

## PENINGKATAN KINERJA SENSITISASI ZAT WARNA BERBASIS FENOKSAZINA DALAM APLIKASI DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSC) MENGGUNAKAN PENDEKATAN DFT

Fakkar Mumtazuddin  
19/442513/PA/19262

### INTISARI

Dengan pesatnya perkembangan kegiatan sosial ekonomi manusia, lonjakan akan kebutuhan energi tentunya tidak dapat dihindarkan. Sumber energi matahari merupakan salah satu pilihan terbaik untuk mengganti sumber energi fosil yang jumlahnya terbatas dan berdampak buruk bagi lingkungan. Untuk menangkap sinar matahari dan mengubahnya menjadi energi listrik diperlukan suatu teknologi bernama sel surya atau fotovoltaik. *Dye-sensitized solar cells* (DSSC) merupakan salah satu jenis sel surya yang menggunakan zat warna sebagai agen penyerapan cahaya. Pada penelitian ini akan dilakukan tiga modifikasi struktur pada senyawa rujukan POZ-3 yaitu senyawa berbasis fenoksazina, dengan tujuan untuk memahami bagaimana modifikasi struktur pada zat warna dapat berpengaruh pada kinerjanya sebagai sensitiser DSSC, dengan mempertimbangkan berbagai parameter, seperti nilai HOMO-LUMO *gap*, spektra UV-Vis, analisis transfer muatan, dan analisis energi adsorpsi pada permukaan  $\text{TiO}_2$ . Semua parameter dianalisis menggunakan metode DFT dan TD-DFT.

Modifikasi pertama dilakukan dengan menyisipkan gugus etinil atau ikatan karbon rangkap tiga ( $\text{C}\equiv\text{C}$ ) pada struktur, dengan tujuan meningkatkan planaritas dan memperpanjang sistem  $\pi$  terkonjugasi. Senyawa modifikasi berkode POZ-3c memberikan hasil yang terbaik dengan sudut dihedral mendekati planar ( $180^\circ$ ) dan nilai LHE (*Light Harvesting Efficiency*) yang lebih tinggi dibandingkan modifikasi lain. Modifikasi kedua dilakukan dengan menambahkan gugus akseptor tambahan di antara gugus donor (D) dan gugus jembatan- $\pi$ , dengan tujuan menurunkan nilai LUMO sensitiser dan menyebabkan pergeseran merah pada spektra UV-Vis. Sensitiser berkode Dye5 memberikan aktivitas terbaik, dengan nilai  $E_{\text{gap}}$  terkecil (1,30 eV) serta serapan spektra UV-Vis terluas (721,7 nm). Sementara itu, modifikasi ketiga dilakukan untuk mencari kandidat gugus penahan terbaik dari beberapa gugus penahan yang baru-baru ini diteliti. Energi adsorpsi menjadi parameter utama dalam mengevaluasi gugus penahan terbaik. Berdasarkan hasil yang didapat, gugus asam sianokrilat dengan kode senyawa NT-M tetap menjadi gugus penahan terbaik, dengan nilai energi adsorpsi sebesar -3,04 eV.

Kata kunci : DSSC, DFT, energi surya, fenoksazina, dan TD-DFT.

## IMPROVEMENT OF PHENOXAZINE BASED DYE SENSITIZATION PERFORMANCE IN DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSC) APPLICATIONS USING DFT APPROACH

Fakkar Mumtazuddin  
19/442513/PA/19262

### ABSTRACT

With the rapid development of human socio-economic activities, a surge in energy needs is certainly unavoidable. Solar energy sources are one of the best choices to replace fossil energy sources which are limited and have a negative impact on the environment. To capture sunlight and convert it into electrical energy requires a technology called solar cells or photovoltaic. Dye-sensitized solar cells (DSSC) are a type of solar cells that use dyes as light absorption agents. In this research, three structural modifications will be carried out on the POZ-3 as the reference compound which is a phenoxazine-based compound, which aim to understanding how structural modifications of dyes can affect their performance as a DSSC sensitizer, taking into account various parameters, such as HOMO-LUMO gap values, UV-Vis spectra, charge transfer analysis, and adsorption energy analysis on the  $\text{TiO}_2$  surface. All parameters were analyzed using the DFT and TD-DFT methods.

The first modification is carried out by inserting ethinyl groups or triple carbon bonds ( $\text{C}\equiv\text{C}$ ) in the structure, with the aim of increasing the planarity and extending the conjugated  $\pi$  system. The modification compound coded POZ-3c gives the best results with a dihedral angle close to planar ( $180^\circ$ ) and a higher LHE (Light Harvesting Efficiency) value than other modifications. The second modification was carried out by adding an additional acceptor group between the donor group (D) and the  $\pi$ -bridge group, with the aim of reducing the sensitizer's LUMO value and the red shift in the UV-Vis spectra. Dye5 coded sensitizer gave the best activity, with a small  $E_{\text{gap}}$  value (1.30 eV) and a broad UV-Vis spectral absorption (721.7 nm). Meanwhile, the third modification was carried out to find the best anchoring group candidate from several recently studied anchoring groups. Adsorption energy is the main parameter in evaluating the best anchor group. Based on the results obtained, the cyanoacrylic acid group with compound code NT-M remains the best anchor group, with an adsorption energy value of -3.04 eV.

Keywords : DSSC, DFT, phenoxazine, solar cells, and TD-DFT