

**MODIFIKASI ZAT WARNA KERANGKA SIANIDIN UNTUK  
MENINGKATKAN PERFORMA *DYE SENSITIZED SOLAR CELLS*  
(DSSCs) MENGGUNAKAN METODE DFT**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**OLEH:**

**NOFITRI UTAMI  
BP 1510412034**



**PROGRAM STUDI SARJANA  
JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2019**

## INTISARI

### MODIFIKASI ZAT WARNA KERANGKA SIANIDIN UNTUK MENINGKATKAN PERFORMA *DYE SENSITIZED SOLAR CELLS* (DSSCs) MENGGUNAKAN METODE DFT

Nofitri Utami (1510412034)  
Imelda, M.Si\*, Prof. Dr. Emriadi\*

\*Pembimbing

*Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs) 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 modifikasi terhadap rantai donor, 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 metode DFT dengan basis set B3LYP/6-31G. Hasil penelitian menunjukkan pada variasi  $\pi$  zat warna 3 memiliki *band gap* yang kecil sebesar 1,5344 eV dan memiliki panjang gelombang eksitasi sebesar 809,7 nm. Pada variasi rantai donor zat warna 10 memiliki *band gap* lebih kecil sebesar 1,1153 eV, panjang gelombang eksitasi 1114,0 nm dan LHE total yaitu 0,9523. Adanya gugus pendorong  $C_4H_5$  pada zat warna 12 menghasilkan *band gap* sebesar 1,0204 eV, lebih kecil dibandingkan zat warna tanpa gugus pendorong elektron. Sedangkan adanya gugus penarik  $NO_2$  pada zat warna 15 menghasilkan *band gap* sebesar 1,1105 eV, lebih kecil dibandingkan zat warna tanpa gugus penarik elektron. Zat warna 17 merupakan penambahan kombinasi antara gugus pendorong dan gugus penarik elektron menghasilkan *band gap* paling kecil sebesar 0,8873 eV. 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 17 merupakan salah satu zat warna organik yang potensial digunakan sebagai sensitizer pada DSSCs.

**Kata kunci:** sianidin, zat warna tipe D- $\pi$ -A, DFT, DSSCs

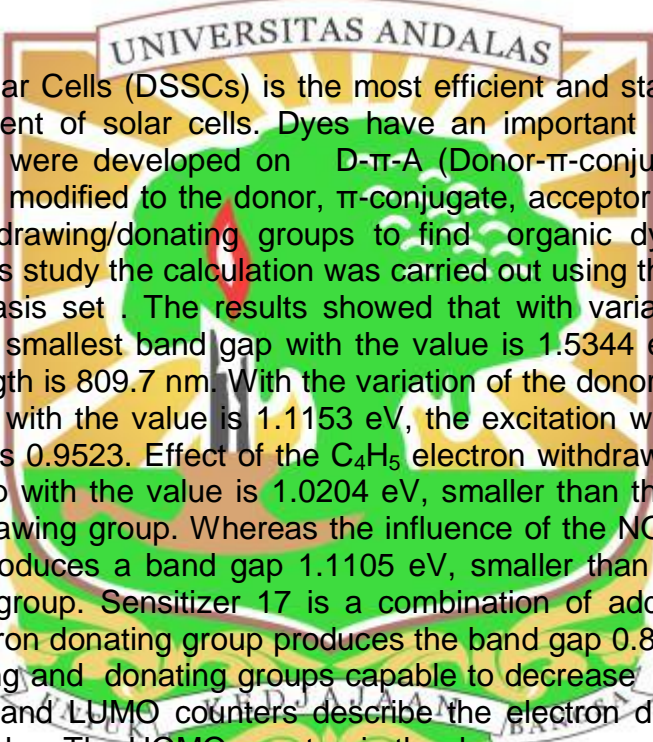
## ABSTRACT

### MODIFICATION OF CYANIDIN BASED DYES TO IMPROVE THE PERFORMANCE OF DYE SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs) USING DFT METHOD

By:

Nofitri Utami (1510412034)  
Imelda, M.Si\*, Prof. Dr. Emriadi\*

\*Supervisor



Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs) is the most efficient and stable solar cell along with the development of solar cells. Dyes have an important role in DSSCs and recently researches were developed on D- $\pi$ -A (Donor- $\pi$ -conjugate-acceptor) type dyes. Dyes can be modified to the donor,  $\pi$ -conjugate, acceptor chain and addition of electron withdrawing/donating groups to find organic dye that potential to absorb light. In this study the calculation was carried out using the DFT method with a B3LYP/6-31G basis set. The results showed that with variation of  $\pi$ -conjugate chain dye 3 has a smallest band gap with the value is 1.5344 eV and the value of excitation wavelength is 809.7 nm. With the variation of the donor chain dye 10 has a smallest band gap with the value is 1.1153 eV, the excitation wavelength is 1114.0 nm and total LHE is 0.9523. Effect of the  $C_4H_5$  electron withdrawing group on dye 6 decrease band gap with the value is 1.0204 eV, smaller than the sensitizer without the electron withdrawing group. Whereas the influence of the  $NO_2$  electron donating group on dye 6 produces a band gap 1.1105 eV, smaller than the dye without an electron donating group. Sensitizer 17 is a combination of addition a withdrawing group and an electron donating group produces the band gap 0.8873 eV. Addition of electron withdrawing and donating groups capable to decrease the band gap of the dye. The HOMO and LUMO counters describe the electron density that found in organic dye molecules. The HOMO counter in the donor area and the LUMO counter in the acceptor area. Based on the results of this study, it can be concluded that dyes 17 is more potential as sensitizers in DSSCs.

**Keywords:** cyanidin, D- $\pi$ -A type dye, DFT, DSSCs