

**MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS KUINOLIN
SEBAGAI *SENSITIZER* PADA SEL SURYA MENGGUNAKAN
METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

ELVIRA DESWITA

NIM : 1810412042



**PROGRAM SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2022**

**MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS KUINOLIN
SEBAGAI *SENSITIZER* PADA SEL SURYA MENGGUNAKAN
METODE DFT**

Oleh

ELVIRA DESWITA

NIM : 1810412042



Skripsi ini diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains
pada Program Sarjana Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Andalas

**PROGRAM SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2022**

INTISARI

MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS KUINOLIN SEBAGAI SENSITIZER PADA SEL SURYA MENGGUNAKAN METODE DFT

Oleh:

Elvira Deswita (NIM: 1810412042)
Imelda, M.Si, Prof. Dr. Hermansyah Aziz

Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs) merupakan teknologi sel surya generasi ketiga yang menjanjikan karena biaya produksinya sangat murah. Pemeka cahaya (*sensitizer*) yang digunakan dalam DSSC yaitu zat warna organik dan anorganik. Zat warna organik memiliki keunggulan diantaranya: ramah lingkungan, sumber berlimpah, dan biaya produksi murah, tetapi memiliki efisiensi serapan cahaya yang rendah sehingga perlu dimodifikasi. Penelitian ini bertujuan untuk memodifikasi zat warna tipe D- π -A (Donor- π konjugasi- Akseptor) berbasis kuinolin dengan variasi rantai donor, rantai akseptor yang efisien sebagai sensitizer pada DSSC dan menentukan pengaruh gugus pendorong dan gugus penarik elektron terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna. Metode perhitungan yang digunakan yaitu metode *Density Functional Theory/Time Dependent-DFT* (DFT/TD-DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G menggunakan *software Gaussian 16W*. Analisis berdasarkan parameter nilai *bandgap*, serapan panjang gelombang cahaya, energi eksitasi, ΔG^{inject} , ΔG^{reg} , *oscillator strength* (f), sudut dihedral, panjang ikatan, momen dipol, *Light Harvesting Efficiency* (LHE) dan *open circuit voltage* (V_{oc}). Hasil penelitian menunjukkan zat warna DWQ dengan nama *6-(2-aminoindolin-5-yl)-3-nitroquinoline-2-carboxylic acid* merupakan zat warna terbaik dengan nilai *bandgap* sebesar 1,5937 eV, serapan panjang gelombang cahaya sebesar 1012,37 nm, energi eksitasi sebesar 1,2247 eV, ΔG^{inject} -0,1148 eV, ΔG^{reg} 0,3099 eV, dan V_{oc} 0,4838 eV. Oleh karena itu, dapat disimpulkan bahwa modifikasi zat warna kuinolin menjadi tipe D- π -A mampu meningkatkan kinerja dari DSSC.

Kata kunci: Zat Warna, Kuinolin, Tipe D- π -A, DFT, DSSC

ABSTRACT

STRUCTURE MODIFICATION OF QUINOLINE BASED DYE AS A SENSITIZER OF SOLAR CELL USING DFT METHODE

By:

Elvira Deswita (NIM : 1810412042)
Imelda, M.Si ; Prof. Dr. Hermansyah Aziz

Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs) is a third generation solar cell technology that is promising due to its low production cost. The light sensitizers used in DSSC are organic and inorganic dyes. Organic dyes have advantages including: environmentally friendly, abundant sources, and cheap production cost, but have a low light absorption efficiency so it need to be modified. In this study, quinoline-based D- π -A organic dye was used. The aim of this study was to modify the quinoline-based D- π -A dye with variations of the donor chains, and acceptor chains and determine the effect of electron donating groups and electron withdrawing groups on the efficiency of light absorption. The calculation method were used is the Density Functional Theory/Time Dependent-DFT (DFT/TD-DFT) method with a B3LYP/6-31 Gbasis set using Gaussian 16W software. Analysis based on the parameters of the bandgap, wavelength absorption, excitation energy, ΔG^{inject} , ΔG^{reg} , oscillator strength, dihedral angle, bond length, dipole moment, light harvesting efficiency, (LHE) and open circuit voltage (V_{oc}). The result of the study show DWQ with the name 6-(2-aminoindolin-5-yl)-3-nitroquinoline-2-carboxylic acid is the best dye with a bandgap is 1.5937 eV, absorption wavelength is 1012.37 nm, excitation energy is 1.2247 eV, ΔG^{inject} is -0.1148 eV, ΔG^{reg} is 0.3099 eV, V_{oc} is 0.4838 eV. Therefore, it can be concluded that the modification of quinolone dye to D- π -A type can improve the performance of DSSC.

Keywords: Dyes, Quinoline, D- π -A type, DFT, DSSC

