



## Studi Teoritis Penggunaan Derivasi Asam Siano sebagai Akseptor Elektron dalam Pelargonidin sebagai Senyawa Pewarna Sel Surya Sensitasi

Muhamad Imam Muslim<sup>a,\*</sup>, Sudarlin<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Jurusan Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi. UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, Jl. Marsda Adisucipto Yogyakarta 55281, Indonesia

\* Corresponding author: [14630007@student.uin-suka.ac.id](mailto:14630007@student.uin-suka.ac.id)

<https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.123-128>

### Article Info

#### Article history:

Received: 2 October 2018

Revised: 17 June 2019

Accepted: 20 June 2019

Online: 31 July 2019

#### Keywords:

DSSC; Pelargonidin;  
 HOMO-LUMO; DFT;  
 TDDFT;  $V_{RP}$ ; LHE; Spectra;  
 Bond Length; Electron  
 Acceptor

### Abstract

**Title: Theoretical Study on the Use Cyano Acid Derivation as Electron Acceptors in Pelargonidin as Dye Compounds of Sensitized Solar Cells (DSSC)**

The theoretical study of the use of cyano acid derivatives as electron acceptor groups in pelargonidin as a dye compound in sensitized solar cells (DSSC) was successfully carried out. Theoretical study was carried out with the purpose to determine the effect modification of the addition of cyanoacrylic benzothiadiazole, cyanoacrylate, cyanovinyl, and cyanocynamic as electron acceptors to the characteristics of pelargonidin as dye DSSC. The effect of modification is based on the parameters of bond length, spectra, molecular electron density, light harvesting efficiency (LHE), ( $V_{RP}$ ), and HOMO-LUMO energy. The molecular structure created using the Avogadro program, then optimized by DFT/TDDFT method using a base set 6.311G\*. Based on the results of research on pelargonidin-benzothiadiazole cyanoacrylate is a better modification when compared with pelargonidin without modification or pelargonidin modified with other cyano acids. This modification is better modification based on parameters molecular electron density, HOMO-LUMO energy, ( $V_{RP}$ ), bond lengths, and spectra. Pelargonidin-benzothiadiazole cyanoacrylic electron density in LUMO conditions centred in benzothiadiazole cyanoacrylic, HOMO and LUMO energy of dye is  $-4.97856$  eV &  $-2,56731$  eV,  $V_{RP}$  value 0.439, bond lengths  $1.936$  Å, and spectra at wavelength  $393.14$  nm &  $377.09$  nm. Based on the light harvesting efficiency (LHE), pelargonidin without modification is the best modification with an LHE value 0.820.

### Abstrak

#### Kata Kunci:

DSSC; Pelargonidin;  
 HOMO-LUMO; DFT;  
 TDDFT;  $V_{RP}$ ; LHE; Spektra;  
 Panjang Ikatan; Akseptor  
 Elektron

Kajian teoritis penggunaan turunan asam siano sebagai gugus akseptor elektron pada pelargonidin sebagai senyawa pewarna sel surya tersensitasi (DSSC) telah berhasil dilakukan. Kajian teoritis dilakukan dengan tujuan untuk mengetahui pengaruh modifikasi penambahan gugus asam benzotiadiazol sianoakrilik, sianoakrilik, sianovinil, dan sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik pelargonidin sebagai dye pada DSSC. Pengaruh modifikasi didasarkan pada parameter panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling ( $V_{RP}$ ), dan energi HOMO-LUMO. Struktur molekul dibuat dengan menggunakan program Avogadro, kemudian dioptimasi dengan metode DFT/TDDFT menggunakan basis set 6.311G\*. Berdasarkan hasil penelitian pelargonidin-benzotiadiazol sianoakrilik merupakan modifikasi yang lebih baik apabila dibandingkan dengan pelargonidin tanpa modifikasi maupun pelargonidin yang dimodifikasi dengan asam siano lain. Hal tersebut didasarkan pada parameter posisi kerapatan elektron molekul, energi HOMO-LUMO, konstanta kopling ( $V_{RP}$ ),

panjang ikatan, dan spektra. Pada pelargonidin-benzatiadizol sianoakrilik kerapatan elektron di keadaan LUMO terkumpul pada benzatiadizol sianoakrilik, energi HOMO dan LUMO sebesar  $-4,97856$  eV &  $-2,56731$  eV, nilai  $V_{RP}$  0,439, panjang ikatan 1,936 Å, dan puncak spektra pada panjang gelombang 393,14 nm & 377,09 nm. Berdasarkan parameter efisiensi penyerapan cahaya (LHE) maka yang terbaik adalah pelargonidin tanpa modifikasi dengan nilai LHE sebesar 0,820.

## 1. Pendahuluan

Sel surya tersensitasi atau *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) merupakan sel surya generasi ketiga. Sel surya ini memanfaatkan keadaan tereksitasi molekul zat pemeka (*dye*) yang kemudian menginjeksikan elektronnya kepada bahan semikonduktor. Zat pemeka atau *dye* terbagi menjadi dua jenis yaitu *dye* organik bebas logam dan *dye* organik dengan logam [1]. Salah satu *dye* organik bebas logam adalah pelargonidin yang dapat ditemukan di alam pada buah *Canarium odontophyllum*. Sebagai senyawa pewarna pada DSSC, pelargonidin dari buah tanaman ini menghasilkan efisiensi sebesar 0,79% [2]. Salah satu kekurangan penggunaan senyawa pewarna organik bebas logam ini adalah nilai efisiensi yang masih sangat rendah sehingga perlu dilakukan modifikasi yang dapat meningkatkan efisiensi pelargonidin.

Beberapa penelitian telah dilakukan dengan memodifikasi struktur pada *dye* berdasarkan asumsi dasar susunan *dye* pada DSSC. Saat ini, sebagian besar sensitiser organik dibuat dengan susunan (D- $\pi$ -A), di mana D merupakan gugus donor elektron,  $\pi$  merupakan jembatan terkonjugasi, dan A merupakan akseptor elektron. Susunan yang demikian menghasilkan efisiensi yang lebih baik [3]. Salah satu penelitian dengan memodifikasi pelargonidin telah dilakukan oleh Affandi [4] secara komputasi menggunakan metode komputasi DFT/TDDFT untuk mempelajari pengaruh penambahan gugus asam sianoasetat atau asam sianoakrilik terhadap pelargonidin dengan parameter tingkat energi HOMO-LUMO. Hasil yang diperoleh menunjukkan terjadinya perubahan selisih tingkat energi HOMO-LUMO pelargonidin.

Terdapat berbagai macam jenis gugus akseptor elektron yang dapat digunakan dalam melakukan modifikasi salah satunya adalah turunan asam siano. Beberapa contoh asam siano adalah asam sianoakrilik [4], benzatiadizol sianoakrilik [5], sianovinil [6], dan asam sianosinamik [7]. Asam siano tersebut memiliki sifat sebagai penarik elektron atau akseptor elektron karena gugus siano atau nitril memiliki muatan molekul positif sehingga dapat menarik elektron di sekitarnya. Modifikasi yang dapat dilakukan adalah menggunakan pelargonidin sebagai donor elektron dan asam sianoakrilik, sianovinil, asam benzatiadizol sianoakrilik, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron.

Metode komputasi yang dapat digunakan adalah metode DFT/TDDFT. Metode ini telah digunakan untuk berbagai penelitian terkait sel surya DSSC salah satunya untuk menentukan efisiensi DSSC menggunakan *dye*

berupa trifenilamin sebagai donor elektron dan asam rodanin-3 asetat sebagai akseptor elektron dengan variasi penambahan gugus  $\text{CH}_2=\text{CH}-$  dan penambahan panjang jembatan  $\pi$ . Hasil yang diperoleh dari beberapa variasi menunjukkan penurunan  $\Delta\text{HOMO-LUMO}$  dari senyawa pewarna yang dihasilkan [1].

Parameter yang akan digunakan pada penelitian ini untuk menentukan hasil modifikasi adalah panjang ikatan antara Ti dan molekul sensitiser, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling ( $V_{RP}$ ), spektra, dan kerapatan elektron pada posisi HOMO-LUMO [8, 9].

## 2. Metode Penelitian

### 2.1. Alat Penelitian

Alat yang digunakan pada penelitian ini adalah PC Intel Pentium Processor i7-4770 3.40 GHz dengan RAM 8GB. Aplikasi komputer yang digunakan adalah NWChem [10], Avogadro, ECCE, dan ChemCraft [4].

### 2.2. Cara Kerja Penelitian

Struktur molekul pelargonidin tanpa modifikasi dan pelargonidin termodifikasi asam siano digambar dengan menggunakan avogadro. Struktur yang telah dibuat kemudian dioptimasi menggunakan metode DFT untuk keadaan dasar dan metode TDDFT untuk keadaan tereksitasi dengan basis set 6.311G\* menggunakan Nwchem. Visualisasi molekul, energi, dan orbital molekul menggunakan ECCE. Untuk visualisasi spektra menggunakan Chemcraft. Langkah terakhir yaitu menggambar variasi molekul yang direaksikan dengan  $\text{TiO}_2$  untuk mempelajari interaksinya.

## 3. Hasil Penelitian

### 3.1. Pemilihan Metode

Data perbandingan nilai energi eksitasi ditunjukkan pada tabel 1, dari data tersebut ditunjukkan adanya selisih sebesar 0,411 eV dan persentase perbandingan sebesar 85,2 %. Nilai persentase perbandingan ini menunjukkan energi eksitasi yang didapatkan dengan menggunakan metode ini mendekati penelitian yang berdasarkan eksperimen. Perhitungan yang dilakukan dalam penelitian ini menggunakan metode DFT/TDDFT dan basis set 6-311G\*, karena metode dan basis set ini telah digunakan di berbagai penelitian terkait sel surya DSSC.

Selisih energi eksitasi eksperimen dengan energi eksitasi perhitungan pada tabel 1 sebesar 0,267 eV dan persentase sebesar 89,385%. Hasil ini menunjukkan

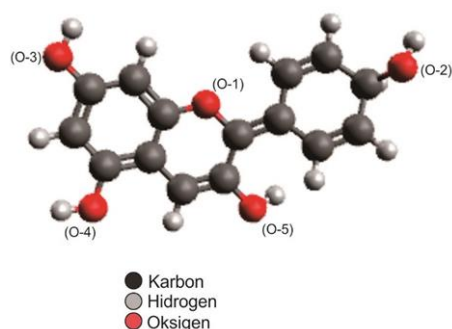
bahwa penggunaan basis set 6.311G\* cukup akurat. Hal ini berdasarkan persentase perbandingan hasil perhitungan mendekati hasil eksperimen.

**Tabel 1.** Perbandingan energi eksitasi hasil eksperimen dan perhitungan

Data	Energi Eksitasi(eV)	Keterangan
Pelargonidin (Perhitungan)	2,795	Penelitian yang dilakukan
Pelargonidin (Eksperimen)	2,384	[11]

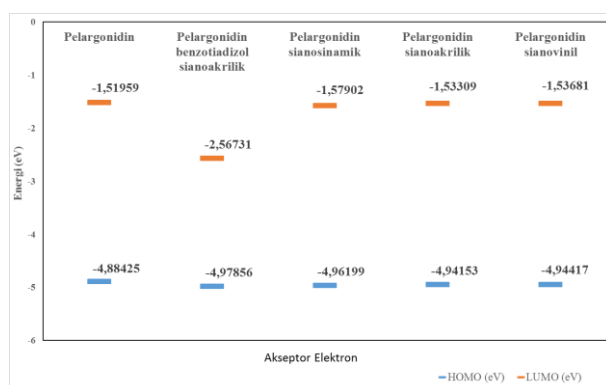
### 3.2. Optimasi Molekul dan Energi HOMO LUMO

Struktur pelargonidin yang telah dioptimasi ditampilkan pada gambar 1, struktur pelargonidin tersebut kemudian ditambahkan gugus akseptor elektron berupa asam sianokrilik, benzotiadizol sianokrilik, sianovinil, dan asam sianosinamik lalu kembali dioptimasi dengan NwChem agar mendapatkan struktur yang stabil.



**Gambar 1.** Hasil Optimasi DFT Pelargonidin

Nilai HOMO-LUMO molekul pelargonidin dan pelargonidin hasil modifikasi yang ditampilkan pada gambar 2 menjadi dasar untuk menentukan tingkat energi HOMO dan LUMO.



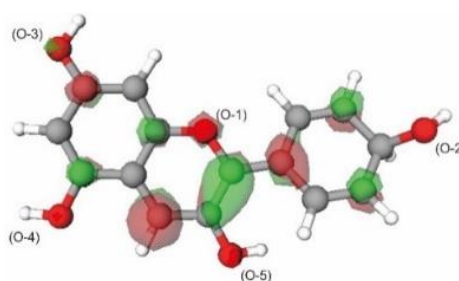
**Gambar 2.** Nilai energi HOMO-LUMO

Berdasarkan energi HOMO-LUMO tersebut, diketahui bahwa molekul yang terbaik adalah pelargonidin-benzotiadizol sianokrilik. Pada pelargonidin-benzotiadizol sianokrilik yang memiliki energi HOMO terendah menunjukkan kemampuan yang baik dalam transfer elektron dari elektrolit untuk mengisi

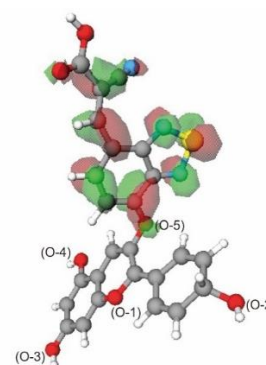
kembali *hole* pada *dye* sehingga akan mempermudah proses regenerasi ke keadaan dasarnya dan memiliki kestabilan molekul paling baik jika dibandingkan dengan molekul pewarna yang lain [12]. Selain itu selisih HOMO-LUMO pada pelargonidin benzotiadizol-sianokrilik merupakan yang terkecil apabila dibandingkan dengan modifikasi lain juga akan mempermudah eksitasi elektron [13].

### 3.3. Posisi Orbital Energi pada Keadaan LUMO

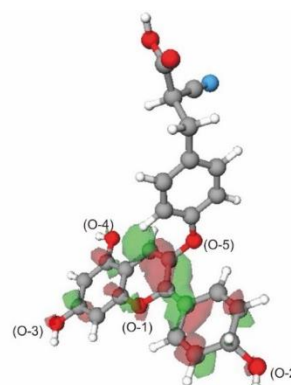
Orbital energi pada keadaan LUMO yang didapatkan dari hasil perhitungan merupakan gambaran yang menunjukkan sebaran elektron pada tereksitasi. Sebaran elektron akan menjadi pertimbangan untuk menentukan ikatan antara TiO<sub>2</sub> dengan *dye*. Gambar 3 memperlihatkan posisi orbital energi LUMO pada pelargonidin dan pelargonidin yang telah dimodifikasi dengan akseptor elektron.



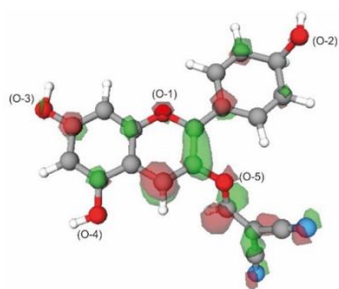
**Gambar 3** Pelargonidin pada keadaan LUMO



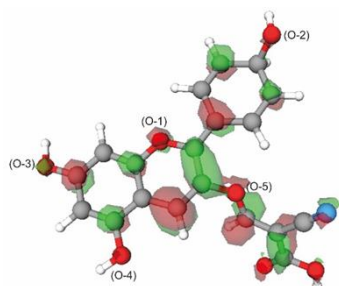
Pelargonidin+Benzotiadizol sianokrilik



Pelargonidin+Sianosinamik LUMO



Pelargonidin+Sianoakrilik



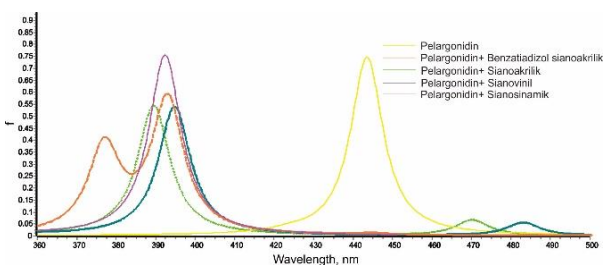
Pelargonidin+Sianoakrilik

**Gambar 4.** Modifikasi Pelargonidin pada keadaan LUMO

Berdasarkan gambar posisi orbital dari masing-masing modifikasi diketahui bahwa, hanya modifikasi dengan penambahan benzotiadizol sianoakrilik yang persebaran elektronnya terkumpul pada gugus akseptor elektron. Modifikasi lain menunjukkan elektron masih tersebar di gugus akseptor elektron dan pelargonidin. Berdasarkan hal tersebut modifikasi terbaik adalah pelargonidin-benzotiadizol sianoakrilik karena persebaran elektron yang terpusat pada gugus akseptor elektron sehingga akan mempermudah transfer elektron ke semikonduktor TiO<sub>2</sub>.

### 3.4. Spektra

Spektra absorpsi pada masing-masing molekul dihitung sesuai dengan sinar matahari dengan rentang panjang gelombang UV hingga IR. Pelargonidin memiliki banyak ikatan π terkonjugasi yang dapat mengalami transisi π→π\*. Hal ini menyebabkan probabilitas injeksi elektron ke semikonduktor cukup tinggi [14]. Pada gambar 5 ditunjukkan spektrum absorpsi pelargonidin dan modifikasinya.



**Gambar 5.** Spektrum Absorpsi

Panjang gelombang pada spektrum absorpsi berbanding terbalik dengan energi eksitasi, sementara kekuatan osilator (f) sebanding dengan intensitas

spektrum yang menjelaskan besarnya probabilitas elektron yang tereksitasi. Penambahan akseptor elektron siano akan menggeser spektrum absorpsi maksimum ke panjang gelombang yang lebih pendek dan menurunkan kekuatan osilator. Modifikasi terbaik adalah modifikasi dengan menggunakan benzotiadizol sianoakrilik karena memunculkan dua spektrum absorpsi pada panjang gelombang sinar tampak.

### 3.5. Konstanta Kopliling (V<sub>RP</sub>)

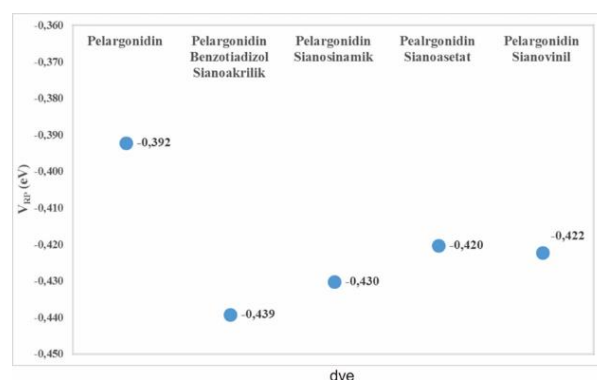
Konstanta kopliling merupakan faktor yang mempengaruhi nilai injeksi elektron dalam DSSC, nilai V<sub>RP</sub> juga merupakan salah satu faktor yang mempengaruhi efisiensi DSSC [15]. Semakin besar nilai V<sub>RP</sub> suatu dye, menunjukkan nilai injeksi elektron yang semakin besar [12]. Nilai V<sub>RP</sub> didapatkan dengan persamaan

$$|V_{RP}| = \Delta E_{RP} / 2$$

Nilai ΔE<sub>RP</sub> adalah nilai yang dapat ditentukan menggunakan perkiraan Koopmans, dengan nilai E<sub>CB</sub><sup>TiO<sub>2</sub></sup> didapatkan dari hasil eksperimen sebesar -4.1 eV.

$$\Delta E_{RP} = [E_{LUMO}^{dye} + 2E_{HOMO}^{dye}] - [E_{LUMO}^{dye} + E_{HOMO}^{dye} + E_{CB}^{TiO_2}]$$

Gambar 6 menunjukkan besarnya nilai V<sub>RP</sub> dari senyawa pewarna pelargonidin beserta modifikasi pelargonidin dengan penambahan akseptor elektron dari hasil perhitungan.



**Gambar 6.** Nilai V<sub>RP</sub> pelargonidin dan pelargonidin termodifikasi

Berdasarkan nilai V<sub>RP</sub> modifikasi pelargonidin dengan penambahan gugus siano menunjukkan hasil yang baik ditunjukkan dengan bertambahnya nilai V<sub>RP</sub> pada semua modifikasi. Modifikasi dengan penambahan benzotiadizol sianoakrilik merupakan modifikasi terbaik dengan menggunakan akseptor elektron gugus C-N dengan nilai V<sub>RP</sub> terbesar dengan nilai 0,439.

### 3.6. Efisiensi Penyerapan Cahaya (LHE)

Salah satu faktor yang berhubungan dengan efisiensi DSSC adalah LHE dye atau light harvesting efficiency dari dye yang digunakan. Nilai LHE didapatkan dengan menggunakan persamaan:

$$LHE = 1 - 10^{-f}$$



Di mana  $f$  merupakan kekuatan osilator, secara umum semakin besar kekuatan osilator maka akan memperbesar kemampuan untuk menangkap cahaya sehingga akan memperbesar efisiensi DSSC. Pada tabel 2 ditunjukkan nilai LHE Pelargonidin tanpa modifikasi dan pelargonidin yang telah dimodifikasi.

**Tabel 2.** Nilai LHE dye pelargonidin dan pelargonidin dengan modifikasi

Dye	Kekuatan Osilator	LHE
Pelargonidin	0,747	0,820
Pelargonidin-Benzatiadizol Sianoakrilik	0,557	0,723
Pelargonidin-Sianosinamik	0,314	0,514
Pelargonidin-Sianoakrilik	0,643	0,772
Pelargonidin-Sianovinil	0,537	0,709

Berdasarkan tabel 2 diketahui nilai LHE dari pelargonidin tanpa modifikasi adalah sebesar 0,82 nilai ini lebih tinggi dibandingkan dengan modifikasi yang dilakukan dengan penambahan akseptor elektron. Dari data tersebut juga diketahui bahwa modifikasi dengan penambahan akseptor elektron dengan gugus C-N menunjukkan pengaruh yang tidak baik karena menurunkan nilai LHE pada pelargonidin yang telah dimodifikasi.

### 3.7. Panjang Ikatan

Pada tabel 3 ditunjukkan panjang ikatan dye dengan semikonduktor  $\text{TiO}_2$ . Untuk menentukan terjadi atau tidaknya ikatan antara masing-masing molekul pewarna dengan semikonduktor  $\text{TiO}_2$  anatase dapat dilakukan dengan mengukur panjang ikatannya. Dua buah atom dapat dikatakan saling berikatan apabila nilai panjang ikatan yang terbentuk lebih kecil daripada jumlah jari-jari kedua atom tersebut, jumlah jari-jari atom Ti dan O adalah sebesar  $2,36 \text{ \AA}$  [16].

**Tabel 3.** Panjang ikatan dye pelargonidin dan modifikasinya dengan  $\text{TiO}_2$

Dye	Panjang Ikatan $\text{TiO}_2$ -dye ( $\text{Å}$ )	Total Jari-Jari Ti-O ( $\text{Å}$ )
Pelargonidin	1,971	2,36
Pelargonidin-Benzatiadizol Sianoakrilik	1,936	2,36
Pelargonidin-Sianosinamik	1,980	2,36
Pelargonidin-Sianoakrilik	1,997	2,36
Pelargonidin-Sianovinil	1,977	2,36

Berdasarkan data yang sudah didapatkan diketahui bahwa pelargonidin dan semua modifikasinya dapat membentuk ikatan dengan semikonduktor  $\text{TiO}_2$ . Hal ini

ditunjukkan dengan selisih panjang ikatan antara atom O dan atom Ti yang lebih kecil dibandingkan dengan jumlah jari-jari atom Ti dan O.

Modifikasi pelargonidin dengan benzatiadizol sianoakrilik merupakan modifikasi yang terbaik apabila dibandingkan dengan modifikasi lain. Karena panjang ikatan yang dimiliki oleh modifikasi pelargonidin-benzatiadizol sianoakrilik adalah yang terkecil jika dibandingkan dengan pelargonidin dan modifikasi pelargonidin lain. panjang ikatan yang lebih kecil akan mempermudah injeksi elektron dari dye ke semikonduktor.

## 4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil prediksi komputasi dengan parameter panjang ikatan, spektra absorpsi, kerapatan elektron molekul pada posisi LUMO, nilai konstanta kopling ( $V_{RP}$ ), dan selisih energi HOMO-LUMO menunjukkan bahwa modifikasi terbaik adalah modifikasi dengan menggunakan akseptor benzatiadizol sianoakrilik. Hasil ini sesuai dengan penelitian *in silico* [13] yang menunjukkan penggunaan benzatiadizol sianoakrilik meningkatkan secara signifikan nilai IPCE DSSC. Berdasarkan hasil tinjauan parameter efisiensi penyerapan cahaya (LHE) menunjukkan penambahan akseptor elektron pada pelargonidin tidak memberikan dampak yang baik, hal ini ditunjukkan dengan pelargonidin tanpa modifikasi yang memiliki nilai LHE terbesar.

## Ucapan Terima Kasih

Penyusun mengucapkan terima kasih kepada bapak Sudarlin yang telah yang telah memberikan bantuan ide dan masukan serta membantu penyusunan sehingga tulisan ini dapat diselesaikan. Program studi kimia dan laboratorium komputer UIN Sunan Kalijaga yang telah menyediakan fasilitas.

## Daftar Pustaka

- [1] Mao Liang, Wei Xu, Fengshi Cai, Peiquan Chen, Bo Peng, Jun Chen, Zhengming Li, New Triphenylamine-Based Organic Dyes for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells, *The Journal of Physical Chemistry C*, 111, 11, (2007) 4465–4472 <http://doi.org/10.1021/jp067930a>
- [2] Andery Lim, N. T. R. N. Kumara, Ai Ling Tan, Aminul Huq Mirza, R. L. N. Chandrakanthi, Mohammad Iskandar Petra, Lim Chee Ming, G. K. R. Senadeera, Piyasiri Ekanayake, Potential natural sensitizers extracted from the skin of *Canarium odontophyllum* fruits for dye-sensitized solar cells, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 138, (2015) 596–602 <https://doi.org/10.1016/j.saa.2014.11.102>
- [3] Yongzhen Wu, Weihong Zhu, Organic sensitizers from D- $\pi$ -A to D-A- $\pi$ -A: effect of the internal electron-withdrawing units on molecular absorption, energy levels and photovoltaic

- performances, *Chemical Society Reviews*, 42, 5, (2013) 2039–2058 <https://doi.org/10.1039/C2CS35346F>
- [4] Affandi, Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa pewarna Sel Surya Tersensitasi (DSSC). Program Studi Kimia, UIN Sunan Kalijaga, Yogyakarta
- [5] Yuanzuo Li, Chaofan Sun, Peng Song, Fengcai Ma, Yanhui Yang, Tuning the Electron-Transport and Electron-Accepting Abilities of Dyes through Introduction of Different  $\pi$ -Conjugated Bridges and Acceptors for Dye-Sensitized Solar Cells, *ChemPhysChem*, 18, 4, (2017) 366–383 <https://doi.org/10.1002/cphc.201601101>
- [6] Peng Qin, Hongjun Zhu, Tomas Edvinsson, Gerrit Boschloo, Anders Hagfeldt, Licheng Sun, Design of an Organic Chromophore for P-Type Dye-Sensitized Solar Cells, *Journal of the American Chemical Society*, 130, 27, (2008) 8570–8571 <http://doi.org/10.1021/ja8001474>
- [7] Kalpana Galappaththi, Piyasiri Ekanayake, Mohammad Iskandar Petra, Computational study of modification of cyanidin as high efficient organic sensitizer for dye sensitized solar cells, *Scientia Bruneiana*, 15, special issue, (2016) 153–161
- [8] I. N. Obotowo, I. B. Obot, U. J. Ekpe, Organic sensitizers for dye-sensitized solar cell (DSSC): Properties from computation, progress and future perspectives, *Journal of Molecular Structure*, 1122, (2016) 80–87 <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.05.080>
- [9] Jie Feng, Yang Jiao, Wei Ma, Md K. Nazeeruddin, Michael Grätzel, Sheng Meng, First Principles Design of Dye Molecules with Ullazine Donor for Dye Sensitized Solar Cells, *The Journal of Physical Chemistry C*, 117, 8, (2013) 3772–3778 <https://doi.org/10.1021/jp310504n>
- [10] Yavar T. Azar, Mahmoud Payami, Efficiency enhancement of black dye-sensitized solar cells by newly synthesized D- $\pi$ -A coadsorbents: a theoretical study, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16, 20, (2014) 9499–9508 <https://doi.org/10.1039/C4CP00598H>
- [11] J. B. Harborne, Spectral methods of characterizing anthocyanins, *Biochemical Journal*, 70, 1, (1958) 22 <http://doi.org/10.1042/bj0700022>
- [12] Muhammad Imran Abdullah, Muhammad Ramzan Saeed Ashraf Janjua, Muhammad Faizan Nazar, Asif Mahmood, Quantum Chemical Designing of Efficient TC4-Based Sensitizers by Modification of Auxiliary Donor and  $\pi$ -Spacer, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 86, 11, (2013) 1272–1281 <https://doi.org/10.1246/bcsj.20130146>
- [13] Bong-Gi Kim, Kyeongwoon Chung, Jinsang Kim, Molecular Design Principle of All-organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells, *Chemistry – A European Journal*, 19, 17, (2013) 5220–5230 <https://doi.org/10.1002/chem.201204343>
- [14] Hardeli, Suwardani, Riky, Fernando T, Maulidis, Silvia Ridwan, Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Berbasis Nanopori TiO<sub>2</sub> Menggunakan Antosianin dari Berbagai Sumber Alami, *Semirata FMIPA Universitas Lampung*, Bandar Lampung, (2013)
- [15] Samaneh Bagheri Novir, Seyed Majid Hashemianzadeh, Quantum chemical investigation of structural and electronic properties of trans- and cis-structures of some azo dyes for dye-sensitized solar cells, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1102, (2017) 87–97
- [16] Citra Deliana Dewi Sundari, Investigasi TD-DFT pada Struktur Elektronik dan Spektrum Absorpsi Kompleks cis-(Ru(H<sub>2</sub>dc bpy)<sub>2</sub>(SCN) dan cis (Ru(H<sub>2</sub>dc biq)<sub>2</sub>(SCN<sub>2</sub>) Fasa Gas dan Fasa Larutan Etanol Untuk Aplikasi DSSC, Departemen Kimia, Institut Teknologi Bandung, Bandung