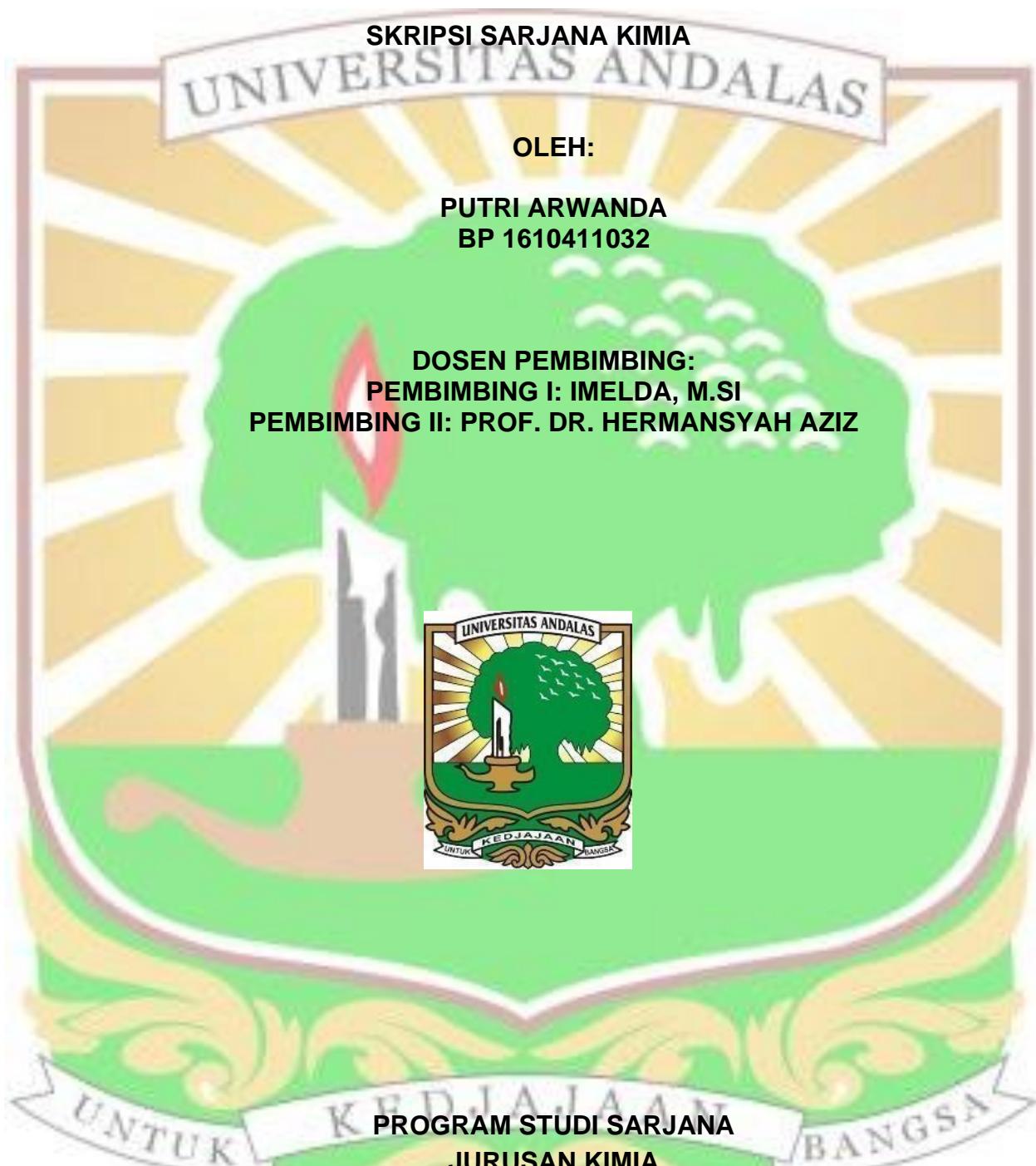


**STUDI KOMPUTASI MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA TIPE  
D- π -A BERBASIS INDOLIN UNTUK MENINGKATKAN KINERJA DYE-SENSITIZED  
SOLAR CELLS (DSSCs)**



**INTISARI**

**Studi Komputasi Modifikasi Struktur Zat Warna Tipe D- -A Berbasis Indolin untuk  
Meningkatkan Kinerja *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs)**

Oleh:

**Putri Arwanda (1610411032)**

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

**\*Pembimbing**

Pada *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs) terdapat *sensitizer* yang berperan penting dalam efisiensi penyerapan cahaya. *Sensitizer* yang biasa digunakan adalah zat warna organik dan anorganik. Zat warna organik tersedia melimpah di alam, biaya produksi relatif murah, ramah lingkungan, namun efisiensi serapan cahaya masih rendah. Oleh karena itu, untuk meningkatkan efisiensi serapan cahaya maka diperlukan modifikasi struktur zat warna organik. Zat warna modifikasi yang berkembang adalah zat warna organik tipe D-π-A. yang terdiri dari rantai donor elektron, rantai π-konjugasi dan akseptor elektron. Dalam penelitian ini dianalisa zat warna berbasis Indolin yang didesain sebagai rantai donor, piridin, kuinolin, pirimidin, purin, isokuinolin sebagai rantai π-konjugasi, asam asetat, asam benzoat, asam kloroasetat, asam sianoakrilik, asam format sebagai rantai akseptor. Pada zat warna terbaik kemudian ditambahkan gugus pendorong elektron C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, CH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub> dan gugus penarik elektron Cl, NO<sub>2</sub>, OH. Molekul digambarkan menggunakan jendela Gauss View 6.0 dan dioptimasi menggunakan paket Gaussian 16W dengan metode DFT/TDDFT dan basis set B3LYP/6-31G. Berdasarkan hasil perhitungan nilai bandgap,  $\lambda$ , energi eksitasi, LHE, Voc maka diprediksi zat warna 6 dengan rantai donor indolin, rantai π-konjugasi purin dan rantai akseptor asam asetat menghasilkan efisiensi serapan cahaya yang lebih besar sehingga menghasilkan efisiensi daya DSSCs yang lebih besar juga. Adanya gugus pendorong NH<sub>2</sub> pada zat warna 6 menghasilkan *bandgap* sebesar 0,7543 eV lebih kecil dibandingkan gugus pendorong elektron lainnya. Sedangkan adanya gugus penarik NO<sub>2</sub> pada zat warna 6 menghasilkan *bandgap* lebih kecil sebesar 0,1836 eV dibandingkan gugus penarik elektron lainnya. Dapat disimpulkan bahwa penambahan gugus pendorong maupun penarik elektron mampu meningkatkan efisiensi daya DSSCs

**Kata kunci:** Indolin, DFT/TDDFT, *Sensitizer*, zat warna, DSSCs

## ABSTRACT

### Computational Study on The Modification of Indolin-Based Dye Sensitizer D-π-A Type for Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs)

By:

Putri Arwanda (1610411032)

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

\*Supervisor

Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs) have sensitizers that play an important role in light absorption. The sensitizers that are commonly used are organic and inorganic dyes. Organic dyes are abundant in nature, relatively cheap production costs, environmentally friendly, but the efficiency of light absorption is still low. Therefore, to increase the efficiency of light absorption, it is necessary to modify the structure of the organic dyes. The modified dye that develops is an organic substance of type D-π-A. consisting of a donor electron chain, a π-conjugate chain and an electron acceptor. This study analyzed indoline based-dyes which are designed as donor chains and pyridine, quinoline, pyrimidine, purine, isoquinoline as a π-conjugate chains as well as acetic acid, benzoic acid, chloroacetic acid, cyanoacrylic acid, formic acid as acceptor chains. The best dye is added to the electron donating group (EDG) i.e C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, CH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub> and electron withdrawing groups (EWG) i.e Cl, NO<sub>2</sub>, OH. Molecules were described using the Gauss View 6.0 and optimized using the Gaussian 16W package with the DFT / TDDFT method and the B3LYP / 6-31G basis set. Based on the calculation of the bandgap value,  $\lambda$ , excitation energy, LHE, Voc, it is predicted that dye 6 with the indoline donor chain, the π-conjugate purine chain and the acetic acid acceptor chain produce greater light absorption efficiency resulting in greater efficiency of DSSCs power as well. The presence of the NH<sub>2</sub> in dye 6 results a bandgap of 0.7543 eV smaller than the other electron donating groups. Whereas the presence of the NO<sub>2</sub> in dye 6 results bandgap of 0.1836 eV smaller compared to other electron-withdrawing groups. It can be excluded that the addition of both the EDG and EWG can improve the power efficiency of DSSCs.

**Keywords:** Indolin, DFT / TDDFT, Sensitizer, dyes, DSSCs