

**STUDI TEORITIK STRUKTUR ZAT WARNA ANTOSIANIN UNTUK  
MENINGKATKAN PERFORMA *DYE SENSITIZED SOLAR CELLS*  
(DSSCs)**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**OLEH :  
JUSMARNI**

**BP: 1610412067**



**PEMBIMBING I : Prof. Dr. Hermansyah Aziz**

**PEMBIMBING II : Imelda, M.Si**

**PROGRAM STUDI SARJANA  
JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2021**

## INTISARI

### STUDI TEORITIK STRUKTUR ZAT WARNA ANTOSIANIN UNTUK MENINGKATKAN PERFORMA *DYE SENSITIZED SOLAR CELLS* (DSSCs)

Oleh:

Jusmarni (BP: 1610412067)  
Prof. Dr. Hermansyah Aziz\*, Imelda, M.Si\*  
\*Pembimbing

Sensitizer berperan penting dalam efisiensi penyerapan cahaya pada *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs). Sensitizer yang bisa digunakan adalah zat warna organik dan anorganik. Zat warna organik tersedia melimpah di alam, ramah lingkungan, biaya produksi relatif murah, namun efisiensi serapan cahaya masih rendah. Oleh karena itu, untuk meningkatkan efisiensi serapan cahaya maka diperlukan modifikasi zat warna organik. Dalam penelitian ini zat warna antosianin telah didesain dengan 2 cara yaitu tanpa modifikasi serta modifikasi dengan penambahan rantai donor dan rantai  $\pi$  sehingga membentuk struktur zat warna tipe D- $\pi$ -A. Zat warna antosianin yang digunakan yaitu delphinidin, sianidin, pelargonidin, malvidin, petunidin, dan fragarin. Sedangkan molekul yang dimodifikasi merupakan kombinasi zat warna antosianin sebagai rantai akseptor, kumarin sebagai rantai donor serta 1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrrole sebagai rantai  $\pi$ -konjugasi. Struktur molekul tersebut dihitung menggunakan paket *Software Gaussian* 16W dengan metode DFT serta basis set B3LYP/6-31G. Hasil perhitungan pada zat warna tanpa modifikasi menunjukkan bahwa zat warna malvidin menghasilkan *bandgap* paling kecil sebesar 2,4085 eV dan serapan cahaya yang paling besar. Sedangkan dari hasil perhitungan zat warna yang dimodifikasi menunjukkan bahwa zat warna modifikasi dengan akseptor delphinidin menghasilkan *bandgap* paling kecil sebesar 1,4485 eV dan serapan cahaya yang paling besar. Kesimpulannya zat warna antosianin yang dimodifikasi dapat meningkatkan efisiensi serapan cahaya pada DSSCs.

**Kata kunci:** Antosianin, DFT, DSSCs

## ABSTRACT

### THEORETICAL STUDY OF ANTHOCYANIN DYES STRUCTURE TO IMPROVE THE PERFORMANCE OF DYE SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs)

By:

Jusmarni (BP: 1610412067)  
Prof. Dr. Hermansyah Aziz\*, Imelda, M.Si\*  
\*Supervisor

Sensitizer plays an important role in the efficiency of light absorption on Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs). Sensitizer that can be used are organic and inorganic dyes. Organic dyes are abundant in nature, environmentally friendly, relatively low production costs, but low efficiency light absorption. Therefore, to improve the efficiency of light absorption, structure modification of organic dyes is needed. In this research, anthocyanin dyes have been designed in 2 ways namely without modification and modification by the addition of donor chains and  $\pi$  chains to form the structure of D- $\pi$ -A dye type. The anthocyanin dyes used are delphinidin, cyanidin, pelargonidin, malvidin, petunidin, and fragarin. While the modified molecule is a combination of anthocyanin dyes as a acceptor chain, coumarin as a donor chain and 1,4-dihydro-pyrrolo[3,2-b]pyrrole as a  $\pi$  conjugate chain. The molecular structure is conceived using Gaussian' 16W Software with DFT method and B3LYP/6-31G basis set. The resulting calculations of the non modified dyes show that malvidin dye with the smallest bandgap of 2.4085 eV and the greatest light absorption. While for the calculations on modified dyes show that modification dye with delphinidin acceptor is the smallest bandgap of 1.4485 eV and the greatest light absorption. The main conclusion is that for the modified anthocyanin dye can produce a significant increase in the efficiency of DSSCs.

**Keywords:** Anthocyanin, DFT, DSSCs