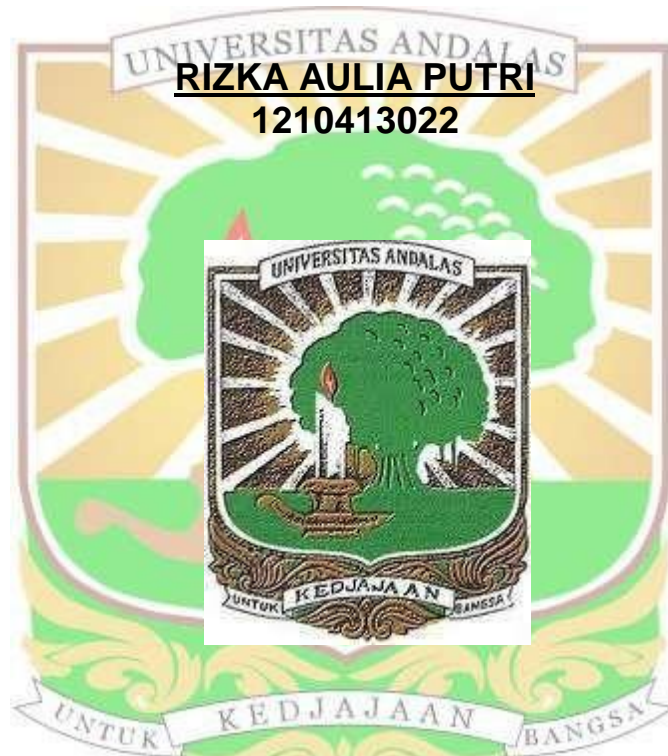


**REKAYASA STRUKTUR RANTAI  $\pi$ -KONJUGASI PADA ZAT  
WARNA ORGANIK TIPE D- $\pi$ -A DENGAN KERANGKA  
TIOFEN MENGGUNAKAN METODE SEMIEMPIRIS  
*AUSTIN MODEL 1 (AM1)***

**OLEH:**



**Dosen Pembimbing:**

1. Imelda, M.Si
2. Emdenis, M.S

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2017**

# REKAYASA STRUKTUR RANTAI $\pi$ -KONJUGASI PADA ZAT WARNA ORGANIK TIPE D- $\pi$ -A DENGAN KERANGKA TIOFEN MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS *AUSTIN MODEL 1 (AM1)*

Rizka Aulia Putri, Imelda, Emdenis

## ABSTRAK

*Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)* atau sel surya tersensitasi zat warna merupakan sel surya yang paling efisien dan stabil digunakan seiring dengan perkembangan penggunaan sel surya. Zat warna memiliki peranan yang penting pada DSSC dan saat ini telah berkembang penelitian tentang zat warna tipe D- $\pi$ -A (Donor- $\pi$  berkonjugasi-Akseptor) yang dapat dilakukan variasi terhadap rantai  $\pi$ -konjugasi dan penambahan gugus penarik/ pendorong elektron untuk menentukan zat warna organik yang lebih potensial untuk menyerap cahaya. Pada penelitian ini perhitungan dilakukan menggunakan metoda semiempiris *Austin Model 1 (AM1)*, untuk mengamati struktur geometri dan sifat elektronik (*counter* HOMO-LUMO, energi gap ( $\Delta E$ ), dan momen dipol) pada zat warna organik tipe D- $\pi$ -A. Hasil penelitian menunjukkan zat warna organik 4 (1-dimetil-3-N-trifenilamin-2-2,2':5'-2"-tertiofen-2-karbon-disianida) memiliki nilai energi LUMO-HOMO (energi gap) paling kecil dari 8 zat warna organik lain yaitu 5,5036 eV dengan momen dipol 7,294 D. Zat warna organik 4.3 memiliki energi gap lebih kecil dari zat warna organik 4 yaitu 5,2319 eV dan momen dipol 9,292 D dengan penambahan  $\text{NO}_2$  sebagai gugus penarik. Zat warna organik 4.7 dengan penambahan gugus pendorong dan penarik elektron sekaligus pada zat warna organik 4 mampu menurunkan energi gap menjadi 5,1372 eV dengan momen dipol 10,32 D, dengan adanya  $\text{C}_3\text{H}_5$  sebagai gugus pendorong elektron dan  $\text{NO}_2$  sebagai gugus penarik elektron. Hasil *counter* HOMO dan LUMO menggambarkan kerapatan elektron yang terdapat pada molekul zat warna organik. *Counter* HOMO berada pada daerah donor dan *counter* LUMO berada pada daerah akseptor. Berdasarkan hasil penelitian ini, dapat disimpulkan bahwa zat warna organik 4.7 merupakan salah satu zat warna organik yang lebih potensial digunakan untuk menyerap cahaya karena memiliki energi gap paling kecil.

Kata kunci - **Zat warna tipe D- $\pi$ -A, Semiempiris AM1, DSSC**

# ENGINEERING STRUCTURE $\pi$ -CONJUGATED CHAIN ON ORGANIC DYES D- $\pi$ -A TYPE WITH THIOPHENE FRAMEWORK USING SEMIEMPIRICAL AUSTIN MODEL 1 (AM1) METHOD

Rizka Aulia Putri, Imelda, Emdenis

## ABSTRACT

Dye-sensitized Solar Cells (DSSCs) is the most efficient solar cells and stable used along with the expansion of solar cells. The dye has an important role in the DSSC and organic dye with D- $\pi$ -A type (Donor- $\pi$ -conjugated-Acceptor) has been researched at present. The dye can be varied in  $\pi$ -conjugated chain and substitution electron-withdrawing/ anchoring functional groups to determine more potential dyes to absorb light. In this research, the compute done used semiempirical Austin Model 1 (AM1) method to observe the geometric structure and electronic properties (counter HOMO-LUMO, band gap ( $\Delta E$ ), and dipole moment) organic dye with D- $\pi$ -A type. The results indicated organic dye 4 (1-dimethyl-3-N-triphenylamine-2,2':5'-2"-terthiophene-2-carbon-dicyanide) has a value of LUMO-HOMO energy (band gap) the smallest than other dyes is 5.5036 eV with 7.294 D dipole moment. The organic dye 4.3 has more smaller band gap than organic dye 4 is 5.2319 eV and 9.292 D dipole moment with the substitution  $\text{NO}_2$  as electron-withdrawing groups. Organic dye 4.7 with simultaneously substitution electron-withdrawing groups and electron-anchoring groups on the organic dye 4, capable decrease of the band gap equal to 5.1372 eV with 10.32 D dipole moment, with substitution  $\text{C}_3\text{H}_5$  as electron-anchoring groups and  $\text{NO}_2$  as electron-withdrawing groups. The results of the counter HOMO and LUMO described electron density contained in the organic dyes molecules. Counter HOMO in the area of donor and counter LUMO in the area of acceptor. Based on the results, we can concluded that the organic dye 4.7 is one of the organic dyes used more potential to absorb light because it has the smallest band gap.

**Keywords - Dyes D- $\pi$ -A type, Semiempirical AM1, DSSCs**