

ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI SENYAWA *DYE* ORGANIK BERBASIS N-ETIL INDOL DAN INTERAKSINYA DENGAN $\text{Ti}(\text{OH})_2$

Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) merupakan energi alternatif yang sangat potensial digunakan mengingat jumlah energi matahari yang sampai ke bumi sangat besar. Kemampuan DSSC sangat bergantung pada *dye* yang digunakan. Oleh karena itu, pada penelitian ini akan dilakukan studi komputasi untuk menentukan struktur *dye* organik berbasis N-etil indol dan menghitung interaksinya dengan $\text{Ti}(\text{OH})_2$, kemudian menentukan sifat elektronik dari senyawa tersebut. Penggambaran senyawa dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Avogadro. Perhitungan komputasi pada penelitian ini dihitung menggunakan perangkat lunak Firefly, kemudian data yang diperoleh dianalisis menggunakan perangkat lunak Chemcraft, Gausssum dan Gabedit. Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, diketahui bahwa senyawa hipotesis setelah ditambah sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$ memiliki sifat elektronik yang lebih baik daripada sebelum senyawa tersebut ditambahkan sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$. Struktur *dye* organik N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen katekol dan N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen 4-metil katekol ditentukan dengan mengganti akseptor asam sianokrilik pada senyawa N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen asam sianokrilik dengan katekol dan 4-metil katekol kemudian dihubungkan dengan sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$. Sifat elektronik yang dihitung meliputi tingkatan energi elektronik, distribusi elektron HOMO/LUMO dan spektrum serapan UV-Vis. Spektrum serapan UV-Vis yang dihasilkan senyawa N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen katekol sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$ berada pada panjang gelombang 673,0512 nm dan senyawa N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen 4-metil katekol sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$ berada pada panjang gelombang 671,0302 nm. Distribusi elektron pada senyawa senyawa N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen katekol sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$ didominasi oleh eksitasi dari $\text{HOMO} \rightarrow \text{L}+2$ sebesar (81%) dan pada senyawa N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen 4-metil katekol sistem $\text{Ti}(\text{OH})_2$ didominasi oleh eksitasi dari $\text{HOMO} \rightarrow \text{L}+2$ (86%). Kemudian celah energi yang dihasilkan berturut-turut sebesar 1,2571 eV dan 1,2354 eV.

Kata Kunci: DSSC, *dye*, sifat elektronik, akseptor, asam sianokrilik, katekol, 4-metil katekol.

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI
SUNAN GUNUNG DJATI
BANDUNG

ABSTRACT

STUDY OF COMPUTATION OF ORGANIC COMPOUNDS DYE BASED N-ETHYL INDOLE AND ITS INTERACTION WITH $Ti(OH)_2$

Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) is a potential alternative energy use given the amount of solar energy that reaches the earth is very large. DSSC is very dependent on the ability of the dye used. Therefore, in this study will be conducted computational studies to determine the structure of organic dye-based N-ethyl indole and calculate its interaction with $Ti(OH)_2$, and then determine the electronic properties of these compounds. The depiction of the compound performed using software Avogadro. Computational calculations in this study was calculated using the software Firefly, then the data were analyzed using the software Chemcraft, Gausssum and Gabedit. Based on research that has been done, it is known that the compound hypotheses when added $Ti(OH)_2$ has a better electronic properties than before the compound was added $Ti(OH)_2$. The structure of the organic dye N-ethyl indole bi-3-n-hexylthiophene catechol and indole N-ethyl bi-3-n-hexylthiophene 4-methyl catechol determined by replacing the acceptor cyanoacrylic acid in the compound N-ethyl indole bi-3-n-hexylthiophene cyanoacrylic acid with catechol and 4-methyl catechol is then connected to the system $Ti(OH)_2$. Calculated electronic properties include electronic energy levels, electron distribution HOMO/LUMO and UV-Vis absorption spectrum. UV-Vis absorption spectrum of the resulting compound N-ethyl indole bi-3-n-hexylthiophene $Ti(OH)_2$ is at 673.0512 nm wavelength and compound N-ethyl indole bi-3-n-hexylthiophene 4-methyl catechol system $Ti(OH)_2$ is at 671.0302 nm wavelength. Distribution of electrons in the compound N-ethyl indole bi-3-n-hexylthiophene catechol $Ti(OH)_2$ is dominated by excitation from the $HOMO \rightarrow L+2$ by (81%) and the compound N-ethyl indole bi-3-n-hexylthiophene 4-methyl catechol system $Ti(OH)_2$ is dominated by excitation from the $HOMO \rightarrow L+2$ (86%). Then the resulting energy gap in a row at 1.2571 eV and 1.2354 eV.

Keywords: DSSC, dye, electronic properties, acceptor, cyanoacrylic acid, catechol, 4-methyl catechol.

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI
SUNAN GUNUNG DJATI
BANDUNG