

**OPTIMALISASI STRUKTUR ZAT WARNA TIPE D- π -A BERBASIS DIPIROL
UNTUK MENINGKATKAN KINERJA SEL SURYA MENGGUNAKAN METODE
*DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)***

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

Ainur Rohmah

NIM : 2010412004



Dosen Pembimbing I : Dr. Imelda

Dosen Pembimbing II : Dr. Syukri

PROGRAM STUDI SARJANA

DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2024

INTISARI

OPTIMALISASI STRUKTUR ZAT WARNA TIPE D- π -A BERBASIS DIPIROL UNTUK MENINGKATKAN KINERJA SEL SURYA MENGGUNAKAN METODE DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

Oleh:

Ainur Rohmah (2010412004)

Dr. Imelda*, Dr. Syukri*

*Pembimbing

Zat warna berperan penting dalam *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) karena mampu menyerap foton sinar tampak dan menggunakan energi dari foton tersebut untuk transfer elektron. Pada penelitian ini digunakan zat warna organik tipe Donor-jembatan π -Akseptor (D- π -A) berbasis dipirol sebagai jembatan π dengan variasi rantai donor, akseptor, gugus pendorong dan penarik elektron. Optimalisasi zat warna direalisasikan dengan menggunakan software Gaussian 16 W dan dilakukan perhitungan dengan metode *Density Functional Theory/Time Dependent-DFT* (DFT/TD-DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G. Hasil penelitian menunjukkan bahwa dengan memodifikasi struktur zat warna mampu meningkatkan serapan cahaya dipirol. Zat warna A4D2P merupakan *sensitizer* terbaik dengan nilai *bandgap* sebesar 2,1910 eV dan panjang gelombang sebesar 2745,42 nm dengan nilai E_{eksitasi} , momen dipol, V_{OC} , ΔG_{inject} , ΔG_{reg} berturut-turut sebesar 0,4516 eV, 9,5473 d, 1,3173 eV, 0,4267 eV, 0,0783 eV. Hal ini menandakan bahwa zat warna A4D2P mampu menyerap sinar hingga ke rentang inframerah, hal ini memungkinkan perangkat DSSC dapat beroperasi sepanjang hari yaitu dari pagi hingga malam hari.

Kata kunci: DSSC, dipirol, D- π -A, DFT, zat warna organik

ABSTRACT

STRUCTURE OPTIMIZATION OF DIPYRROLE-BASED D- π -A TYPE DYES TO IMPROVE SOLAR CELL PERFORMANCE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD

By:

Ainur Rohmah (2010412004)

Dr. Imelda*, Dr. Syukri*

***Supervisor**

Dyes play an important role in Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) because they are able to absorb visible light photons and use the energy of these photons for electron transfer. In this study, organic dyes of the Donor-bridge π -Acceptor (D- π -A) type based on dipyrrole as a π bridge with variations in the donor chain, acceptor, pushing and pulling groups of electrons were used. Optimization of the dye was realized by using Gaussian 16 W software and calculations were performed by Density Functional Theory/Time Dependent-DFT (DFT/TD-DFT) method with B3LYP/6-31G basis set. The results showed that modifying the dye structure can increase the light absorption of dipyrrole. A4D2P dye is the best sensitizer with a bandgap value of 2.1910 eV and a wavelength of 2745.42 nm with excitation, dipole moment, V_{OC} , ΔG_{inject} , ΔG_{reg} values of 0.4516 eV, 9.5473 d, 1.3173 eV, 0.4267 eV, 0.0783 eV respectively. This indicates that the A4D2P dye is able to absorb light up to the infrared range, this allows the DSSC device to operate throughout the day from morning to night.

Keywords: DSSC, dipyrrole, D- π -A, DFT, organic dye

