

ABSTRAK

STUDI *AB-INITIO* SENYAWA ZAT WARNA *N*-ETIL INDOLIN TERMODIFIKASI DAN INTERAKSI ZAT WARNA Ti(OH)₂

Beberapa energi yang telah terbaharui disarankan sebagai energi alternatif untuk mengatasi krisis energi saat ini diantaranya sel surya. Pada penelitian senyawa *N*-etil indolin bi-3-n-heksiltiopen dengan akseptor asam sianokrilik yang dimana akan dimodifikasi pada bagian akseptor, dengan akseptor katekol, 4-Metil katekol dan katekol Ti(OH)₂. Pada penelitian ini dilakukan dua metode yaitu dengan menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan menggunakan perangkat lunak avogadro, firefly, chearmcraf, gabedit dan gausssum. Hasil perhitungan DFT menghasilkan data struktur geometri, panjang ikatan, perbandingan energi sedangkan pada perhitungan menggunakan metode TDDFT menghasilkan absorpsi UV-Vis, Distribusi HOMO/LUMO dan diagram energi HOMO/LUMO. Data panjang gelombang dari masing-masing akseptor: asam sianokrilik; 401,6301, katekol; 417,7797, 4-metil katekol; 393,0717 dan katekol Ti(OH)₂ dan data pita celah energi asam sianokrilik; 3,3633, katekol; 3,2572, 4-metil katekol; 3,4422 dan katekol Ti(OH)₂; 1,2408. Dari keempat akseptor yang baik digunakan zat warna yaitu pada akseptor katekol karena memiliki panjang gelombang dan nilai pita celah energi kecil.

Kata Kunci : sel surya; metode DFT dan TDDFT; perangkat lunak; zat warna.

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI
SUNAN GUNUNG DJATI
BANDUNG

ABSTRACT

STUDI AB-INITIO SENYAWA ZAT WARNA DYE N-ETHYL INDOLINE TERMODIFIKASI DAN INTERAKSI DYE Ti(OH)₂

Some renewable energy is suggested as an alternative energy to overcome the current energy crisis including solar cells. On compound studies N-Ethyl Indoline bi-3-n-hexylthiophenes with acceptor cyanoacrylic acid which will be modified on the part acceptor, with acceptor catechol, 4-methyl catechol and catechol Ti(OH)₂. In this research, two methods are used that is method DFT and TDDFT by using the software avogadro, firefly, chemcraft, gedit dan gausssum. The calculation results DFT produce data structure geometry, length of bond and energy ratio, while on the method TDDFT produce data absorption UV-Vis, distribution HOMO/LUMO and energy diagram HOMO/LUMO. Wavelength of each acceptor : cyanoacrylic acid; 401,6301, catechol; 417,7797, 4-methyl catechol; 393,0717 and catechol Ti(OH)₂ and data band gap cyanoacrylic acid; 3,3633, catechol; 3,2572, 4-methyl catechol; 3,4422 and catechol Ti(OH)₂; 1,2408. of the for acceptor which is good used dye this is acceptor catechol because have Wavelength and value band gap small.

Keywords : solar cell, metode DFT and TDDFT, sofwer, pigmen

SUNAN GUNUNG DJATI
BANDUNG