

**STUDI TEORITIK MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA  
BERBASIS ANILIN UNTUK MENINGKATKAN EFESIENSI *DYE*  
*SENSITIZED SOLAR CELLs* (DSSCs)**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh**

**ARXHEL SEPTINO FARIL NANDA**

**NIM. 1710413024**



**Pembimbing I : Imelda, M.Si**

**Pembimbing II : Prof.Dr.Hermansyah Aziz**

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG**

**2021**

## INTISARI

### STUDI TEORITIK MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS ANILIN UNTUK MENINGKATKAN EFISIENSI *DYE SENSITIZED SOLAR* *CELL*(DSSCs)

Oleh:

Arxhel Septino Faril Nanda (BP: 1710413024)

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

\*Pembimbing

*Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs) merupakan teknologi sel surya generasi ketiga yang menjanjikan karena biaya produksinya murah. Pemeka cahaya (*sensitizer*) yang digunakan dalam DSSCs 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. Pada penelitian ini digunakan zat warna organik tipe D- $\pi$ -A berbasis anilin. Zat warna yang diteliti terdiri dari 15 zat warna dengan variasi rantai  $\pi$  konjugasi, akseptor, gugus pendorong dan penarik elektron. Metode perhitungan yang digunakan yaitu metode DFT/TD-DFT dengan basis set B3LYP/6-31G. Penelitian bertujuan untuk menentukan modifikasi zat warna tipe D- $\pi$ -A berbasis anilin dengan variasi rantai  $\pi$  konjugasi dan variasi rantai akseptor yang efisien sebagai sensitizer pada DSSCs dan menentukan pengaruh gugus pendorong dan gugus penarik elektron terhadap efisiensi penyerapan cahaya DSSCs. Berdasarkan parameter nilai *bandgap*, serapan panjang gelombang cahaya, energi eksitasi,  $\Delta G^{\text{inje}}$ , *oscillator strength*, sudut dihedral, panjang ikatan, momen dipol, LHE dan  $V_{oc}$  didapatkan hasil penelitian menunjukkan zat warna 11 dengan (2E) -3-[8-(3,4,5-triaminophenyl) -9H-purine-2-yl] N, N-dioxoprop-2-enamide merupakan zat warna terbaik dengan nilai *bandgap* sebesar 1,1127 eV, serapan panjang gelombang cahaya sebesar 1304,33 nm, energi eksitasi sebesar 0,9506 eV,  $\Delta G^{\text{inje}}$  -2,1868 eV,  $\Delta G^{\text{reg}}$  0,2741 eV. Oleh karena itu, dapat disimpulkan bahwa modifikasi zat warna anilin menjadi tipe D- $\pi$ -A mampu meningkatkan kinerja dari DSSCs.

**Kata kunci:** Anilin, zat warna organik, tipe D- $\pi$ -A, DFT, DSSCs

## ABSTRACT

### THEORETICAL STUDY OF STRUCTURE MODIFICATION ANILINE BASED DYE TO IMPROVE THE EFFICIENCY OF DYE SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs)

By:

Arxhel Septino Faril Nanda (BP: 1710413024)

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

\*Supervisor

*Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs) is a third generation solar cell technology that is promising due to its low production costs. The light *sensitizers* used in DSSCs are organic and inorganic dyes. Organic dyes have advantages including: environmentally friendly, abundant sources and cheap production costs, but have a low light absorption efficiency so that it need to be modified. In this study, aniline-based D- $\pi$ -A organic dye was used. The dyes studied consisted of 15 dyes with variations of  $\pi$  conjugation, acceptor, electron donating groups and electron withdrawing groups. The calculation method used is the DFT/TD-DFT method with a B3LYP / 6-31G basis set. The aim of this study was to determine the modification of the aniline-based D- $\pi$ -A dye with variations of the  $\pi$  conjugate chains, and acceptor chains variations are efficient as a sensitizer on DSSCs and determine the effect of electron donating groups and electron withdrawing groups on the efficiency of light absorption of DSSCs. Based on the parameters of the bandgap, wavelength absorption, excitation energy,  $\Delta G^{\text{inject}}$ , oscillator strength, dihedral angle, bond length, dipole moment, LHE and  $V_{\text{OC}}$ , the results showed the dye 11 with the name *(2E)-3-(8-(3,4,5-triaminophenyl)-9H-purine-2-yl] N, N-dioxoprop-2-enamide* is the best dye with a bandgap is 1.1127 eV, absorption wavelength is 1304.33 nm, excitation energy is 0.9506 eV,  $\Delta G^{\text{inject}}$  is -2.1868 eV,  $\Delta G^{\text{reg}}$  0,2741 eV. Therefore, it can be concluded that the modification of aniline dye to D- $\pi$ -A type can improve the performance of DSSCs.

**Keywords:** Aniline, D- $\pi$ -A type organic dye, DFT, DSSCs