

ZAT WARNA D-A- π -A BERBASIS KARBAZOL PADA APLIKASI DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSC): STUDI DFT/TDDFT TENTANG PENGARUH π -SPACER BERBASIS THIOPHENE DAN INTERNAL ACCEPTOR TERHADAP KINERJA FOTOVOLTAIK

Erma Nur Janahwati
19/445661/PA/19485

INTISARI

Kemajuan teknologi menjadi salah satu manfaat dalam mengurangi kelangkaan sumber daya energi tak terbarukan karena tingginya konsumsi bahan bakar fosil dan sumber energi konvensional. Energi terbarukan secara global ditingkatkan untuk mencapai *Sustainable Development Goals* (SDGs) poin 7 yaitu mengupayakan peralihan dari bahan bakar fosil dengan energi terbarukan. *Dye-sensitized solar cells* atau dikenal DSSCs merupakan teknologi yang menjawab permasalahan tersebut dengan memanfaatkan zat warna untuk menangkap cahaya matahari menjadi energi listrik. Tujuan dari penelitian terkait DSSCs ini adalah mengetahui modifikasi struktur terbaik ditinjau berdasarkan hasil perhitungan energi *Highest Occupied Molecular Orbital – Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (HOMO-LUMO), spektra UV-Vis, analisis *Intramolecular Charge Transfer* (ICT), aktivitas *Nonlinear Optic Properties* (NLO), dan parameter-parameter pendukung lainnya melalui metode DFT dan TD-DFT. Penelitian ini dilakukan dengan memodifikasi desain senyawa berbasis karbazol (D-A- π -A).

Modifikasi struktur dilakukan dengan dua jenis yaitu penambahan tiga variasi *internal acceptor* dan penggunaan lima variasi π -spacer berbasis *thiophene*. Model R (R1-R5), Model S (S1-S5), dan Model T (T1-T5) dilakukan perhitungan dan penentuan model sensitiser dengan kinerja terbaik. Penelitian ini dilakukan optimasi model sensitiser pada keadaan dasar dengan metode DFT. Metode TD-DFT digunakan untuk optimasi model sensitiser pada keadaan tereksitasi dan mengkaji interaksi efektif antara sensitiser yang diikat pada permukaan semikonduktor TiO₂.

Hasil penelitian didapatkan bahwa sensitiser berbasis karbazol yang dimodifikasi *trithiophene-spacer* menunjukkan nilai injeksi muatan negatif maksimum dan nilai efisiensi regenerasi yang kecil, nilai tersebut mengarahkan pada *dyes* dengan *trithiophene-spacer* (R3;S3;T4) memiliki nilai yang baik untuk transfer muatan dan regenerasi dua kali lebih baik. Selain itu, *dye* dengan *internal acceptor thieno[3,4-b]pyrazine* (Model R) memiliki nilai adsorpsi maksimum yaitu 2,3 – 2,5 eV.

Kata kunci: Energi, DSSCs, Karbazol, DFT.

CARBAZOLE BASED D-A- π -A DYES FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs) APPLICATIONS: DFT/TDDFT STUDY OF THE INFLUENCE OF THIOPHENE BASED π -SPACER AND INTERNAL ACCEPTOR ON THE PHOTOVOLTAIC PERFORMANCE

Erma Nur Janahwati
19/445661/PA/19485

ABSTRACT

Technology advancements have significantly reduced the scarcity of non-renewable energy resources caused by the high consumption of fossil fuels and conventional energy sources. Aligned with Sustainable Development Goals (SDGs) Goal 7, the objective is to transition from fossil fuels to renewable energy and enhance global renewable energy utilization. Dye-sensitized solar cells, known as DSSCs represent a technology addressing this issue by utilizing dyes to convert sunlight into electrical energy. This research on DSSCs aims to structural modification based on Highest Occupied Molecular Orbital–Lowest Unoccupied Molecular Orbital (HOMO-LUMO) energy calculations, UV-Vis's spectra, Intramolecular Charge Transfer (ICT) analysis, Nonlinear Optic Properties (NLO) activity, and other supporting parameters using the DFT and TD-DFT methods. The study involved modifying the design of a carbazole-based compound (D-A- π -A).

Structural modifications took two forms: the addition of three variations of internal acceptors and use of five variations of thiophene-based π -spacers. Model R (R1-R5), Model S (S1-S5), and Model T (T1-T5) were calculated and the sensitizer demonstrating the best performance was identified. This research carried out optimization of the sensitizer model in the basic state using the DFT method. TD-DFT method was used to optimize the sensitizer model in the excited state and study the effective interaction between sensitizers bound to the surface of the TiO₂ semiconductor.

The research revealed that carbazole-based dyes modified with trithiophene-spacers exhibited maximum negative charge injection and low regeneration efficiency values. These characteristics led to dyes with trithiophene-spacers (R3,S3,T4) having twice the values for charge transfer and regenerasi. Additionally, dyes with an internal acceptor thieno[3,4-b]pyrazine (Model S) demonstrated a maximum adsorption value of 2,3-2,5 eV.

Keywords: Energy, DSSCs, Carbazole, DFT.