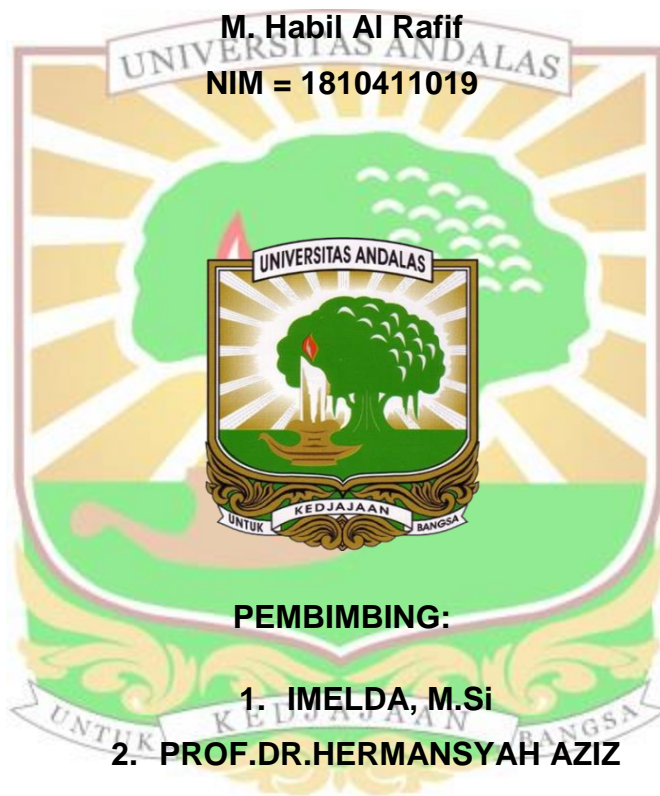


**MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS PURIN UNTUK
MENINGKATKAN EFISIENSI SEL SURYA MENGGUNAKAN METODE
*DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)***

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

**M. Habil Al Rafif
NIM = 1810411019**



PEMBIMBING:

- 1. IMELDA, M.Si**
- 2. PROF.DR.HERMANSYAH AZIZ**

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

INTISARI

MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS PURIN UNTUK MENINGKATKAN EFISIENSI SEL SURYA MENGGUNAKAN METODE *Density Functional Theory (DFT)*

Oleh:

M Habil AI Rafif (BP: 1810411019)

Imelda, M.Si ; Prof. Dr. Hermansyah Aziz

*Pembimbing

Sumber energi terbarukan dan ramah lingkungan sebagai solusi untuk menggantikan energi fosil salah satunya energi surya. Sel surya yang digunakan adalah sel surya tersensitasi zat warna *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) yang merupakan teknologi sel surya generasi ketiga yang menjanjikan karena biaya produksi yang sangat murah. *Sensitizer yang digunakan pada DSSC* yaitu zat warna organik dan anorganik. Keunggulan dari menggunakan zat warna organik adalah ramah lingkungan, mudah didapatkan dan biaya produksi yang murah. Pada penelitian ini bertujuan untuk memodifikasi zat warna tipe D- π -A (Donor- π konyugasi-Akseptor) yang berbasis purin dengan variasi rantai donor, rantai akseptor dan pengaruh gugus pendorong dan gugus penarik elektron terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna. Metode perhitungan yang akan digunakan yaitu metode (*Density Functional Theory/Time Dependent-DFT(DFT/TD-DFT)*) dengan basis set B3LYP/6-31G-STO-3G menggunakan software *Gaussian 16W*. Parameter perhitungan yang digunakan untuk menentukan efisiensi sebagai sensitizer pada DSSC adalah nilai *bandgap*, serapan panjang gelombang cahaya, energi eksitasi, ΔG^{inject} , ΔG^{reg} , *oscillator strength (f)*, sudut dihedral, panjang ikatan, momen dipol, LHE (*Light Harvesting Efficiency*) dan *Voc (open circuit voltage)*. Hasil penelitian menunjukkan zat warna P3A3D2W2 merupakan zat warna terbaik dengan nilai *bandgap* sebesar 2,7670 eV, serapan panjang gelombang cahaya sebesar 672,18 nm, energi eksitasi sebesar 1,8445 eV, ΔG^{inject} -1,32016 eV, ΔG^{reg} -1,32434 eV, dan *Voc* 3,2915 eV. Dapat disimpulkan bahwa modifikasi zat warna purin menjadi tipe D- π -A mampu meningkatkan kinerja dari DSSC.

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

ABSTRACT

STRUCTURE MODIFICATION OF PURINE-BASED DYES TO IMPROVE THE EFFICIENCY OF SOLAR CELL USING THE *Density Functional Theory* (DFT) METODE

By:

M Habil Al Rafif (BP: 1810411019)
Imelda, M.Si; Prof. Dr. Hermansyah Aziz

**Supervisor*

Renewable and environmentally friendly energy sources as a solution to replace fossil energy, one of which is solar energy. The solar cells used are dye-sensitized solar cells, Dye Sensitized Solar Cells (DSSC), which is a promising third-generation solar cell technology because of its very low production cost. The sensitizers used in DSSC are organic and inorganic dyes. The advantages of using organic dyes are environmentally friendly, easy to obtain and low production costs. This study aims to modify purine-based D- π -A (Donor- π conjugated-Acceptor) type dyes with variations in donor chains, acceptor chains and the effect of electron-withdrawing and driving groups on the efficiency of light absorption of dyes. The calculation method that will be used is the method (Density Functional Theory/Time Dependent-DFT(DFT/TD-DFT) with the base set B3LYP/6-31G and STO-3G using Gaussian 16W software. The calculation parameters used to determine efficiency as a sensitizer in DSSC are bandgap values, absorption of light wavelengths, excitation energy, ΔG^{inject} , ΔG^{reg} , oscillator strength (f), dihedral angle, bond length, dipole moment, LHE (Light Harvesting Efficiency) and Voc (open circuit voltage). The results showed that P3A3D2W2 dye was the best dye with a bandgap value of 2.7670 eV, wavelength absorption of light of 672.18 nm, excitation energy of 1.8445 eV, ΔG^{inject} -1.32016 eV, ΔG^{reg} -1.32434 eV, and Voc 3.2915 eV. It can be concluded that the modification of purine dyes into D- π -A type can improve the performance of DSSC.

Keywords: Dyes, Purines, Type D- π -A, DFT, DSSC