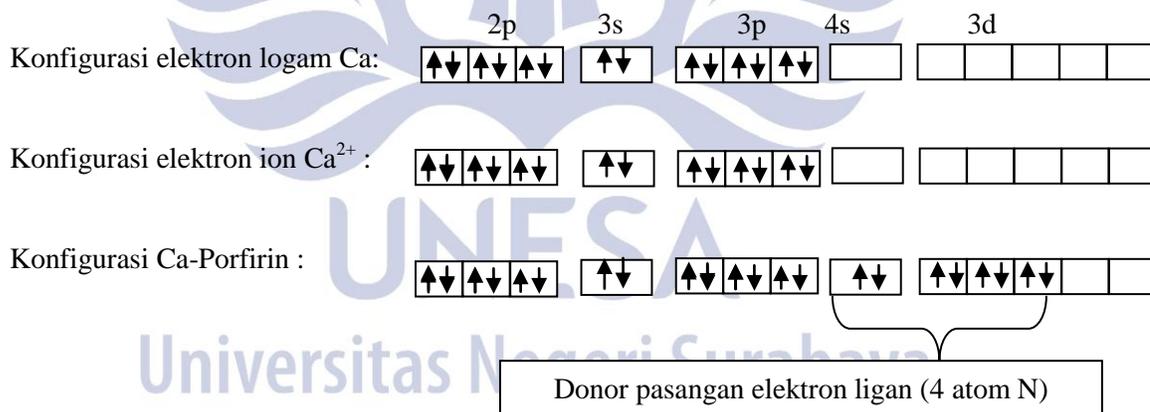
hasil optimasi geometri. Tahapan yang sama juga dilakukan terhadap kompleks porfirin terkonjugasi atom logam Ca. Sebelum melakukan langkah-langkah di atas, terlebih dahulu ditentukan metode DFT dan set basis yang digunakan.

Berdasarkan hasil optimasi dengan metode DFT dan set basis di atas, maka diperoleh data panjang ikatan, sudut ikatan, dan total *SCF energy*. Panjang ikatan (Å) Ca-N(6-21), Ca-N(6-32), Ca-N(6-34), Ca-N(6-46), N-Ca-N(21-6-32), dan N-Ca-N(34-6-46) secara berurutan adalah 2.29912, 2.18910, 2.48986, dan 2.65889. Sementara itu, sudut ikatan (°) N-Ca-N (21-6-32) dan N-Ca-N (34-6-46) adalah 134.65716 dan 133.96169. Untuk total *SCF* energi sebesar -1901.146120 Hartree.

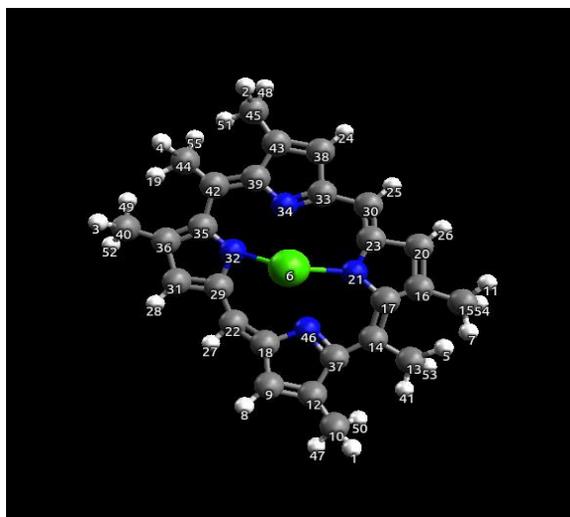
Senyawa kompleks terbentuk dari interaksi atom pusat sebagai asam Lewis dan ligan sebagai basa Lewis atau interaksi yang didasarkan pada teori HSAB (*Hard and soft acid and bases*) [5]. Porfirin terkonjugasi Ca termasuk senyawa kompleks, dimana terbentuk ikatan antara kalsium (Ca) dengan nitrogen (N) yang memiliki panjang ikatan pada rentang 2-3 Å sebanyak 4 ikatan. Logam Ca sebagai atom

pusat dan berdasarkan teori HSAB termasuk dalam kelompok “*Hard*”, sementara itu ligan dari senyawa kompleks tersebut adalah porfirin dengan atom Nitrogen (N) sebagai sumber basanya. Teori HSAB tersebut berkaitan erat dalam menjelaskan ikatan kovalen dan kovalen koordinasi, atom oksigen dibandingkan dengan atom nitrogen memiliki kecenderungan yang lebih tinggi membentuk senyawa kompleks dengan logam magnesium dan kalsium [6].

Kecenderungan ikatan yang terbentuk adalah ikatan ionik dan kovalen koordinasi. Ikatan kovalen koordinasi disebabkan adanya orbital kosong pada atom kalsium sehingga pasangan elektron yang dimiliki oleh atom nitrogen pada porfirin akan dikoordinasikan/menempati orbital kosong tersebut untuk membentuk ikatan kovalen koordinasi. Kompleks Ca-Porfirin, atom pusatnya adalah Ca yang menggunakan orbital s dan d kosong sebagai akseptor untuk menerima 4 pasangan elektron dari 4 atom N pada ligan porfirin. Pembentukan ikatan pada senyawa kompleks Ca-porfirin dapat dijelaskan melalui teori ikatan valensi (VBT). Menurut teori ikatan valensi (VBT) adalah sebagai berikut:



Gambar 2. Teori Ikatan Valensi (VBT) Ca-porfirin



Gambar 3 Visualisasi Model Molekul Ca-Porfirin Menggunakan *Software* Avogadro

Sudut ikatan berpengaruh dalam distribusi elektron pada suatu molekul dan fleksibilitas molekul, hal tersebut juga terjadi pada molekul porfirin yang dikonjugasikan dengan logam kalsium. Sudut ikatan adalah sudut yang terbentuk oleh atom pusat di puncak dengan dua atom di sekelilingnya. Semakin besar sudut yang dibentuk oleh atom-atom (semakin linier) maka semakin kurang fleksibel molekul yang terbentuk. Hal ini disebabkan oleh distribusi muatan elektron yang tersebar merata. Oleh karena itu, molekul Ca-porfirin memiliki tingkat fleksibilitas yang cukup tinggi, sehingga memungkinkan untuk dibentuk sangat tipis sebagai bahan semikonduktor. Ca-porfirin merupakan kompleks yang stabil. Hal tersebut dapat dijelaskan dengan panjang ikatan antara logam pusat dengan atom nitrogen porfirin dan distribusi muatan. Kation logam besar akan lebih stabil membentuk kompleks daripada kation logam kecil, hal ini disebabkan karena kation

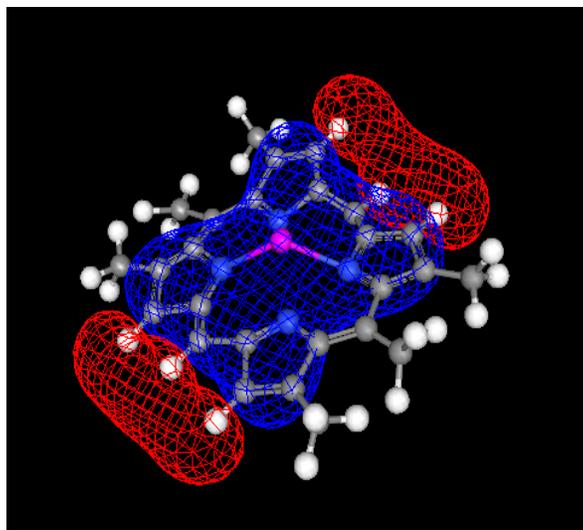
logam besar mempunyai bilangan koordinasi yang besar daripada kation logam kecil sehingga akan lebih mampu menampung donor atom oksigen atau nitrogen [7].

Kerapatan elektron merupakan daerah/ruang dimana elektron dapat ditemukan. Elektron merupakan elemen yang sangat penting dalam menjelaskan sifat dari molekul, dengan elektron kita dapat memprediksi struktur molekul, kekuatan ikatan, reaktivitas, dan kestabilan. Kerapatan elektron sering dihubungkan dengan *ESP-surface* yaitu peluang ditemukannya elektron pada koordinat kartesian ( $x$ ,  $y$ , dan  $z$ ) dalam sebuah molekul. Kerapatan elektron kompleks Ca-porfirin terlihat jelas di area interaksi antara logam pusat dengan atom-atom nitrogen (warna biru), hal ini disebabkan oleh kerapatan elektron pada logam Ca yang dikonjugasikan ke porfirin relatif tinggi, kerapatan elektron golongan IIA  $\text{Ca} > \text{Mg} > \text{Be}$  [8].

Gambar 4 menunjukkan kerapatan elektron dari Ca-porfirin. Rapat muatan positif (biru) lebih meruah di daerah cincin makrosiklik, hal ini disebabkan adanya jembatan penghubung antar muatan positif yaitu logam Ca. Kompleks yang stabil dikarenakan memiliki ligan yang berukuran besar (polidentat) yang cenderung akan mengkoordinasi atom pusat yang besar sehingga akan menghasilkan kompleks yang lebih sempit atau lebih rapat. Adanya atom pusat Ca akan menambah rapat muatan positif dan ligan yang juga besar akan memberikan efek tolakan yang sama besar sehingga dapat menyebabkan kompleks ini akan stabil. Logam Ca mempunyai kemampuan polarisasi yang lebih besar sehingga menghasilkan kompleks yang lebih stabil.

Tabel 1. Kerapatan Elektron (*ESP-Surface*)

Senyawa kompleks	kerapatan elektron		
	x	Y	z
Ca-Porfirin	386 points,	434 points,	638 points,
	1281 cycles	7681 cycles	2190 cycles



Gambar 4. Visualisasi ESP-Surface Kompleks Ca-Porfirin Menggunakan *Software Ghemical*

### Kajian Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam Kalsium

Tabel 2. Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam

Senyawa kompleks	Energi HOMO-LUMO (Hartree)		Celah energi (eV)	Celah energi ( $\times 10^{-19}$ Joule)
	Energi HOMO	Energi LUMO		
Ca-Porfirin	-0.160819	-0.120558	1.09555756	1.75527654

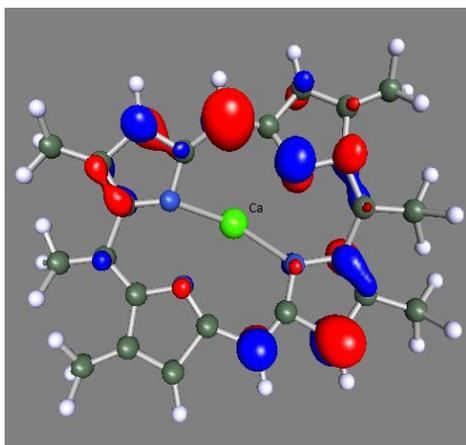
Dari tabel 2, terlihat bahwa Ca-Porfirin memiliki celah energi (*band gap*) mendekati 1,1 eV. Selisih energi orbital HOMO-LUMO sebesar 1,1 eV ini akan mencerminkan kemudahan dalam proses terjadinya eksitasi elektron sehingga sifat kepekaannya terhadap cahaya (fotosensitivitas) akan cenderung lebih kuat. Oleh karena itu, dapat diklasifikasikan bahwa Ca-Porfirin memiliki sifat fotosensitivitas yang kuat.

Pita energi adalah kumpulan garis pada tingkat energi yang sama saling berimpit dan membentuk pita. Pada orbit bagian luar terdapat elektron yang sangat banyak dengan tingkat-tingkat energi yang berimpit satu sama lain. Berdasarkan asas Pauli, dalam suatu tingkat energi tidak boleh terdapat lebih dari satu elektron pada keadaan yang sama, maka apabila ada elektron yang berada pada keadaan yang sama akan terjadi pergeseran tingkat energi sehingga tidak pernah ada garis – garis energi yang bertindihan.

Level Fermi adalah level energi tertinggi yang masih dapat ditempati elektron pada temperatur absolut nol. Apabila level Fermi suatu bahan lebih dekat dengan LUMO, dapat dikatakan bahan tipe-n, dan berperilaku sebagai penerima (akseptor) elektron, sedangkan apabila level Fermi suatu bahan lebih dekat dengan HOMO, bahan tersebut dapat dikatakan bahan tipe-p dan berperan sebagai pemberi (donor) elektron. Diagram pita energi menunjukkan (pita kuning) bahwa level fermi lebih mendekati orbital HOMO, sehingga porfirin terkojugasi logam Ca memiliki sifat semikonduktor tipe-p (gambar 5).



Gambar 5. Diagram pita energi Ca-porfirin



Gambar 6. LUMO molekul Ca-Porfirin

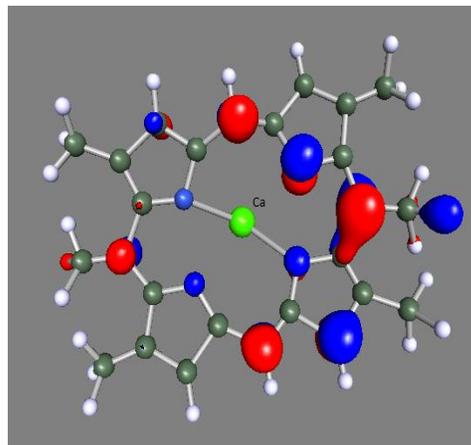
Bagian teratas dari keadaan yang ditempati oleh elektron pada pita valensi disebut *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO), sedangkan bagian terbawah dari keadaan yang tidak ditempati elektron pada pita disebut dengan *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO), atau dapat juga dikatakan bahwa HOMO merupakan analog bagi pita valensi dalam kajian semikonduktor berbasis bahan anorganik, sedangkan LUMO merupakan analog bagi pita konduksi.

Orbital molekul merupakan penyelesaian dari pendekatan persamaan mekanika kuantum dari gerakan elektron yang didapatkan sebagai hasil penjumlahan dan penyelesaian atomik (orbital atom), seperti halnya molekul dibuat sebagai kombinasi atom. Orbital molekul untuk molekul sederhana seringkali diinterpretasikan dalam istilah ikatan kimia atau sebagai pasangan elektron tak terikat (nonbonded). Secara umum semakin terdelokalisasi orbital, semakin stabil molekul ini (energi yang lebih rendah) [10]. Oleh karena itu, Ca-porfirin merupakan kompleks yang stabil. Seperti terlihat pada gambar 7 dan 8.

## PENUTUP

### Simpulan

Celah energi porfirin terkonjugasi logam Ca adalah 1.09555756 eV. Oleh karena itu, dapat diklasifikasikan bahwa Ca-Porfirin memiliki sifat fotosensitivitas yang kuat, sehingga berpotensi untuk dijadikan detektor (sensor) inframerah yang baik.



Gambar 7. HOMO molekul Ca-Porfirin

## Saran

Perlu dilakukan uji parameter sifat optik lain dari senyawa porfirin terkonjugasi logam kalsium dan dipelajari kembali porfirin terkonjugasi logam Ca dengan menggunakan basis set yang lebih tinggi pada proses komputasinya, sehingga didapatkan hasil prediksi yang lebih akurat.

## DAFTAR PUSTAKA

1. Pedersen, T.G., 2004. Density-functional-based tight-binding calculation of excitons in conjugated polymers. *Phys.Rev.*, B 69 075207
2. Sudanti, Susi. 2006. Kajian Teoritis Untuk Menentukan Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Atom Perak dan Tembaga dengan Menggunakan Metode Mekanika Kuantum semiempiris Zindo/1. *Skripsi*. Jurusan Kimia, FMIPA, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
3. Candra, Robby. 2006. Sensor dan Transduser. Depok: Universitas Gunadarma
4. Ohno, Koichi. 2004. Quantum Chemistry. Tokyo: Iwanami Publishing Company
5. Huheey J E. 1978. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 2nd ed. New York, Harper & Row Publisher
6. C. Wilkins, Patricia dan Wilkins, Ralph G. 1997. Inorganic Chemistry in Biology. New York: Oxford University Press.
7. Syaifuddin, M. dan Kasmui. (\_\_\_\_). Kajian Teoritis Kestabilan Kompleksasi Eter

- Tetraaza-18Crown6 (TA-18C6) Terhadap Kation  $Cd^{2+}$  Dan Kation  $Cu^{2+}$  Dengan Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan (Density Functional Theory = DFT). Jurusan Kimia, FMIPA, Unnes, Semarang.
8. Albert Cotton; Geoffrey Wilkinson. 1989. Kimia Anorganik Dasar. Penerjemah: Suhati Suharto. Pedamping: Yanti R. A. Koestoer. Cetakan Pertama. Jakarta. Penerbit Universitas Indonesia (UI-Press)
  9. Dwi Pranowo, Harno. (2002). *Pengantar Kimia Komputasi Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC)*. Yogyakarta : Kimia FMIPA UGM
  10. Moffett, T. M., 2007, Molecular Orbital Theory, SUNY Plattsburgh, Plattsburgh USA.
  11. Zhi-Cheng Sun, Yuan-Bin She, Yang Zhou, Xu-Feng Song and Kai Li. 2011. Synthesis, characterization and spectral properties of substituted tetraphenylporphyrin iron chloride complexes. *Molecules*, 16, 2960-2970.
  12. M. Makarska, St. Radzki, J. Legendziewicz, J. 2002. *Alloys Comp.* 341233.
  13. Supriyanto A, Triyana K, Roto, Kusminarto. 2008. Karakteristik optoelektronik larutan porphyrin hasil isolasi dari mikroalgae spirulina. *Prosiding Seminar Nasional Aplikasi Fotonika E6-1-E6-4*.
  14. Gadisa, A., 2006, Studies of Charge Transport and Energy Level in Solar Cells Based on Polymer/Fullerene Bulk Heterojunction, *Dissertasi Doktorat*, Universitas Linköping, Swedia.
  15. Hoppe, H., Sariciftci, N. S., 2004, Modeling of optical absorption in conjugated polymeryfullerene bulkheterojunction plastic solar cells, *Thin Solid Films*, Nomor 451-452, halaman 589-592.
  16. Kahn, Antoine, et al. 2005. *Electrical Doping of  $\pi$ -Conjugated Organic Molecular Films: Fundamental Mechanisms and New Electronic Functions*. Princenton University, USA.
  17. Nasruddin dan Leenawaty Limantara. 2008. Menggagas Fotosintesis Buatan Hibrida berbasis Struktur Nano Porfirin. *Jurnal Nanosains & Nanoteknologi ISSN 1979-0880 Vol. 2 No. 1*, Februari 2009.