

INTISARI

Rekayasa Struktur Akseptor pada Zat Warna Organik Tipe D- π -A dengan Kerangka Tiofen Menggunakan Metode Semiempiris *Austin Model 1* (AM1)

Oleh:

Mesa Irna Suryani (BP 1310416002)

Pembimbing:

Imelda, M.Si, Emdeniz, M.S

Penelitian ini mengamati struktur geometri dan sifat elektronik (*counter* HOMO-LUMO, energi gap (ΔE) dan momen dipol) pada zat warna organik tipe Donor- π berkonjugasi-Akseptor (D- π -A). Perhitungan komputasi dari zat warna ini memodelkan sistem gugus donor/pendorong elektron, penghubung dan gugus akseptor/penarik elektron, dilakukan untuk membandingkan interaksi variasi rantai akseptor terhadap zat warna organik tipe D- π -A yang paling efektif menyerap cahaya. *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) merupakan salah satu generasi sel surya yang banyak diteliti sampai saat ini. Sel surya ini menggunakan zat warna sebagai sensitizer dan menjadi sangat menarik untuk dikembangkan karena membutuhkan biaya produksi yang murah namun mampu menghasilkan kinerja yang cukup baik. Dalam penelitian ini perhitungan komputasi menggunakan perangkat *HyperChem versi 8.0*, dengan metode *Austin Model 1* (AM1). Selisih energi HOMO-LUMO (energi gap) terkecil dihasilkan sebesar 4,9123 eV dengan momen dipol sebesar 9,325 D pada zat warna organik 8. Untuk *counter* HOMO dan LUMO, *density* elektron pada daerah HOMO berada pada rantai donor, sedangkan *density* elektron untuk daerah LUMO berada pada rantai akseptor. Pengaruh gugus penarik Cl pada rantai π zat warna organik 8 menghasilkan energi gap paling kecil yaitu sebesar 4,7353 eV. Zat warna organik 8 mempunyai sifat kepekaan terhadap cahaya yang cenderung lebih kuat karena menghasilkan energi gap kecil dan momen dipol besar serta dengan adanya gugus penarik elektron pada rantai π dapat menurunkan energi gap dari zat warna tersebut, sehingga lebih efektif untuk menyerap cahaya.

Kata kunci: Sensitizer D- π -A, Semiempiris AM1, DSSC