

PENGARUH VARIASI π -LINKERS DAN GUGUS PENAHAN DI DALAM MOLEKUL ZAT WARNA BERBASIS KARBAZOL TERHADAP EFISIENSI SEL SURYA TERSENSITASI ZAT WARNA (DSSC) MENGGUNAKAN METODE DFT/TDDFT

Muhammad Yusuf Abdillah
19/445671/PA/19495

INTISARI

Telah dilakukan penelitian yang berjudul Pengaruh Variasi π -linkers dan Gugus Penahan Di Dalam Molekul Zat Warna Berbasis Karbazol Terhadap Efisiensi Sel Surya Tersensitasi Zat Warna (DSSC) dengan tujuan dari penelitian ini adalah mengetahui pengaruh modifikasi π -linkers dan gugus penahan pada struktur zat warna berbasis karbazol dengan konfigurasi sistem D-A- π -A terhadap sifat elektronika zat warna serta melakukan pemodelan zat warna pada semikonduktor TiO_2 yang dilakukan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent-Density Functional Theory* (TD-DFT).

Modifikasi dilakukan pada π -linkers dengan mengganti tiofena menjadi furan, pirol, dan selenofena dan dua gugus penahan yaitu asam sianokrilik dan 2-(1,1-disianometilena)rodanin. Penelitian ini dilakukan dengan metode DFT/B3LYP pada keadaan dasar dan TD-DFT/B3LYP pada keadaan tereksitasi dan himpunan basis 6-31G (d,p) dan LanL2DZ untuk atom Ti. Pemodelan senyawa dilakukan dengan program GaussView dan didapatkan koordinat yang selanjutnya digunakan untuk analisis sifat elektronik dan optiknya dengan berbagai parameter.

Hasil penelitian menunjukkan modifikasi gugus penahan dan π -linkers kompleks dengan sistem D-A- π -A dapat memberikan energi band gap yang rendah, pergeseran merah, dan nilai *Power Conversion Efficiency* (PCE) yang baik ditinjau dari parameter *Light Harvesting Efficiency* (LHE). Dicari sensitiser hasil modifikasi terbaik dari setiap gugus penahan. Sensitiser dengan kode RN4 yaitu modifikasi heteroatom Selenium (Se) atau senyawa *Selenophene* pada bagian π -linkers dan gugus penahan 2-(1,1-disianometilena)rodanin menjadi kandidat paling potensial dengan energi band gap paling rendah yaitu 2,06 eV, pergeseran merah yang tinggi yaitu (709,88 nm), aktivitas NLO yang tinggi, nilai LHE yang tinggi, energi penataan ulang total yang rendah sebesar 0,42 eV, energi bebas injeksi muatan (ΔG_{inject}) dan energi bebas regenerasi zat warna (ΔG_{reg}) yang negatif, serta nilai afinitas elektron sebesar 3,42 eV dan potensial ionisasi sebesar 5,33 eV. Pada pemodelan zat warna pada semikonduktor TiO_2 , zat warna dengan gugus penahan 2-(1,1-disianometilena)rodanin menjadi kandidat yang paling stabil dengan semua kandidat memiliki energi adsorpsi (E_{ads}) yang lebih negatif dibandingkan dengan zat warna gugus penahan asam sianokrilik dengan kode senyawa RN1 yang paling stabil dengan E_{ads} sebesar -17,851 eV dan membentuk ikatan bidentate dengan permukaan semikonduktor TiO_2 .

Kata kunci: DSSC, karbazol, DFT, TD-DFT.

EFFECT OF π -LINKERS AND ANCHORING GROUPS VARIATION ON CARBAZOL-BASED DYE MOLECULES ON THE EFFICIENCY OF DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSC) USING DFT/TDDFT METHOD

Muhammad Yusuf Abdillah
19/445671/PA/19495

ABSTRACT

A research entitled Effect of π -Linker and Anchoring Groups Variation On Carbazole-Based Dye Molecules on the Efficiency of Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs) has been conducted with the objective of examining the effects of modifications to π -linkers and blocking groups within carbazole-based dye molecules on the electronic properties of the dye, as well as of conducting dye modeling on TiO₂ semiconductor using the DFT and TD-DFT methods.

Modifications were performed on π -linkers by replacing thiophene with furan, pyrrole, and selenophene, along with two anchoring groups, namely cyanoacrylic acid and 2-(1,1-dicyanomethylene)rhodanine. This research was conducted using the DFT/B3LYP method in the ground state and TD-DFT/B3LYP in the excited state, employing the 6-31G (d,p) and LanL2DZ basis sets for Ti atoms. Compound modeling was carried out using GaussView software, obtaining coordinates that were subsequently used for analyzing its electronic and optical properties with various parameters..

The research results indicate that modifications were made to the anchoring groups and π -linkers in the D-A- π -A complex system, which can lead to a low band gap energy, redshift, and a favorable Power Conversion Efficiency (PCE) as assessed through the Light Harvesting Efficiency (LHE) parameter. The best-modified sensitizers from each anchoring group are being sought. The sensitizer with code RN4, involving the heteroatom Selenium (Se) modification or Selenophene compound on the π -linkers and the anchoring group 2-(1,1-dicyanomethylene)rhodanine, is identified as the most promising candidate, with the lowest band gap energy of 2.06 eV, a high redshift of 709.88 nm, high NLO activity, a high LHE value, low total rearrangement energy of 0.42 eV, negative charge injection free energy (ΔG_{inj}), and negative dye regeneration free energy (ΔG_{reg}), along with an electron affinity of 3.42 eV and an ionization potential of 5.33 eV. In the dye modeling on the TiO₂ semiconductor, the dye with the anchoring group 2-(1,1-dicyanomethylene)rhodanine is found to be the most stable candidate, with all candidates displaying more negative adsorption energy (E_{ads}) compared to the dye with the anchoring group cyanoacrylic acid, coded as compound RN1, which is the most stable with an E_{ads} of -17.851 eV and forms a bidentate bond with the TiO₂ semiconductor surface.

Keywords: carbazole, DSSC, DFT, TD-DFT.