

**STUDI KOMPUTASI MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA
TRIFENILAMIN UNTUK MENINGKATKAN EFISIENSI *DYE*
SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs)**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

OLEH:

HONESTI PUTRI

BP 1610412039



PEMBIMBING I : IMELDA, M.Si.

PEMBIMBING II : PROF. Dr. HERMANSYAH AZIZ

**PROGRAM STUDI SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2020**

**STUDI KOMPUTASI MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA
TRIFENILAMIN UNTUK MENINGKATKAN EFISIENSI *DYE*
SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs)**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

OLEH:

HONESTI PUTRI

BP 1610412039



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas

**PROGRAM STUDI SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2020**

INTISARI

STUDI KOMPUTASI MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA TRIFENILAMIN UNTUK MENINGKATKAN EFISIENSI *DYE SENSITIZED SOLAR Cells* (DSSCs)

Oleh:

Honesti Putri (BP: 1610412039)

Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Hermansyah Aziz*

*Pembimbing

Dye sensitized solar cells (DSSCs) merupakan jenis sel surya yang menjadi terobosan baru dalam pembuatan sel surya yang murah dengan kinerja tinggi. *Sensitizer* berperan penting dalam meningkatkan efisiensi penyerapan cahaya pada DSSCs. *Sensitizer* yang digunakan adalah zat warna organik dan anorganik. Zat warna organik biasanya tersedia melimpah di alam, ramah lingkungan, biaya produksi yang cukup murah, namun memiliki efisiensi serapan cahaya yang relatif rendah. Oleh karena itu, untuk meningkatkan efisiensi serapan cahaya maka diperlukan modifikasi zat warna organik. Dalam penelitian ini dilakukan studi komputasi modifikasi zat warna organik dengan struktur tipe D-A (Donor-Akseptor) dan D- π -A (Donor- π konjugasi-Akseptor). Zat warna organik trifenilamin digunakan sebagai rantai donor yang dimodifikasi dengan cara memvariasikan rantai akseptor. Variasi rantai akseptor pada tipe D-A yang digunakan yaitu Piridin, Pirimidin, Purin dan Kuinolin. Sedangkan variasi rantai akseptor yang digunakan pada tipe D- π -A adalah Asam Benzoat, Asam Asetat, Asam Format dan Asam Sianoakrilik. Selanjutnya dilakukan optimasi dengan menambahkan gugus pendorong yaitu $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}=\text{CH}_2$, dan $-\text{NH}_2$ dan gugus penarik $-\text{OH}$, $-\text{CN}$, $-\text{NO}_2$. Struktur molekul tersebut digambarkan menggunakan software *GaussView* 6.0.16 dan dihitung menggunakan paket *software Gaussian*'16W dengan metode DFT/TDDFT serta basis set B3LYP/6-31G. Hasil perhitungan pada zat warna tipe D-A menunjukkan bahwa *dye* 3 dengan rantai akseptor purin memiliki *bandgap* yang paling kecil dan serapan cahaya yang paling besar. Sedangkan perhitungan pada zat warna tipe D- π -A menunjukkan bahwa *dye* 6 dengan rantai akseptor asam asetat memiliki *bandgap* yang paling kecil dan serapan cahaya yang paling besar. Adanya penambahan gugus pendorong maupun penarik elektron tidak mampu menurunkan *bandgap* dari zat warna tipe D- π -A. Jadi, kesimpulannya bahwa struktur zat warna organik dengan rantai donor trifenilamin, π konjugasi purin, rantai akseptor Asam Asetat merupakan struktur zat warna paling efisien yang dapat meningkatkan efisiensi serapan cahaya pada DSSCs.

Kata kunci: Trifenilamin, D-A, D- π -A, DFT/TDDFT, DSSCs

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF MODIFICATION STRUCTURE OF TRIPHENYLAMINE DYE TO IMPROVE EFFECIENCY DYE SENSITIZED SOLAR CELL EFFICIENCY

By:

Honesti Putri (BP: 1610412039)

Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Hermansyah Aziz*

*Supervisor

Dye sensitized solar cells (DSSCs) is a type of solar cell that is a new breakthrough in the manufacture of low-cost, high-performance solar cells. Sensitizers play an important role in increasing the efficiency of light absorption in DSSCs. The sensitizers used are organic and inorganic dyes. Organic dyes are usually available in abundance in nature, are environmentally friendly, production costs are quite cheap, but have a relatively low light absorption efficiency. Therefore, to increase the efficiency of light absorption it is necessary to modify the organic dye. In this study, organic dyes were modified with the D-A (Donor-Acceptor) and D- π -A (Donor- π -Acceptor) type structures. The organic dye triphenylamine was used as a modified donor chain by varying the acceptor chain. The variation of the acceptor chain on the D-A type used is pyridine, pyrimidine, purine and quinoline. Meanwhile, the acceptor chain variations used in the D- π -A type are benzoic acid, acetic acid, formic acid and cyanoacrylic acid. Then the optimization is carried out by adding the push groups, namely -CH₃, -CH = CH₂, and -NH₂ and the -OH, -CN, -NO₂ pull groups. The molecular structure was described using GaussView 6.0.16 software and calculated using the Gaussian'16W software package with the DFT / TDDFT method and the B3LYP / 6-31G base set. The results of calculations on D-A type dye show that dye 3 with the purine acceptor chain has the smallest bandgap and the greatest light absorption. Meanwhile, the calculation of the D- π -A dye shows that dye 6 with the acetic acid acceptor chain has the smallest bandgap and the greatest light absorption. The addition of an electron-attracting and pushing group was unable to reduce the bandgap of the D- π -A type dye. So, the conclusion is that the structure of the organic dye with the triphenylamine donor chain, π conjugate purine, and the acetic acid acceptor chain is the most efficient dye structure that can increase the efficiency of light absorption in DSSCs.

Keywords: Triphenylamine, D-A, D- π -A, DFT/TDDFT, DSSCs