

**MODIFIKASI TEORITIK STRUKTUR JEMBATAN  $\pi$  ZAT WARNA TIPE D- $\pi$ -A  
SEBAGAI *SENSITIZER* PADA SEL SURYA BERBASIS FENOL DAN DIFENILAMIN  
MENGUNAKAN METODE DFT**

**TESIS**



**OLEH:**

**RESIN PUTRA TEJA KUSUMA**

**NIM: 2220412008**

**PROGRAM MAGISTER**

**DEPARTEMEN KIMIA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2024**

## Modifikasi Teoritik Struktur Jembatan $\pi$ Zat Warna Tipe D- $\pi$ -A sebagai *Sensitizer* pada Sel Surya Berbasis Fenol dan Difenilamin Menggunakan Metode DFT

Oleh: Resin Putra Teja Kusuma (2220412008)

(Di bawah bimbingan: Dr. Imelda, M.Si dan Prof. Dr. Suryati, M.Si)

### Abstrak

*Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs) merupakan teknologi sel surya generasi ketiga yang menjanjikan karena biaya produksinya yang lebih murah. Pemeka cahaya (*sensitizer*) yang digunakan dalam DSSC yaitu zat warna organik dan anorganik. Zat warna organik memiliki keunggulan diantaranya: ramah lingkungan, sumber berlimpah, dan biaya produksi murah, tetapi memiliki efisiensi serapan cahaya yang rendah sehingga perlu dimodifikasi. Penelitian ini bertujuan untuk memodifikasi zat warna tipe D- $\pi$ -A (Donor- $\pi$  konyugasi- Akseptor) berbasis fenol dan difenilamin dengan variasi jembatan  $\pi$  yang efisien sebagai *sensitizer* pada DSSC dan menentukan pengaruh gugus pendorong dan gugus penarik elektron terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna. Metode perhitungan yang digunakan yaitu metode *Density Functional Theory/Time Dependent-DFT* (DFT/TD-DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G menggunakan *software* Gaussian 16W. Analisis berdasarkan parameter nilai *bandgap*, serapan panjang gelombang cahaya, energi eksitasi,  $\Delta G_{\text{inject}}$ ,  $\Delta G_{\text{reg}}$ , *oscillator strength* (f), sudut dihedral, panjang ikatan, momen dipol, *Light Harvesting Efficiency* (LHE) dan *open circuit voltage* (Voc). Hasil penelitian menunjukkan zat warna PD1-D $\pi$ 1 dengan nama (2E,4E)-5-((2-aminophenyl)(phenyl)amino)penta-2,4-dienoic acid merupakan zat warna terbaik dengan nilai *bandgap* sebesar 1,1758 elektron volt (eV), serapan panjang gelombang cahaya sebesar 2616,90 nm, energi eksitasi sebesar 0,4738 eV,  $\Delta G_{\text{inject}}$  -0,3018 eV,  $\Delta G_{\text{reg}}$  -0,6280 eV, dan Voc 1,0038 eV. Oleh karena itu, dapat disimpulkan bahwa modifikasi zat warna fenol dan difenilamin menjadi tipe D- $\pi$ -A mampu meningkatkan kinerja dari DSSC.

**Kata Kunci:** Zat Warna, Fenol, Difenilamin, Tipe D- $\pi$ -A, DFT, DSSC