

ABSTRAK

Oleh :
Ali Fadhl Indera Sanjaya
NIM 208700666

Pembangkit listrik di Indonesia masih banyak menggunakan bahan bakar fosil sehingga berpotensi mencemari lingkungan. *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) merupakan sumber energi alternatif ramah lingkungan yang diharapkan dapat membantu memenuhi tingginya kebutuhan listrik di Indonesia. DSSC generasi ketiga memiliki keunggulan dibandingkan dengan sel surya generasi pertama dan kedua yaitu DSSC memiliki *cost performance* yang tinggi. Kajiyama *et al* telah melaporkan sejumlah sensitizer senyawa organik turunan carbazole, indole, dan indoline sebagai *sensitizer* pada DSSC. Pada penelitian ini dilakukan studi komputasi untuk melengkapi data eksperimen Kajiyama *et al* berupa parameter struktur, sifat optik dan sifat elektrokimia. Dari hasil studi komputasi didapatkan senyawa dengan *band gap* terendah sebesar 2.25 eV adalah senyawa N-Indoline-PhOMe dengan panjang gelombang maksimum tertinggi pada 624.067 nm. Rasio antara hasil perhitungan komputasi dengan hasil eksperimen menunjukkan perbedaan yang kecil (rata-rata dibawah 10 %), dimana hal ini menunjukan bahwa hasil perhitungan komputasi memiliki tingkat kepercayaan tinggi sehingga dapat digunakan untuk melengkapi hasil eksperimen Kajiyama *et al*.

Kata kunci : DSSC, studi komputasi, parameter struktur, *Time Dependent Density Functional Theory* (TDDFT), *Density Functional Theory* (DFT)

Computational Studies of N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe, N-Indoline-PhOMe Compounds as A Sensitizer in Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Using Density Functional Theory (DFT) and Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT) in Gas Phase and Toluene Solvent

ABSTRACT

Power plant in Indonesia is still using fossil fuels so that it arise the polluted of environment. *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) is an environmentally friendly alternative energy sources, it expected capable to sufficient for electricity in Indonesia. DSSC third generation have advantages compared to solar cells of first and second generations and then have a high cost performance. Kajiyama et al have been studied to organic compounds are derivative of carbazole, indole, and indoline as a sensitizer in DSSC. In this research done computational studies to completes the experimental data of Kajiyama et al are structure parameters, optical properties and electrochemical properties. The results of computational studies are obtained the lowest band gap from N-indoline-PhOMe equal to 2.25% at highest maximum wavelength 624.067 nm. The ratio between computational calculation with experimental results have small differences (value under 10%), which it shown the computation calculation been precisely, so that it could be used to completes the Kajiyama et al experiment results.

Keyword : DSSC, computational studies, structural parameters, Density Functional Theory (DFT), Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT).