

INTISARI

KAJIAN STRUKTUR ELEKTRONIK MATERIAL DONOR-AKSEPTOR BERBASIS P3HT-GRAPHENE MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

FIA AMALIA

20/466370/PPA/05936

Perhitungan berbasis *Density Functional Theory* telah dilakukan untuk mengkaji sifat elektronik polimer *Poly(3-hexylthiophene)* (P3HT) dengan variasi dua unit monomer sebagai rantai samping dan lapisan Graphene yang diaplikasikan pada lapisan aktif sel surya organik. Penelitian ini dilakukan untuk menemukan informasi terkait desain celah pita energi yang rendah, tingkat kestabilan reaksi, dan transfer muatan pada P3HT dan Graphene. Untuk tujuan tersebut, dilakukan perhitungan dengan SCF (*Self Consistent Field*) yang menghasilkan output energi total. Perhitungan ini dilakukan untuk memperoleh keadaan energi yang stabil berdasarkan posisi atom sistem tersebut. Sebagai hasilnya, ditemukan bahwa dengan peningkatan unit polimer terjadi penurunan nilai celah pita dimana untuk sistem dengan unit terendah (*P3HT*)_{1-graphene} sebesar 0,41 eV, sedangkan untuk sistem dengan unit tertinggi (*P3HT*)_{2-graphene} sebesar 0,27 eV. Nilai energi adsorpsi terkecil adalah sistem (*P3HT*)_{1-graphene} sebesar -175,53 kkal/mol, hal ini bergantung pada jarak yang paling rendah antar kedua sistem yaitu sebesar 5.51 Å, namun semua sistem memiliki nilai energi adsorpsi negatif yang menunjukkan bahwa reaksi berlangsung secara eksotermis. Nilai transfer muatan ΔN yang bernilai negatif dimiliki oleh sistem (*P3HT*)_{1-graphene} dan (*P3HT*)_{2-graphene}. Nilai ΔN yang negatif menunjukkan bahwa transfer elektron terjadi dari sistem P3HT ke *graphene* (P3HT sebagai donor dan *graphene* sebagai akseptor).

Kata kunci: surya organik, P3HT, *graphene*, energi adsorpsi, transfer elektron, DFT.

ABSTRACT

STUDY ON ELECTRONIC STRUCTURE OF DONOR-ACCEPTOR MATERIALS BASED ON P3HT-GRAPHENE EMPLOYING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

By

FIA AMALIA

20/466370/PPA/05936

Calculations based on Density Functional Theory have been carried out to study the electronic properties of polymer Poly(3-hexylthiophene) (P3HT) with a variation of two monomer units as side chains and a Graphene layer applied to the active layer of organic solar cells. This research was conducted to find information related to the low energy band gap design, reaction stability, and charge transfer in P3HT and Graphene. For this purpose, calculations are carried out with the SCF (Self Consistent Field) which produces the total energy output. This calculation is performed to obtain a stable energy state based on the atomic positions of the system. As a result, it was found that with an increase in polymer units there was a decrease in the bandgap value where for the system with the lowest unit ($P3HT$)₁-graphene was 0.41 eV, while for the system with the highest unit ($P3HT$)₂-graphene it was 0.27 eV. The smallest adsorption energy value for the ($P3HT$)₁-graphene is -175.53 kcal/mol, this depends on the lowest distance between the two systems, which is 5.51 Å, but all systems have a negative adsorption energy value indicating that the reaction proceeds exothermic. The negative charge transfer value ΔN is owned by the system ($P3HT$)₁ and ($P3HT$)₂. A negative ΔN value indicates that electron transfer occurs from the P3HT system to graphene (P3HT act as a donor and graphene act as an acceptor).

Keyword: organic solar cells, P3HT, graphene, adsorption energy, electron transfer, DFT.