

**PRIMENA NOVIH JEDINJENJA
NA BAZI STILBAZOLIJUM-SOLI U SOLARNIM ČELIJAMA
AKTIVIRANIM BOJOM**

**THE APPLICATION OF NOVEL COMPOUNDS
BASED ON STILBAZOLIUM SALTS IN DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS**

**Luka Matović*¹, Aleksandra Mašulović¹, Anita Lazić¹, Kristina Gak Simić²,
Marija Milošević³, Nemanja Trišović³, Dušan Mijin³,**

¹Univerzitet u Beogradu, Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Beograd

²Univerzitet u Beogradu, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Beograd

³Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd

Solarne ćelije aktivirane bojom (DSSC) su privukle pažnju u poslednje dve decenije zbog svoje potencijalne isplativosti i efikasnosti pretvaranja upadne sunčeve svetlosti u električnu energiju. U ovom radu, pet novih jedinjenja na bazi stilbazolijum-soli, donor- π -akceptor strukture (D- π -A), je sintetizovano i okarakterisano za mogućnost primene u DSSC. Zbog svoje kvaternarne strukture, atom azota u ovim jedinjenjima ispoljava jak elektron-akceptorski karakter koji promoviše intramolekulski transfer naelektrisanja. Ovo svojstvo je omogućilo primenu stilbazolijum-soli u brojnim granama industrije i nauke (kao prekursori, intermedijeri, katalizatori, oksidanti, inhibitori korozije i enzima, agensi za kompleksiranje, jonske tečnosti, katjonski površinski aktivne materije itd.). Kako bi se stekao bolji uvid u odnos između fizičko-hemijskih i elektronskih karakteristika sintetizovanih jedinjenja, izvršena je DFT analiza, pri čemu je pokazano da je jedinjenje sa 4-(N,N-dimetilamino)fenil-grupom kao elektron-donorskom ispoljilo najnižu vrednost energije pobuđivanja, a samim tim i najveću vrednost maksimuma apsorpcije, što je u dobroj korelaciji sa eksperimentalno dobijenim rezultatima. Sintetizovana jedinjenja su zatim ukapavana u komercijalni tečni elektrolit na bazi jod/trijodid soli, sa ciljem poboljšanja fotonaponske performanse solarne ćelije sa N719 bojom. Dobijeni rezultati su pokazali da je dodavanje svih sintetizovanih jedinjenja u komercijalni tečni elektrolit poboljšalo efikasnost konverzije napravljenih solarnih ćelija u poređenju sa referentnom solarnom ćelijom u kojoj je korišćen samo tečni elektrolit na bazi jod/trijodid soli. Takođe, pokazano je da su fotonaponske performanse napravljenih solarnih ćelija zavisile od elektron-donorskog dela sintetizovanih jedinjenja. Najveća efikasnost fotonaponske konverzije od 4,11% je dobijena za DSSC sa jedinjenjem koje je u svojoj strukturi sadržalo 4-(N,N-dimetilamino)fenil-grupu kao elektron-donorsku.

Ključne reči: solarne ćelije aktivirane bojom; stilbazolijum soli; elektrolit; DFT

Dye-sensitized solar cells (DSSCs) have attracted attention over the past two decades due to their potential cost-effectiveness and efficiency in converting incident sunlight into electricity. In this

* Corresponding author: lmatovic@tmf.bg.ac.rs

<https://orcid.org/0000-0003-4945-7776>

Aleksandra Mašulović: <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>

Anita Lazić: <https://orcid.org/0000-0003-4855-3782>

Kristina Gak Simić: <https://orcid.org/0000-0003-3928-9967>

Marija Milošević: <https://orcid.org/0000-0002-4999-1664>

Nemanja Trišović: <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

Dušan Mijin: <https://orcid.org/0000-0001-5691-2971>

paper, five novel donor- π -acceptor (D- π -A) structured compounds based on stilbazolium salt, were synthesized and characterized for the potential application in DSSC. Due to its quaternary structure, the nitrogen atom in these compounds exhibits a strong electron-acceptor character which promotes intramolecular charge transfer. This property has enabled the application of stilbazolium salts in numerous branches of industry and science (as precursors, intermediates, catalysts, oxidants, corrosion and enzyme inhibitors, complexing agents, ionic liquids, cationic surfactants, etc.). To gain a better insight into the relationship between the physico-chemical and electronic characteristics of the synthesized compounds, a DFT analysis was performed, whereby it was showed that the compound with the 4-(N,N-dimethylamino)phenyl group as an electron donor showed the lowest value of the excitation energy, and therefore the highest value of the absorption maximum, which is in good correlation with the experimentally obtained results. The synthesized compounds were then dropped into a commercial liquid electrolyte based on iodine/triiodide salt, with the aim of improving the photovoltaic performance of the solar cell with N719 dye. The obtained results showed that the addition of all synthesized compounds to the commercial liquid electrolyte improved the conversion efficiency of the fabricated solar cells compared to the reference solar cell in which only iodine/triiodide salt-based liquid electrolyte was utilized. Also, it was shown that the photovoltaic performance of the fabricated solar cells depended on the electron-donor moiety of the synthesized compounds. The highest conversion efficiency of 4.11% was obtained for DSSC with a compound that contained 4-(N,N-dimethylamino)phenyl group as an electron donor.

Key words: dye-sensitized solar cells; stilbazolium dyes; electrolyte; DFT