

**DESAIN *IN SILICO* SENSITIZER BERBASIS PIRIMIDIN UNTUK
MENINGKATKAN EFISIENSI *DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS***

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

AULIA SYIFA

NIM: 2210412014



Dosen Pembimbing I: Dr. Imelda, M.Si

Dosen Pembimbing II: Prof. Dr. Emriadi M.S

**PROGRAM SARJANA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2026**

INTISARI

DESAIN *IN SILICO* SENSITIZER BERBASIS PIRIMIDIN UNTUK MENINGKATKAN EFISIENSI DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

Oleh:

Aulia Syifa (NIM: 2210412014)
Dr. Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Emriadi, MS*
*Pembimbing

Kebutuhan akan sumber energi terbarukan mendorong pengembangan *Dye-Sensitized Solar Cells* (DSSC) sebagai teknologi konversi energi surya yang efisien dan ekonomis. Kinerja DSSC sangat dipengaruhi oleh *sensitizer* yang digunakan, sehingga diperlukan pengembangan zat warna organik dengan kemampuan penyerapan cahaya dan transfer elektron yang lebih baik. Penelitian ini dilakukan untuk mengevaluasi pengaruh variasi rantai π_2 , rantai donor serta penambahan gugus pendorong dan penarik elektron pada zat warna organik berbasis pirimidin tipe D- π - π -A. Analisis dilakukan secara komputasi dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TD-DFT). Hasil perhitungan menunjukkan bahwa modifikasi struktur memengaruhi distribusi elektron, energi eksitasi, kemampuan penyerapan cahaya, serta interaksi zat warna dengan TiO_2 . Molekul D1W2 memberikan karakteristik paling optimal dengan nilai *bandgap* terendah sebesar 1,4751 eV, energi eksitasi sebesar 1,4891 eV, dan panjang gelombang maksimum sebesar 1042,64 nm. Parameter fotovoltaiik yang diperoleh meliputi ΔG_{inj} sebesar -0,3339 eV, ΔG_{reg} sebesar 0,3552 eV, dan V_{oc} sebesar 0,3199 eV. Selain itu, D1W2 memiliki interaksi yang stabil dan spontan dengan permukaan TiO_2 anatase, dengan energi ikatan sebesar -3247,00 kJ/mol. Dengan demikian, modifikasi zat warna berbasis pirimidin tipe D- π - π -A berpotensi meningkatkan kinerja DSSC, dengan D1W2 berpotensi digunakan sebagai *sensitizer* unggul untuk meningkatkan efisiensi DSSC.

Kata kunci: Zat warna, Kimia Komputasi, D- π - π -A, DFT, TD-DFT



ABSTRACT

IN SILICO DESIGN OF PYRIMIDINE-BASED SENSITIZERS TO ENHANCE THE DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS EFFICIENCY

By:

Aulia Syifa (NIM: 2210412014)
Dr. Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Emriadi, MS*
*Supervisor

The increasing demand for renewable energy sources has driven the development of Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) as an efficient and cost-effective solar energy conversion technology. The performance of DSSC is significantly influenced by the sensitizer used; therefore, there is a need to develop organic dyes with improved light absorption and electron transfer capabilities. This study was conducted to evaluate the influence of variations in the π_2 chain, the donor chain, and the addition of electron-donating and electron-withdrawing groups on D- π - π -A-type pyrimidine-based organic dyes. The analysis was conducted computationally using Density Functional Theory (DFT) and Time-Dependent Density Functional Theory (TD-DFT). The calculation results show that structural modifications affect electron distribution, excitation energy, light absorption capability, and the interaction of the dye with TiO_2 . The D1W2 molecule exhibits the most optimal characteristics with the lowest bandgap value of 1.4751 eV, an excitation energy of 1.4891 eV, and a maximum wavelength of 1042.64 nm. The obtained photovoltaic parameters include ΔG_{inj} of -0.3339 eV, ΔG_{reg} of 0.3552 eV, and V_{oc} of 0.3199 eV. In addition, D1W2 exhibits stable and spontaneous interactions with the anatase TiO_2 surface, with an adsorption energy of -3247.00 kJ/mol. Therefore, the modification of D- π - π -A-type pyrimidine-based dyes has the potential to enhance the performance of DSSCs, with D1W2 showing potential as a preferred sensitizer for improving DSSC efficiency.

Keywords: Dyes, Computational Chemistry, D- π - π -A, DFT, TD-DFT

