

STUDI MODIFIKASI *AUXILIARY ACCEPTOR* DAN π -*SPACER* PADA *DYE SENSITIZER* BERBASIS *CARBAZOLE* DENGAN SISTEM D-Aa- π -A DALAM APLIKASI DSSCs MELALUI PENDEKATAN DFT

Icaq Dwi Prasetyo
18/430299/PA/18812

INTISARI

Indonesia memiliki potensi energi surya yang tinggi mencapai 4,8 kWh/m² sehingga memiliki potensi yang besar sebagai penopang terwujudnya *net zero emission* melalui pemanfaatan dan pengembangan energi baru terbarukan seperti sistem *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs) dengan memanfaatkan *dye sensitizer* sebagai penangkap sinar matahari dan mengubahnya menjadi energi listrik. Salah satu pengembangan *dye sensitizer* adalah *dye* bebas logam berbasis donor karbazol dengan konfigurasi sistem D-Aa- π -A yakni MAX114. Dalam penelitian ini dilakukan modifikasi *auxiliary acceptor* dan π -*spacer* pada *dye* MAX114 serta melakukan pemodelan *dye* pada semikonduktor TiO₂ (*dye-oxide*).

Modifikasi pada MAX114 dilakukan pada *auxiliary acceptor* dengan mengganti *benzothiadiazole* menjadi [1,2,5]thiadiazolo[3,4-c]pyridine dan [1,2,5]thiadiazolo[3,4-d]pyridazine serta pada π -*spacer* dilakukan dengan mengganti *thiophene* menjadi *cyclopenta-1,3-diene* dan *selenophene*, dari variasi tersebut maka diperoleh delapan model *dye* baru. Penelitian ini dilakukan dengan metode DFT B3PW91 6-31G(d,p) untuk keadaan dasar dan TD-DFT WB97XD 6-31G(d,p) untuk keadaan tereksitasi. Pada pemodelan *dye-oxide* digunakan kluster (TiO₂)₆ dengan tambahan himpunan basis LANL2DZ untuk atom Ti. Berdasarkan penelitian yang dilakukan menunjukkan mengganti *auxiliary acceptor* dan π -*spacer* mampu memberikan energi band gap yang lebih rendah, pergeseran merah, dan nilai parameter *Power Conversion Efficiency* (PCE) yang lebih baik. Diantara kandidat *dye* yang dikaji, menunjukkan (2E)-3-(4-{7-[(4aR,9aR)-9-(4-methylphenyl)-2,3,4,4a,9,9a-hexahydro-1H-carbazol-6-yl]-[1,2,5]thiadiazolo[3,4-d]pyridazin-4-yl}cyclopenta-1,3-dien-1-yl)-2-cyanoprop-2-enoic acid (C2) dengan modifikasi *auxiliary acceptor* [1,2,5]thiadiazolo[3,4-d]pyridazine dan π -*spacer* *cyclopenta-1,3-diene* menjadi kandidat paling potensial dengan energi band gap paling rendah sebesar 1,769 eV, pergeseran merah tertinggi dengan serapan panjang gelombang maksimum 547,71 nm, kemampuan respons NLO dengan nilai β_{tot} yang paling tinggi, nilai λ^+ dan λ^- yang rendah, LHE yang tinggi, ΔG_{inject} yang tinggi, ΔG_{reg} yang rendah, dan μ_{normal} yang tinggi. Selain itu, pemodelan *dye-oxide* dari C2 memberikan nilai E_{ads} yang negatif dan lebih negatif jika dibandingkan model *dye-oxide* MAX114 (A1) sehingga *dye-oxide* C2 dinilai memiliki interaksi yang lebih stabil dengan semikonduktor TiO₂.

Kata kunci: *Dye*, fotovoltaik, performa.

STUDY OF MODIFIED AUXILIARY ACCEPTOR AND π -SPACER ON CARBAZOLE-BASED DYE SENSITIZER WITH D-Aa- π -A SYSTEM FOR DSSCs APPLICATION USING DFT APPROACH

Icaq Dwi Prasetyo
18/430299/PA/18812

ABSTRACT

Indonesia has a high solar energy potential with up to 4.8 kWh/m² leads to a massive potential to support achieving net zero emissions by using and developing renewable energy such as Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs) that utilize the dye sensitizers to harvest lights and convert it into electricity. One of the developments of dye sensitizer is a metal-free carbazole-based dye with a D-Aa- π -A configuration, namely MAX114. In this research, modification of the auxiliary acceptor and π -spacer was carried out on MAX114 including simulation on TiO₂ semiconductors (dye-oxide).

Modifications on MAX114 were made by changing the auxiliary acceptor of benzothiadiazole to [1,2,5]thiadiazolo[3,4-c]pyridine and [1,2,5]thiadiazolo[3,4-d]pyridazine as well as replacing π -spacer of thiophene to cyclopenta-1,3-diene and selenophene, by those variations then 8 new dye models obtained. This research was carried out by the method of DFT B3PW91 6-31G(d,p) for the ground state and TD-DFT WB97XD 6-31G(d,p) for the excited state. In dye-oxide modeling, the (TiO₂)₆ cluster was used with the addition of the LANL2DZ basis set for Ti atoms. Based on the conducted research, shows that replacing the auxiliary acceptor and π -spacer able to provide lower band gap energy, redshift, and better values of Power Conversion Efficiency (PCE) parameters. Among the dye candidates studied, (2E)-3-(4-{7-[(4aR,9aR)-9-(4-methylphenyl)-2,3,4,4a,9,9a-hexahydro-1H-carbazol-6-yl]-[1,2,5]thiadiazolo[3,4-d]pyridazin-4-yl}cyclopenta-1,3-dien-1-yl)-2-cyanoprop-2-enoic acid (C2) with auxiliary acceptor [1,2,5]thiadiazolo[3,4-d]pyridazine and π -spacer cyclopenta-1,3-diene is the most potential candidate with the lowest energy band gap of 1.769 eV, highest redshift with maximum absorption wavelength of 547.71 nm, best NLO response capability with the highest β_{tot} value, low λ^+ and λ^- values, high LHE, high ΔG_{inject} , low ΔG_{reg} , and the highest μ_{normal} . In addition, the dye-oxide modeling of C2 also gives a negative E_{ads} value and is more negative when compared to the MAX114 (A1) so the dye-oxide model of C2 is considered have stable interaction with the TiO₂ semiconductor.

Keywords: Dye, photovoltaic, performance.