

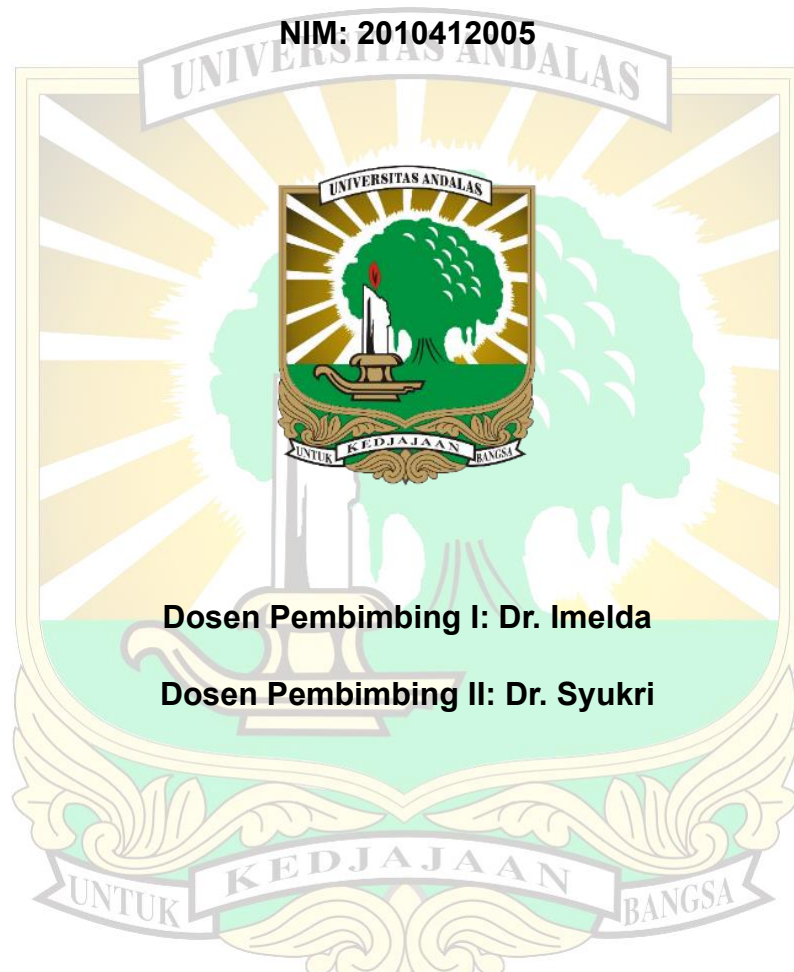
**MODIFIKASI TEORITIK STRUKTUR ZAT WARNA TIPE D- $\pi$ -A BERBASIS  
DITIOFEN SEBAGAI *SENSITIZER* PADA SEL SURYA**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh:**

**RESHIVA**

**NIM: 2010412005**



**Dosen Pembimbing I: Dr. Imelda**

**Dosen Pembimbing II: Dr. Syukri**

**PROGRAM SARJANA**

**DEPARTEMEN KIMIA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2024**

## INTISARI

### MODIFIKASI TEORITIK STRUKTUR ZAT WARNA TIPE D- $\pi$ -A BERBASIS DITIOFEN SEBAGAI *SENSITIZER* PADA SEL SURYA

Oleh:

**Reshiva (2010412005)**

**Dr. Imelda (Pembimbing I)**

**Dr. Syukri (Pembimbing II)**

Salah satu parameter kunci dalam mendesain *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) adalah *sensitizer* yang berperan penting dalam menyerap cahaya. Zat warna organik sangat cocok sebagai *sensitizer* karena sumber berlimpah, murah, dan ramah lingkungan, tetapi efisiensi serapan cahaya rendah sehingga perlu dilakukan modifikasi. Zat warna organik yang efisien untuk peralatan DSSC ialah zat warna tipe Donor- $\pi$  konjugasi-Akseptor (D- $\pi$ -A). Penelitian ini bertujuan untuk memodifikasi zat warna berbasis ditiofen dengan variasi rantai donor dan rantai akseptor yang efisien digunakan sebagai *sensitizer* serta menentukan pengaruh gugus pendorong dan penarik elektron terhadap serapan cahaya zat warna pada DSSC. Perhitungan menggunakan program Gaussian 16W dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent-DFT* (TD-DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G. Berdasarkan hasil penelitian diketahui bahwa modifikasi rantai donor, akseptor serta penambahan gugus pendorong dan penarik elektron mampu meningkatkan serapan cahaya ditiofen. Zat warna dengan variasi rantai donor indolin dan variasi rantai akseptor asam asetat dengan penambahan gugus pendorong elektron CH<sub>3</sub> dan gugus penarik -NO<sub>2</sub> merupakan zat warna terbaik untuk dijadikan sebagai *sensitizer* dengan nilai  $\Delta E$  1,0196 eV,  $\lambda_{\text{maks}}$  sebesar 1793,64 nm, energi eksitasi 0,6912 eV,  $\Delta G_{\text{inj}}$  0,2493 eV,  $\Delta G_{\text{reg}}$  0,1405 eV,  $V_{\text{OC}}$  0,0791 eV dan nilai  $\tau$  17863,37 ns. Dari hasil diketahui zat warna tersebut mampu menyerap cahaya sampai daerah infra merah yang artinya peralatan DSSC bisa dioperasikan dari siang sampai malam hari.

**Kata kunci:** Ditiofen, Tipe D- $\pi$ -A, DFT-TDDFT, DSSC

## ABSTRACT

### THEORETICAL MODIFICATION THE STRUCTURE OF DITHIOPHENE BASED D- $\pi$ -A TYPE DYES AS SENSITIZERS IN SOLAR CELLS

By:

**Reshiva (2010412005)**

**Dr. Imelda (First Advisor)**

**Dr. Syukri (Second Advisor)**

One of the key parameters in designing a Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) is the sensitizer which plays an important role in absorbing light. Organic dyes are very suitable as sensitizers because they are abundant, cheap, and environmentally friendly, but the efficiency of light absorption is low so modifications need to be made. Organic dyes that are efficient for DSSC equipment are Donor- $\pi$  conjugate-Acceptor (D- $\pi$ -A) type dyes. This study aims to modify dithiophene-based dyes with variations in donor chains and acceptor chains that are efficiently used as sensitizers and determine the effect of electron pushing and withdrawing groups on the light absorption of dyes on DSSCs. The calculation uses the Gaussian 16W program with the Density Functional Theory (DFT) and Time Dependent-DFT (TD-DFT) methods with the B3LYP/6-31G basis set. It is found that, it is known that modification of the donor chain, acceptor and the addition of electron pushing and withdrawing groups can increase the light absorption of dithiophene. The dye with indoline donor chain and acetic acid acceptor chain with the addition of CH<sub>3</sub> electron-pushing groups and -NO<sub>2</sub> withdrawing groups are the best dyes to be used as sensitizers with a  $\Delta E$  value of 1.0196 eV,  $\lambda_{\max}$  of 1793.64 nm, excitation energy of 0.6912 eV,  $\Delta G_{\text{inj}}$  0.2493 eV,  $\Delta G_{\text{reg}}$  0.1405 eV,  $V_{\text{oc}}$  0.0791 eV and  $\tau$  value of 17863.37 ns. It can be concluded that the dye is able to absorb light until the infrared region which means that the DSSC equipment can be operated to whole day.

**Keywords:** Dithiophene, D- $\pi$ -A type, DFT-TDDEFT, DSSCs