

**MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA ORGANIK TIPE D- π -A BERBASIS
KUMARIN UNTUK MENINGKATKAN KINERJA SEL SURYA MENGGUNAKAN
METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

BRAMTAMA RAHMATTULLAH PUTRA AGADITYA

1710413004



Dosen Pembimbing I : Prof. Dr. Hermansyah Aziz

Dosen Pembimbing II : Imelda, M.Si

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

INTISARI

MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA ORGANIK TIPE D- π -A BERBASIS KUMARIN UNTUK MENINGKATKAN KINERJA SEL SURYA MENGGUNAKAN METODE DFT

Oleh:

Bramtama Rahmattullah Putra Agaditya

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

***Pembimbing**

Pada penelitian ini dirancang 15 zat warna organik tipe D- π -A (Donor- π -konjugasi-Akseptor) berbasis kumarin dengan variasi rantai π -konjugasi dan akseptor untuk melihat pengaruhnya terhadap sifat *fotocurrent* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC). Perhitungan dilakukan menggunakan program Gaussian 16W dengan metode perhitungan DFT/TD-DFT (*Density Functional Theory/Time Dependent-DFT*) dan basis set B3LYP/6-31G. Hasil penelitian yang didapatkan berupa data struktur geometri optimal, contour HOMO dan LUMO, *bandgap* (celah energi), sudut dihedral dan panjang ikatan, *Electrostatic Surface Potential* (ESP), Momen dipol, energi bebas gibbs injeksi (ΔG^{inject}), energi bebas gibbs regenerasi (ΔG^{reg}), spektrum absorpsi, serapan panjang gelombang (λ), nilai *Light Harvesting Efficiency* (LHE), *oscillator strength* (f), *rapat arus* (J_{sc}), serta tegangan (V_{oc}). Berdasarkan hasil penelitian didapatkan bahwa zat warna KA10 dengan variasi rantai π -konjugasi, akseptor dan pendorong memiliki efisiensi serapan cahaya yang paling baik yang ditunjukkan dengan nilai *bandgap* yang paling kecil yaitu 1,1885 eV, panjang gelombang terbesar yaitu 1.875,98 nm, nilai momen dipol yaitu 12,245 Debye dan nilai ΔG_{reg} yaitu 1,0734 eV. Maka dapat disimpulkan bahwa zat warna KA10 memiliki efisiensi konversi energi yang paling baik dan efisien meningkatkan kinerja DSSCs karena dapat menyerap cahaya dari siang hingga malam hari.

Kata kunci: DSSC, Zat warna, Tipe D- π -A, Kumarin, DFT/TD-DFT

ABSTRACT

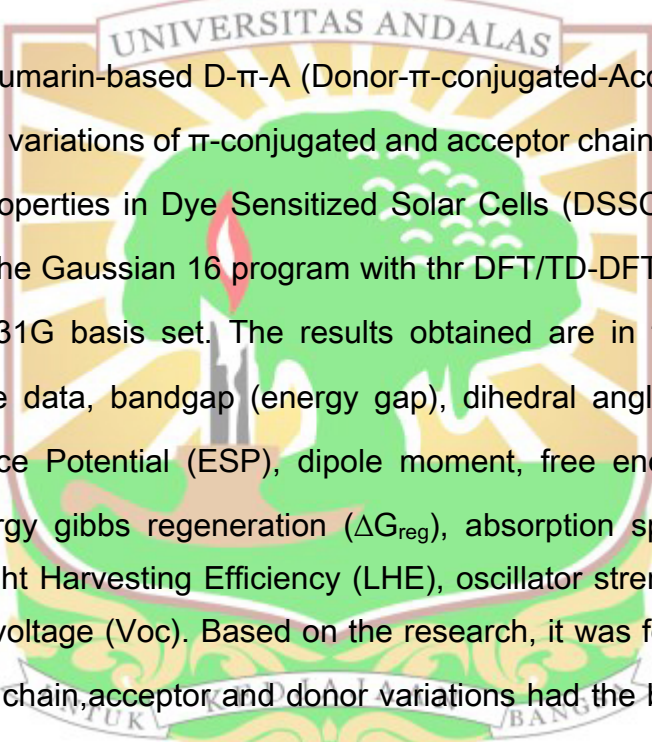
STRUCTURE MODIFICATION OF COUMARIN-BASED ORGANIC DYE D- π -A TYPE FOR INCREASE PERFORMANCE OF SOLAR CELLS USING DFT METHOD

By:

Bramtama Rahmattullah Putra Agaditya (1710413004)

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

***Supervisor**



In this study, 15 coumarin-based D- π -A (Donor- π -conjugated-Acceptor) organic dyes were designed with variations of π -conjugated and acceptor chains to see their effects on photocurrent properties in Dye Sensitized Solar Cells (DSSC). Calculations were performed using the Gaussian 16 program with the DFT/TD-DFT calculation method and the B3LYP/6-31G basis set. The results obtained are in the form of optimal geometric structure data, bandgap (energy gap), dihedral angle and bond length, Electrostatic Surface Potential (ESP), dipole moment, free energy gibbs injection (ΔG^{inject}), free energy gibbs regeneration (ΔG_{reg}), absorption spectrum, absorption wavelength (λ), Light Harvesting Efficiency (LHE), oscillator strength (f), *short circuit current* (J_{sc}), and voltage (V_{oc}). Based on the research, it was found that dye KA10 with π -conjugation chain, acceptor and donor variations had the best light absorption efficiency as indicated by producing the smallest bandgap value of 1,1885 eV, the largest wavelength of 1.875,98 nm, the dipole moment value of 12,245 Debye and the ΔG_{reg} value is 1,0734 eV. So it can be concluded that dye KA10 has the best energy conversion efficiency so that it can improve the performance of DSSCs and can be used from day to night.

Keywords: DSSC, Dyes, D- π -A, Coumarin, DFT/TD-DFT