Jurnal Fisika Unand (JFU)
Vol. 14, No. 6, November 2025, hal. 614 – 622
ISSN: 2302-8491 (Print); 2686-2433 (Online)
https://doi.org/10.25077/jfu.14.6.614-622.2025

Open Access

Modifikasi Struktur Akseptor Zat Warna Tipe D-π-A Berbasis Ditiofen sebagai *Sensitizer* pada Sel Surya

Reshiva, Imelda*, Syukri, Admi, Elvira Deswita
Departemen Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas, Padang

Info Artikel

Histori Artikel:
Diajukan: 17 Agustus 2025
Direvisi: 10 Oktober 2025
Diterima: 25 November 2025

Kata kunci:
Akseptor
Ditiofen
D-π-A
DSSC
Sel Surya

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengevalusi pengaruh variasi gugus akseptor zat warna tipe D-π-A berbasis ditiofen yang efisien digunakan sebagai *sensitizer* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC). Perhitungan menggunakan program Gaussian 16W dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent-DFT* (TD-DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G. Berdasarkan hasil penelitian diketahui bahwa variasi akseptor dapat mempengaruhi pergeseran spektrum serapan dan nilai *bandgap*. Zat warna AT5 diprediksi memiliki efisiensi yang paling tinggi untuk dijadikan sebagai *sensitizer*, karena memiliki nilai *bandgap* paling kecil, memiliki nilai momen dipol, dan panjang gelombang yang lebih besar. Semakin kecil nilai *bandgap* maka cahaya yang diserap akan bergeser ke arah merah (*red shift*), dan proses eksitasi elektron akan semakin mudah. Dapat disimpulkan bahwa zat warna dengan akseptor formil sianida dapat meningkatkan efesiensi zat warna tipe D-π-A sebagai *sensitizer* pada DSSC.

Keywords:
Acceptor
Ditiofen
D-π-A
DSSC
Solar Cells

Penulis Korespondensi:
Imelda
Email: imelda@sci.unand.ac.id

This study aims to evaluate the effect of variations in the acceptor group of dithiophen-based type D-π-A dyes that are efficiently used as sensitizers in Dye Sensitized Solar Cell (DSSC). The calculation uses the 16W Gaussian program with Density Functional Theory (DFT) and Time Dependent-DFT (TD-DFT) methods with the B3LYP/6-31G set base. Based on the results of the study, it is known that acceptor variations can affect the shift in absorption spectrum and bandgap values. The dye AT5 is predicted to have highest efficiency to be used as a sensitizer, because it has the smallest bandgap value, a dipole moment value, and a larger wavelength. The smaller the bandgap value, the absorbed light will shift towards the red (red shift), and the electron excitation process will be easier. It can be concluded that dyes with cyanide formal acceptors can improve the efficiency of D-π-A type dyes as sensitizers in DSSC.

Copyright © 2025 Author(s). All rights reserved

I. PENDAHULUAN

Kebutuhan global akan energi yang bersih dan berkelanjutan telah mendorong perkembangan teknologi energi aletrnatif, salah satunya sel surya (Deswita et al., 2021). Perkembangan yang menarik dari teknologi sel surya saat ini adalah *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) yang telah menunjukkan potensi cukup besar sebagai sel surya komersial generasi baru (Imelda, Emdeniz, 2020). DSSC merupakan jenis fotovoltaik berbasis zat warna yang berfungsi sebagai *sensitizer* untuk penyerapan cahaya Matahari (Noor et al., 2020). DSSC adalah pembangkit energi listrik yang potensial karena ramah lingkungan dan biaya produksi yang lebih murah dengan efisiensi daya yang terus meningkat (Daniswara et al., 2020).

Salah satu parameter kunci dalam mendesain DSSC adalah *sensitizer* yang berperan penting dalam menyerap cahaya, injeksi elektron, dan peningkatan sifat fotolistrik (Tripathi et al., 2020). Zat warna organik sangat cocok sebagai *sensitizer* karena tersedia dalam jumlah berlimpah, murah, dan mudah diekstrak (Imelda, 2020). Zat warna organik dapat ditingkatkan daya sensitisasinya dengan merekayasa struktur molekulnya, zat warna yang diteliti menghasilkan efisiensi yang paling baik pada peralatan DSSC ialah zat warna organik dengan tipe D-π-A. Zat warna dengan tipe D-π-A memiliki stabilitas serta efisiensi yang sangat baik pada DSSC karena memiliki sifat *push and pull* dan resonansi elektron yang lebih panjang (Imelda & Aziz, 2022). Hal ini disebabkan karena adanya sistem konjugasi, di mana D, yaitu donor elektron yang berperan sebagai penyumbang elektron dan A sebagai akseptor yang menarik elektron. Sedangkan jembatan π sebagai media transfer elektron (Imelda et al., 2020).

Tiofen diketahui menunjukkan kesesuaiannya sebagai jembatan-π konjugasi dalam zat warna organik tipe D-π-A. Penggabungan gugus tiofen ke molekul zat warna tipe D-π-A diketahui mampu meningkatkan daya serap molar, stabilitas keseluruhan dan kinerja *sensitizer* dalam sel surya. Pada penelitian sebelumnya telah dijelaskan bahwa tiofen dengan gugus donor Fenil O-alkilasi dan gugus akseptor asam sianoasetat dan asam barbiturat merupakan zat warna yang baik sebagai sensitizer pada DSSC dengan nila bandgap 2,32 eV, panjang gelombang 462 nm, J_{SC} 3.64 $mA \cdot cm^{-2}$, V_{OC} 0.50 V dan *Fill Factor* (FF) 65 % (Keremane et al., 2020). Diketahui aspek yang tidak kalah penting dalam tipe D-π-A adalah struktur akseptor, yang berperan dalam menarik elektron. Oleh Karena itu, pada penelitian ini difokuskan pada studi variasi akseptor dengan donor elektron indolin dan tiofen sebagai jembatan π.

Pendekatan kimia komputasi dalam upaya untuk mendesain senyawa menjadi sangat penting karena dapat meminimalisir penggunaan bahan kimia dan waktu penelitian, lebih hemat karena dapat menghindari *trial and error* dalam ekperimen dan mampu memberikan tingkat akurasi yang baik. Metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent DFT* (TD-DFT) memiliki kelebihan berupa hasil perhitungan lebih akurat dibandingkan dengan metode komputasi lainnya. Metode DFT dan TD-DFT digunakan untuk menyelidiki geometri molekul, struktur elektronik, spektrum serapan dan karakteristik fotovoltaik dari zat warna yang digunakan (Ouared & Rekis, 2021). Melalui pendekatan ini, diharapkan dapat diperoleh struktur zat warna yang lebih optimal untuk sensitizer pada DSSC, baik dari segi absorpsi cahaya, kestabilan molekul, maupun efeiensi transfer muatan.

II. METODE

2.1 Struktur Molekul Tipe D-π-A

Struktur molekul dibuat menggunakan *software* Gaus View 6.0. Molekul yang digunakan pada penelitian ini adalah struktur tipe D-π-A dengan donor elektron adalah indolin dan jembatan π adalah ditiofen dengan variasi gugus akseptor yang dapat dilihat pada Gambar 1.

2.2 Akuisi Data

Struktur molekul zat warna tipe D-π-A digambar dalam software Gaus View 6.0, kemudian dilakukan optimasi struktur molekul menggunakan software Gaussian 16W. Optimasi geometri molekul menggunakan metode DFT dan optimasi molekul dalam keadaan eksitasi menggunakan metode TD-DFT dengan basis set B3LYP/6-31G (Imelda et al., 2022).

2.3 Analisis Data

Analisis efesiensi serapan cahaya zat warma sebagai sensitizer pada DSSC dan regenerasi zat warna serta efesiensi daya listrik DSSC berdasarkan parameter berikut(Imelda et al., 2020, 2022):

1. Parameter elektronik yaitu berupa *contour* HOMO dan LUMO, Energi HOMO (E_{HOMO}), Energi LUMO (E_{LUMO}), bandgap (ΔE) dan *Electrostatic Surface Potential* (ESP).
2. Parameter optik berupa spektrum absorpsi, panjang gelombang eksitasi ($\lambda_{eksitasi}$), *Light Harvesting Efficiency* (LHE), dan *oscillator strength (f)*.
3. Parameter listrik berupa rapat arus (J_{SC}), tegangan (V_{OC}) dan efisiensi konversi daya DSSC (η).
4. Parameter termodinamika berupa Energi Bebas Gibbs Injeksi (ΔG_{inj}) dan Energi Bebas Gibbs Regenerasi (ΔG_{reg})

Beberapa rumus yang digunakan untuk analisis data adalah sebagai berikut (Alsmani et al., 2023):

$$\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO} \tag{1}$$

$$\Delta G_{reg} = E_{redox} - E_{dye} \tag{2}$$

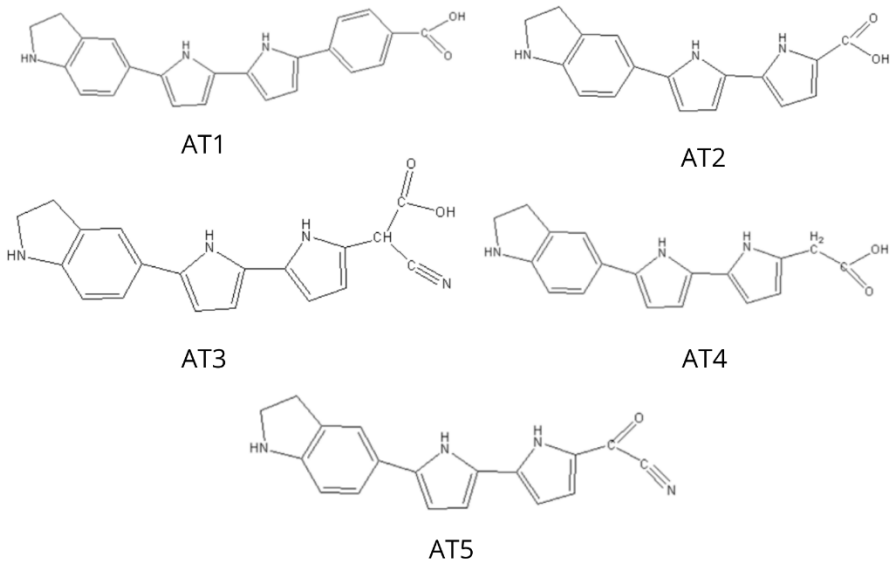
$$\Delta G_{inj} = E_{dye^*} - E_{CB} \tag{3}$$

$$V_{oc} = E_{LUMO} - E_{CB} \tag{4}$$

$$LHE = 1 - 10^{-f} \tag{5}$$

$$J_{sc} = \int LHE(\lambda)\Phi_{inject}\eta_{collect}\, d\lambda \tag{6}$$

$$\eta = \frac{J_{SC}V_{OC}}{I_S} FF \tag{7}$$



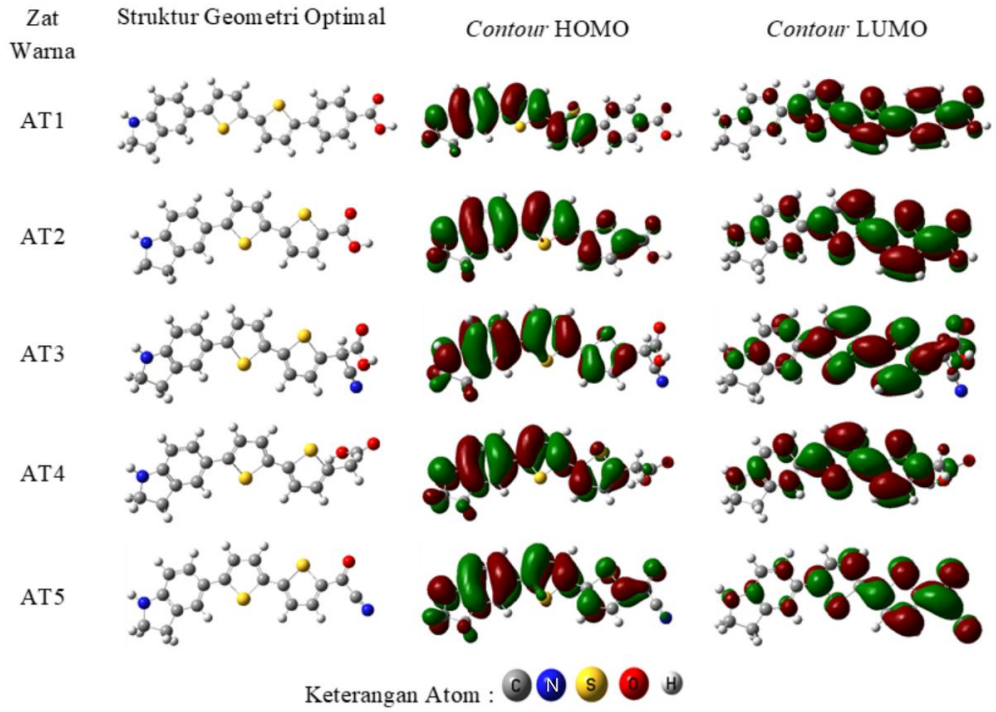
Gambar 1 Struktur molekul tipe D-π-A berbasis ditiofen dengan variasi gugus akseptor.

III. HASIL DAN DISKUSI

3.1 Struktur Geometri Optimal

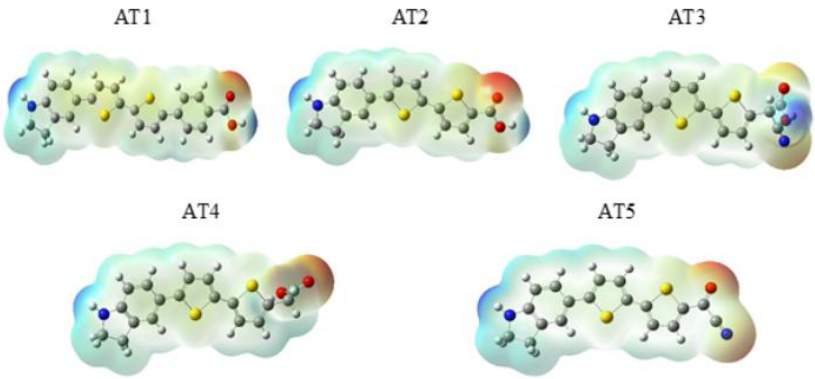
Optimasi geometri dilakukan untuk mendapatkan struktur geometri yang optimal dari suatu molekul zat warna. Struktur geometri dari keenam zat warna variasi rantai donor dioptimasi dengan

menggunakan basis set B3LYP/6-31G untuk menentukan sifat elektronik dari masing-masing zat warna seperti nilai energi HOMO, energi LUMO, nilai celah energi (*bandgap*), *contour* HOMO dan LUMO. Struktur geometri optimal, contour HOMO dan LUMO ditampilkan pada Gambar 1. Berdasarkan Gambar 2, terlihat bahwa *contour* HOMO cenderung terdistribusi pada rantai donor dan rantai π-konjugasi di ikatan. Sedangkan *contour* LUMO terdistribusi pada rantai π-konjugasi, rantai akseptor dan sedikit pada rantai donor. Hal ini menandakan bahwa *contour* HOMO bersifat pendonor elektron dan *contour* LUMO bersifat penarik elektron (Imelda, Emdeniz, 2020; Wazzan & Irfan, 2020).



Gambar 2 Struktur geometri optimal dan contour HOMO-LUMO zat warna AT1-AT5

3.2 *Electrostatic Surface Potential* (ESP)



Gambar 3 ESP zat warna AT1-AT5

Potensial elektrostatik permukaan (ESP) adalah parameter yang digunakan untuk memprediksi interaksi muatan antarmolekul pada zat warna seperti daerah untuk serangan elektrofilik dan serangan nukleofilik. Warna yang berbeda adalah merah, biru, dan hijau; dimana warna ini dihasilkan dari ESP sebagai representasi daerah negatif, positif, dan netral. Daerah yang berwarna merah menunjukkan sifat elektronegatif (menarik elektron), yang lebih disukai oleh serangan elektrofilik. Daerah yang berwarna biru menunjukkan sifat elektropositif (pendonor elektron), yang lebih disukai oleh serangan nukleofilik (Sarikavak et al., 2021). Peta ESP molekul zat warna AT1-AT5 ditunjukkan pada Gambar 3 Dari Gambar 3, terlihat bahwa sifat elektropositif atau kemampuan mendonorkan elektron lebih dominan pada atom hidrogen yang terikat pada nitrogen di rantai donor. Sebaliknya, sifat elektronegatif

atau kemampuan menariik elektron lebih dominan pada atom oksigen di rantai akseptor. Perbedaan sifat elektropositif dan elektronegatif ini akan memudahkan proses transfer elektron dalam zat warna

3.3 Energi *Frontier* dan *Bandgap* (ΔE)

Efisiensi DSSC sangat dipengaruhi oleh sifat elektronik dari molekul zat warna, diantaranya adalah celah energi (*bandgap*) serta tingkat energi HOMO dan LUMO. Perbatasan orbital molekul juga dikenal sebagai kontribusi HOMO dan LUMO, yang harus diperhitungkan untuk menentukan keadaan zat warna saat regenerasi dan injeksi elektron (Gunawardhana et al., 2024). *Sensitizer* yang efisien digunakan pada DSSC diharapkan mampu menghasilkan nilai *bandgap* yang paling kecil. Semakin kecil nilai *bandgap* zat warna, maka cahaya yang diserap akan bergeser ke arah panjang gelombang yang lebih panjang (*red shift*), sehingga proses eksitasi elektron dari orbital HOMO ke LUMO juga akan semakin mudah dan kepekaan terhadap cahaya juga semakin meningkat (Tripathi et al., 2020). Selain itu tingkat energi HOMO juga menentukan efesiensi zat warna sebagai *sensitizer,* jika nilai energi HOMO lebih rendah dari tingkat energi redoks I_3^-/I^-(-4,8 eV) maka proses transfer elektron dari pita konduksi ke tingkat energi redoks (proses rekombinasi) tidak mungkin terjadi (Bouzzine et al., 2023). Nilai dari E_{HOMO}, E_{LUMO} dan *Bandgap* diperlihatkan pada Tabel 1. Zat warna AT2 dan AT5 memiliki nilai E_{HOMO} yang lebih rendah dari pasangan redoks I^-/I_3^- yang menandakan proses terjadinya regenerasi sel lebih mudah dan berlangsung spontan. Sedangkan pada zat warna AT1, AT3 dan AT4 nilai E_{HOMO} lebih besar dari pasangan redoks I^-/I_3^-, yang memungkinkan terjadinya proses rekombinasi muatan. Rekombinasi muatan dapat mengurangi arus listrik yang dihasilkan oleh sel surya karena muatan yang bergerak terkumpul kembali, sehingga mengurangi efisiensi kinerja DSSC (Bouzzine et al., 2023). Zat warna AT5 dengan gugus akseptor formil sianida memiliki nilai *bandgap* yang lebih kecil dibandingkan dengan zat warna lainnya. Hal ini dikarenakan pada formil sianida terdapat gugus penarik elektron yang kuat yaitu -C=O dan -C≡N. Sehingga, elektron akan lebih mudah tereksitasi dan cahaya yang diserap lebih banyak karena panjang gelombangnya yang lebih besar.

Tabel 1. Energi HOMO-LUMO dan *bandgap* dari zat warna AT1-AT5

Zat Warna	Gugus Akseptor	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE (eV)
AT1	Asam benzoat	-4,6551	-2,2270	2,4281
AT2	Asam format	-4,8442	-2,2278	2,6164
AT3	Asam sianoasetat	-4,7073	-1,9603	2,7470
AT4	Asam asetat	-4,7712	-1,9968	2,7745
AT5	Formil sianida	-4,8948	-3,1799	1,7149

3.4 Sudut Dihedral dan Panjang Ikatan

Parameter geometri seperti sudut dihedral (Θ) dan panjang ikatan (d) ditentukan dari optimasi geometri dalam keadaan dasar. Sudut dihedral dan panjang ikatan antar rantai dalam molekul zat warna memiliki pengaruh yang signifikan terhadap sifat optoelektronik pada DSSC. Sudut dihedral menunjukkan keplanaran dari zat warna yang sangat penting dalam transfer muatan intramolekul. Jika suatu zat warna memiliki nilai sudut dihedral yang mendekati 0° atau 180°, maka zat warna tersebut memiliki konformasi planar (sebidang). Adapun zat warna yang memiliki panjang ikatan lebih kecil dari ikatan C-C tunggal (1,54 Å), menunjukkan transfer elektron antar rantai akan semakin cepat (Vuai et al., 2021). Besarnya sudut dihedral dan panjang ikatan disajikan dalam Tabel 2. Berdasarkan Tabel 2, bisa disimpulkan bahwa semua zat warna memiliki besar sudut dihedral sekitar 129° yang menandakan bahwa molekul zat warna memiliki konformasi yang kurang planar. Adapun untuk panjang ikatan, semua zat warna memiliki panjang ikatan yang lebih kecil dari ikatan C-C tunggal (1,54 Å), dimana semakin pendek panjang ikatan maka semakin cepat terjadinya transfer elektron.

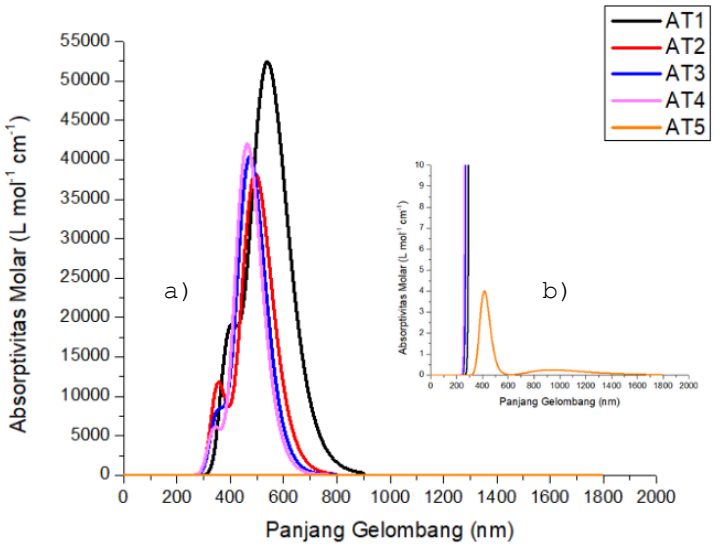
Tabel 2. Nilai sudut dihedral dan panjang ikatan zat warna AT1-AT5

Zat Warna	$Θ_1$ (°)	$Θ_2$ (°)	d_1 (Å)	d_2 (Å)
AT1	129,70184	129,46573	1,456	1,456
AT2	129,84854	129,39972	1,455	1,444
AT3	129,73776	129,31346	1,457	1,516
AT4	129,97389	129,10008	1,456	1,496
AT5	129,72140	129,62687	1,452	1,437

3.5 Spektrum Absorpsi

Sifat optik adalah faktor penting dalam menentukan seberapa banyak cahaya yang diserap oleh zat warna pada DSSC. Sifat tersebut meliputi kekuatan osilator (*f*), yang terkait dengan panjang gelombang penyerapan maksimum (λ_{maks}), energi transisi vertikal zat warna dari kondisi dasar ke kondisi tereksitasi, transisi utama, dan persentase kontribusi. Agar mencapai efisiensi serapan cahaya tinggi pada DSSC, spektrum penyerapan *sensitizer* harus seoptimal mungkin agar sesuai dengan spektrum cahaya matahari, sehingga dapat menyerap radiasi matahari maksimum (Vuai et al., 2021). Spektrum absorpsi zat warna AT1-AT5 diperlihatkan pada Gambar 42.

Hasil data pada Gambar 4 (a) menunjukkan bahwa zat warna AT1 memiliki intensitas penyerapan cahaya yang lebih tinggi. Hal ini dikarenakan zat warna AT1 memiliki nilai kekuatan osilator yang lebih besar sehingga dihasilkan puncak yang tinggi. Kekuatan osilator menandakan bahwa cahaya yang diserap oleh molekul zat warna lebih banyak pada panjang gelombang tertentu (Sudarlin, 2019). Adapun zat warna yang memiliki penyerapan cahaya yang lebih baik ialah zat warna AT5 karena panjang gelombang maksimum yang dihasilkan berada di daerah IR dekat sebesar 939,43 nm. Namun, zat warna AT5 memiliki nilai kekuatan osilator lebih kecil dibandingkan zat warna lainnya yang bisa dilihat pada Gambar 4 (b), sehingga AT5 memiliki intensitas serapan cahaya yang relatif rendah. Jika molekul zat warna mampu menyerap sinar IR, maka molekul tersebut juga mampu menyerap sinar UV dan sinar tampak. Sinar tampak terpancar lebih banyak dan optimal terjadi dari siang hingga sore hari, sementara sinar IR dominan dihasilkan dari bintang pada malam hari (Imelda & Aziz, 2022). Oleh karena itu, zat warna yang efisien digunakan sebagai *sensitizer* ialah zat warna AT5.



Gambar 4 (a) Spektrum UV-Vis zat warna AT1-AT5 dan (b) perbesaran spektrum

3.6 Momen Dipol, ΔG_{inj}, ΔG_{reg}

Momen dipol adalah nilai yang menunjukkan kemampuan molekul dalam membentuk pusat muatan negatif dan positif (polarisasi) karena adanya transfer elektron dalam zat warna. Semakin besar nilai momen dipol, semakin mudah terbentuknya kutub positif di rantai donor dan kutub negatif di rantai akseptor. Sehingga momen dipol yang semakin besar memiliki transfer muatan lebih baik dan mampu meningkatkan nilai V_{OC} (Imelda, 2020; Ouared & Rekis, 2021). Sedangkan ΔG_{inj} adalah kemampuan molekul zat warna dalam menginjeksikan elektron dari orbital LUMO ke pita konduksi TiO_2. Semakin negatif nilai ΔG_{inj}, maka proses injeksi elektron akan semakin mudah (spontan) dan mampu meningkatkan nilai J_{SC} (Li et al., 2021). Nilai momen dipol, ΔG_{inj}, dan ΔG_{reg} zat warna AT1-AT5 ditampilkan pada Tabel 4.

Data pada Tabel 4, momen dipol terbesar ditunjukkan oleh zat warna AT5 yang menandakan proses terbentuknya kutub positif dan negatif semakin mudah. Hal ini karena perbedaan sifat keelektronegatifan yang besar dimana pada rantai donor terdapat atom nitrogen yang akan menyumbangkan pasangan elektron bebasnya sedangkan pada rantai akseptor terdapat gugus penarik elektron yang kuat yaitu -C=O dan -C≡N yang akan menarik elektron kearah dirinya. Selanjutnya semua

zat warna mengalami proses injeksi elektron yang spontan dari LUMO ke pita konduksi TiO_2 ditandai dengan nilai ΔG_{inj} negatif dan zat warna yang paling spontan yaitu pada zat warna AT3 dengan nilai -1,9072 eV. Adapun nilai ΔG_{reg} yang paling kecil terdapat pada zat warna AT1 sekitar -0,1449 eV yang menandakan proses regenerasi zat warna dari elektrolit lebih efisien dan stabil (Samawi et al., 2022).

Tabel 4. Nilai momen dipol, ΔG_{inj}, dan ΔG_{reg} dari zat warna AT1-AT5

Zat Warna	Momen Dipol (d)	ΔG_{inj} (eV)	ΔG_{reg} (eV)
AT1	7,695857	-1,6396	**-0,1449**
AT2	8,257455	-1,6634	0,0442
AT3	7,64619	**-1,9072**	-0,0927
AT4	10,313016	-1,9027	-0,0288
AT5	**13,999767**	-0,4250	0,0948

3.7 Analisis Sifat Listrik

Kemampuan zat warna dalam menghasilkan arus listrik dapat dilihat dari nilai parameter listrik berupa V_{OC} (tegangan arus terbuka), J_{SC} (rapat arus pendek) dan efisiensi konversi daya (η) (Imelda & Aziz, 2022). Nilai LHE dan V_{OC} zat warna AT1-AT5 disajikan dalam Tabel 5. Menurut persamaan 3, nilai LHE dipengaruhi oleh nilai *oscillator strenght (f),* dimana semakin besar nilai kekuatan osilator maka semakin besar pula nilai LHE yang dihasilkan. Dari Tabel 5, terlihat bahwa zat warna yang memiliki nilai LHE terbesar ditunjukkan oleh zat warna AT1 dengan nilai 0,94842.

Tabel 5. Nilai dari LHE dan Voc untuk zat warna AT1-AT5

Zat Warna	LHE	V_{OC} (eV)
AT1	**0,94842**; 0,64108; 0,00894	1,7730
AT2	0,88629; 0,47833; 0,04016	1,7722
AT3	0,89891; 0,22768; 0,21603	**2,0397**
AT4	0,90804; 0,28254; 0,02164	2,0032
AT5	0,00000; 0,00023; 0,00000	0,8201

Adapun untuk nilai V_{OC} berbanding lurus dengan efisiensi konversi daya (η) seperti yang terlihat pada persamaan 4, dimana semakin tinggi nilai V_{OC} maka efisiensi DSSC juga akan semakin meningkat. Nilai V_{OC} adalah tegangan saat arus terbuka, yaitu gaya yang diberikan oleh molekul zat warna terhadap luas penampang elektroda. Dengan demikian, semakin panjang jalur yang ditempuh oleh elektron, maka semakin tinggi tegangan yang dihasilkan, sehingga nilai Voc akan semakin meningkat (Lu et al., 2016). Berdasarkan Tabel 5, zat warna yang memiliki nilai V_{OC} paling besar yaitu zat warna AT3 dengan nilai V_{OC} sebesar 2,0397 eV.

IV. KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan menunjukan bahwa variasi akseptor dapat mempengaruhi pergeseran spektrum serapan dan nilai *bandgap*. Zat warna yang paling potensial digunakan sebagai *sensitizer* pada DSSC adalah zat warna AT5 karena memiliki nilai *bandgap* paling kecil dan memiliki nilai momen dipol, serta panjang gelombang yang lebih besar. Semakian kecil nilai *bandgap* maka cahaya yang diserap akan bergeser ke arah *red shift*, dan proses eksitasi elektron akan semakin mudah. Hasil ini menunjukkan bahwa zat warna dengan akseptor formil sianida dapat meningkatkan efesiensi zat warna tipe D-π-A sebagai *sensitizer* pada DSSC.

UCAPAN TERIMA KASIH

Kami mengucapkan terima kasih kepada Lembaga Penelitian dan Pengabdian kepada Masyarakat (LPPM) Universitas Andalas atas dukungan dan bantuan dana yang diberikan untuk hibah Penelitian Tugas Akhir - Skripsi Sarjana dengan Nomor Kontrak: 172/UN16.19/PT.01.03/PSS/202.

DAFTAR PUSTAKA

Alsmani, N., Al-qurashi, O. S., & Wazzan, N. (2023). Performance enhancement of catechin-graphene quantum dot nanocomposites functionalized with carboxyl and doped / decorated with boron towards dye-sensitized solar cell applications : DFT and TD-DFT calculations. *Journal of*

Molecular Graphics and Modelling, *121*(February), 108427. https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2023.108427

Bouzzine, S. M., Abdelaaziz, A., Hamidi, M., Al-zahrani, F. A. M., Zayed, M. E. M., & El-shishtawy, R. M. (2023). *The Impact of TPA Auxiliary Donor and the π -Linkers on the Performance of Newly Designed Dye-Sensitized Solar Cells : Computational Investigation*.

Daniswara, A., Raydiska, G., & Timotius, Y. (2020). Strategi Implementasi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) di Indonesia. *Jurnal Offshore: Oil, Production Facilities and Renewable Energy*, *4*(2), 9–15. https://doi.org/10.30588/jo.v4i2.835

Deswita, E., Imelda, S, R. F., & Oesamah. (2021). Modifikasi Struktur Zat Warna Kuinolin Untuk Meningkatkan Kinerja Selsurya Menggunakan Metode DFT. *Jurnal Kimia Saintek Dan Pendidikan*, *V*(2), 76–85. https://doi.org/https://e-journal.sari-mutiara.ac.id/index.php/KIMIA/article/view/2488/1672

Gunawardhana, P., Balasooriya, Y., Kandanapitiye, M. S., & Chau, Y. C. (2024). *applied sciences Optoelectronic Characterization of Natural Dyes in the Quest for Enhanced Performance in Dye-Sensitized Solar Cells : A Density Functional Theory Study*.

Imelda, Emdeniz, dan S. I. M. (2020). Rekayasa Struktur Akseptor Pada Zat Warna Organik Tipe D-Π -a Dengan Kerangka Tiofen. *Journal of Research and Education Chemistry*, *2*(1), 30. https://doi.org/10.25299/jrec.2020.vol2(1).4857

Imelda, & Aziz, H. (2022). Modifikasi Struktur Zat Warna Berbasis Trifenilamin untuk Meningkatkan Kinerja Dye-Sensitized Solar Cells (Dsscs): Metode Komputasi *Journal of Research and Education Chemistry*, *4*(1), 34–49. https://doi.org/10.25299/jrec.2022.vol4(1).9357

Imelda, Emriadi, Aziz, H., & Santoni, A. (2022). Computational Design of Novel Coumarin Sensitizers To Improve the Efficiency of Solar Cells. *Moroccan Journal of Chemistry*, *10*(1), 180–190.

Imelda, Emriadi, Aziz, H., Santoni, A., Ramadhan, R. G., & Fitria, R. A. (2020). Theoretical Investigation of Aniline-Based Dyes to Improve The Efficiency of Solar Cells. *International Journal of Applied Chemistry*, *7*(2), 75–80. https://doi.org/https://doi.org/10.14445/23939133/IJAC-V7I2P111

Imelda, R. A. P. (2020). Optimalisasi Struktur Π-Konjugasi Pada Zat Warna Organik Tipe D-Π-a. *Journal of Research and Education Chemistry*, *2*(2), 61. https://doi.org/10.25299/jrec.2020.vol2(2).5724

Keremane, K. S., Naik, P., & Adhikari, A. V. (2020). Simple thiophene based organic dyes as active photosensitizers for dssc application: From molecular design to structure property relationship. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, *12*(2), 1–5. https://doi.org/10.21272/JNEP.12(2).02039

Kerraj, S., Salah, M., Chtita, S., El Idrissi, M., Belaaouad, S., Mohammed, M., Acharjee, N., & Komiha, N. (2022). Theoretical study of photovoltaic performances of Ru, Rh and Ir half sandwich complexes containing N,N chelating ligands in Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs). DFT and TD-DFT investigation. *Computational and Theoretical Chemistry*, *1209*(January), 113630. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2022.113630

Li, L., Dai, X., Liao, X., Zang, X., Huang, J., Zhang, H., Yin, X., & Hong, Y. (2021). Dual-channel D-(π-A)2 phenoxazine/phenothiazine dyes with an auxiliary N-alkoxy benzoic acid anchor for fabrication of dye-sensitized solar cells. *Solar Energy*, *225*(March), 173–183. https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.07.030

Lu, Y. H., Liu, R. R., Zhu, K. L., Song, Y. L., & Geng, Z. Y. (2016). Theoretical study on the application of double-donor branched organic dyes in dye-sensitized solar cells. *Materials Chemistry and Physics*, *181*, 284–294. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.06.060

Noor, A., Hamdini, M., Ramadina, S., & Tiandho, Y. (2020). Model Dye-Sensitized Solar Cell dan Aplikasinya Berdasarkan Data Temperatur Harian: Studi Kasus Pangkalpinang. *Jurnal Pendidikan Fisika Dan Keilmuan (JPFK)*, *6*(2), 131. https://doi.org/10.25273/jpfk.v6i2.7707

Ouared, I., & Rekis, M. (2021). Efficient triphenyleamine-based organic sensitizers for dye sensitized solar cells: Density functional theory study. *Computational and Theoretical Chemistry*, *1202*(May). https://doi.org/10.1016/j.comptc.2021.113309

Samawi, K. A., Salman, E. A., Alshekhly, B. A., Nassar, M. F., Borzehandani, M. Y., Alif, M., Latif, M., & Abdulmalek, E. (2022). Rational design of different π -bridges and their theoretical impact on indolo. *Computational and Theoretical Chemistry*, *1212*(April), 113725. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2022.113725

Sarikavak, K., Kurtay, G., Sevin, F., & Güllü, M. (2021). Molecular engineering of thienothiophene or dithienopyrrole-based π -spacers for dye-sensitized solar cells (DSSCs) with D- π -A architecture : A DFT / TD-DFT study. *Computational and Theoretical Chemistry*, *1201*(January), 113275. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2021.113275

Sudarlin, M. I. M. (2019). *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi Studi Teoritis Penggunaan Derivasi Asam Siano sebagai Akseptor*. *22*(4), 123–128.

Tripathi, A., Ganjoo, A., & Chetti, P. (2020). Influence of internal acceptor and thiophene based π-spacer in D-A-π-A system on photophysical and charge transport properties for efficient DSSCs: A DFT insight. *Solar Energy*, *209*(April), 194–205. https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.08.084

Vuai, S. A. H., Khalfan, M. S., & Babu, N. S. (2021). DFT and TD-DFT studies for optoelectronic properties of coumarin based donor-π-acceptor (D-π-A) dyes: applications in dye-sensitized solar cells (DSSCS). *Heliyon*, *7*(11), e08339. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e08339

Wazzan, N., & Irfan, A. (2020). Promising architectures modifying the D- π -A architecture of sensitizers in dye-sensitized solar cells : A DFT study. *Materials Science in Semiconductor Processing*, *120*(February), 105260. https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105260