

**MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA KUINOLIN UNTUK
MENINGKATKAN KINERJA SELSURYA MENGGUNAKAN METODE
DFT**

Elvira Deswita¹, Imelda^{1,2}, Rifky Farhan. S¹, Oesamah¹

^{1,2} Program Studi Kimia, Universitas Andalas

Email : imelda@sci.unand.ac.id

Abstract : In this study, Quinoline-based D- π -A organic dye was used which consisted of 4 dyes with various donor chains of aniline (Q1), indoline (Q2), phenol (Q3) and coumarin (Q4). The calculation method used is the DFT/TD-DFT (Density Functional Theory/Time Dependent-DFT) method with a B3LYP / 6-31G basis set. The aim of this study was to determine the modification of the quinoline-based D- π -A dye with variations of the donor chains are efficient as a sensitizer on DSSC. Analysis based on the parameters of the bandgap, wavelength absorption, excitation energy, ΔG^{inject} , ΔG^{reg} , oscillator strength, dihedral angle, bond length, dipole moment, LHE and Voc. The result of the study show Q2 with the name 6-(indolin-5-yl) quinoline-2-carboxylic acid is the best dye with a bandgap is 2,6204 eV, absorption wavelength is 566,80 nm, excitation energy is 2,1875 eV, ΔG^{inject} is -3,114 eV, ΔG^{reg} 0,1239 eV. Therefore, it can be concluded that the modification of quinoline dye to D- π -A type can improve the performance of DSSC.

Keywords : Pigmen, Quinoline, D- π -A type, DFT, DSSC.

Abstrak : Pada penelitian ini, zat warna berbasis kuinolin dimodifikasi dengan tipe D- π -A yang terdiri dari 4 zat warna dengan variasi rantai donor anilin (Q1), indolin (Q2), fenol (Q3) dan kumarin (Q4). Metode perhitungan yang digunakan yaitu metode DFT/TD-DFT (Density Functional Theory/Time Dependent-DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan modifikasi zat warna tipe D- π -A berbasis kuinolin dengan variasi rantai donor yang efisien sebagai sensitizer pada DSSC. Analisis berdasarkan parameter nilai bandgap, serapan panjang gelombang cahaya, energi eksitasi, ΔG^{inj} , ΔG^{reg} , oscillator strength, sudut dihedral, panjang ikatan, momen dipol, LHE dan Voc. Dari hasil penelitian menunjukkan zat warna Q2 dengan nama 6-(indolin-5-yl) quinoline-2-carboxylic acid merupakan zat warna terbaik dengan nilai bandgap sebesar 2,6204 eV, serapan panjang gelombang cahaya sebesar 566,80 nm, energi eksitasi sebesar 2,1875 eV, ΔG^{inj} -3,114 eV, ΔG^{reg} 0,1239 eV. Oleh karena itu, dapat disimpulkan bahwa modifikasi zat warna kuinolin menjadi tipe D- π -A mampu meningkatkan kinerja dari DSSC.

Kata Kunci : Zat Warna, Kuinolin, Tipe D- π -A, DFT, DSSC.

1. PENDAHULUAN

Pencarian energi terbarukan yang lebih bersih dan hemat biaya telah mengarahkan banyak penelitian pada Dye-Densitizer Solar Cell (DSSC) (Obotowo et al., 2016). Bahan fotovoltaik organik (OPV) seperti dye sensitizer solar Cell (DSSC) sangat menarik, karena proses pembuatannya yang sederhana, ramah lingkungan dan biaya bahan rendah dibandingkan dengan sel surya berbasis silikon konvensional dan polimer (Arooj &

Wang, 2019).

Beberapa penelitian telah dilakukan untuk meningkatkan efisiensi peralatan DSSC dengan memodifikasi struktur zat warna. Zat warna berperan sebagai sensitizer cahaya pada DSSC. Zat warna organik yang tersedia melimpah di alam dan lebih ramah lingkungan tapi masih memiliki efisiensi serapan cahaya yang rendah dapat dimodifikasi dengan berbagai tipe seperti D-A- π -A (Arslan et al., 2021), D-D- π -A (Han et al., 2016)(Qian et al., 2016) dan D- π -A

Elvira Deswita, Imelda, Rifky Farhan. S, Oesamah (Eiamprasert et al., 2018). Berdasarkan data penelitian, sebagian besar sensitizer organik dibuat dengan susunan (D- π -A) karena menghasilkan efisiensi serapan cahaya yang lebih baik. Dimana D merupakan gugus donor elektron, π merupakan jembatan terkonjugasi, dan A merupakan akseptor elektron (Muslim, Muhamad Imam, 2019).

Kuinolin juga dikenal sebagai benzopiridin dan 1-aza-naftalen, adalah sebuah bahan baku penting untuk pewarna, metalurgi, cat, herbisida, farmasi dan industri karet (Luo et al., 2020). kuinolin tersedia secara alami pada tar batubara, tumbuhan kina, daun sampang, kayu manis, dll. Kuinolin memiliki struktur cincin ganda yang menyatu dengan cincin piridin dari dua atom karbon yang berdekatan dengan cincin benzena. Kuinolin memiliki struktur cincin heterosiklik yang mengandung sepuluh elektron π dan satu atom nitrogen yang mampu mendonorkan elektron. Kuinolin adalah molekul bersifat menarik elektron yang cukup kuat karena afinitas elektronnya yang tinggi yang dihasilkan dari atom nitrogen tak jenuh. Namun kuinolin murni belum menghasilkan serapan cahaya yang baik sehingga perlu dimodifikasi. Berdasarkan strukturnya kuinolin sangat potensial dijadikan sebagai rantai π -konjugasi pada zat warna tipe D- π -A (Arslan et al., 2020).

Sangat sedikit laporan tentang penerapan aplikasi unit kuinolin untuk DSSC (Arslan et al., 2020). Oleh karena itu penulis tertarik untuk melakukan penelitian mengenai modifikasi zat warna tipe D- π -A berbasis kuinolin secara komputasi. Dimana pada penelitian sebelumnya dijelaskan bahwa memodifikasi rantai donor, π -spacer dan akseptor dalam struktur meningkatkan kemampuan penyerapan cahaya dari zat warna yang mengarah pada efisiensi DSSC yang lebih tinggi (Arslan et al., 2020). Metode kimia komputasi menawarkan fasilitas untuk merancang tingkat molekuler dan struktur molekuler, merekayasa donor, π

konjugasi dan akseptor dari studi sensitizer yang ada (Obotowo et al., 2016) sehingga didapatkan struktur zat warna kuinolin tipe D- π -A yang efisien terhadap serapan cahaya zat warna pada DSSC.

2 METODE PENELITIAN

Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini meliputi perangkat keras (hardware) berupa Laptop AMD Ryzen 3 3200U with Radeon Vega Mobile Gfx 2.60 GHz RAM 8 GB dan perangkat lunak (software) berupa program Gaussian 16W dan Gauss view 6.0.

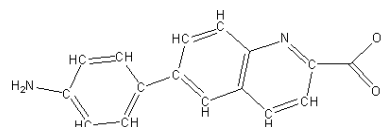
Model Molekul

Model molekul pada penelitian ini adalah: Molekul zat warna Tipe D- π -A berbasis kuinolin.

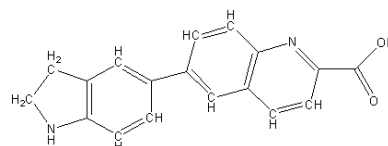
Prosedur Penelitian

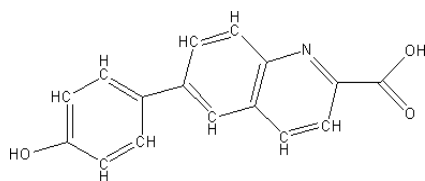
Penggambaran Struktur Zat Warna Tipe D- π -A Berbasis Kuinolin. Struktur molekul dibuat menggunakan Gauss View 6,0. Model molekul pada penelitian ini adalah zat warna tipe D- π -A berbasis kuinolin dengan variasi rantai donor. Zat warna tipe D- π -A berbasis kuinolin sebagai rantai π -konjugasi dan divariasikan menjadi 4 rantai donor dengan asam asetat sebagai akseptor seperti terlihat pada Gambar 1.

Zat warna Q1

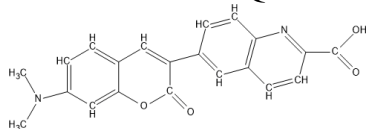


Zat warna Q2





Zat Warna Q4



Gambar 1. Struktur zat warna kuinolin (Q) 1-4

Mengoptimasi Zat Warna Kerangka Tipe D- π -A dan Perhitungan. Struktur molekul zat warna tipe D- π -A digambar pada program perangkat lunak Gauss View 6.0 kemudian dilakukan optimasi geometri struktur. Seluruh input file zat warna berbasis kuinolin dioptimasi menggunakan program Gaussian 16 W. Perhitungan menggunakan metode DFT dan TD-DFT dengan basis set B3LYP/6-31G.

Analisis Efisiensi Serapan Cahaya Zat Warna. Zat warna organik yang telah optimal disimpan berupa file chk, dengan menggunakan menu display. Data setelah dilakukan optimasi geometri molekul disimpan di notepad. Luaran data dapat dibaca berdasarkan file chk dan notepad yang disimpan terdiri dari struktur molekul, pita elektron, sifat pita eksitasi optik dan sifat transpor muatan. Berdasarkan output data kemudian didapatkan nilai:

1. Parameter elektronik yaitu berupa contour HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) dan LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), EHOMO, ELUMO dan bandgap (ΔE)
2. Parameter optik berupa spektrum absorpsi, panjang gelombang eksitasi (λ eksitasi), LHE (light harvesting efficiency), oscillator strength (f)
3. Parameter listrik berupa rapat arus (J_{sc}), tegangan (V_{oc}) dan Efisiensi konversi energi (η)

4. Beberapa persamaan yang digunakan untuk perhitungan yaitu:

$$\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (1)$$

$$LHE(\lambda) = 1 - 10^{-f} \quad (2)$$

$$\frac{J_{sc}}{\eta_{regen} d \lambda} = \int_{\lambda} LHE(\lambda) \Phi_{inject} \eta_{collect} \quad (3)$$

$$V_{oc} = E_{LUMO} - E_{CB}^{SC} \quad (4)$$

$$\eta = \frac{J_{sc} V_{oc} d}{I_s} \quad (5)$$

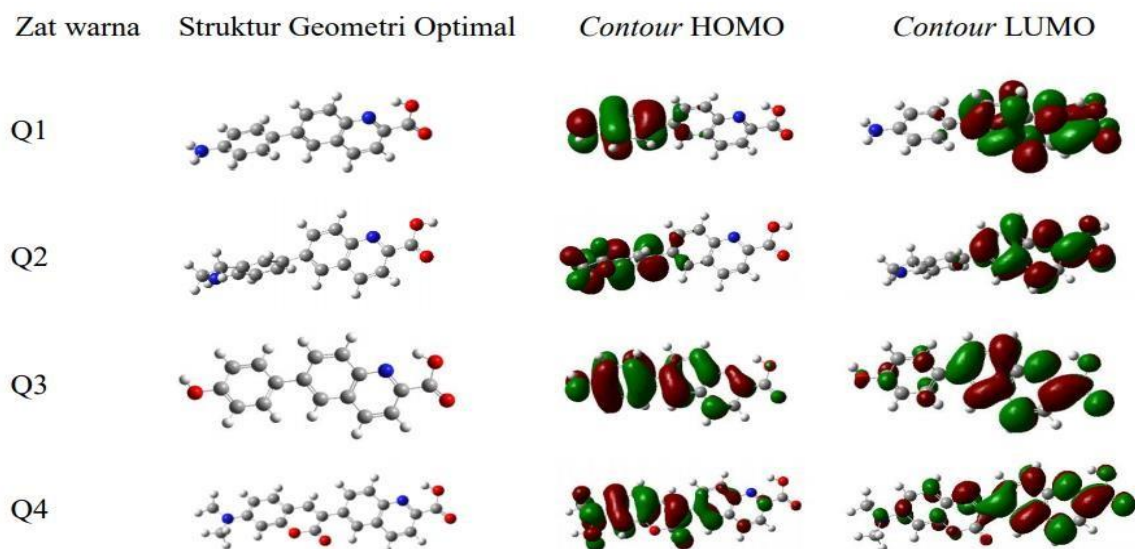
(Galappaththi et al., 2018)

Berdasarkan parameter-parameter diatas kemudian dilakukan analisis efisiensi zat warna sebagai sensitizer pada DSSC.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN Struktur Geometri Optik Variasi Rantai Donor.

Optimasi geometri dilakukan untuk mendapatkan struktur molekul yang optimal. Pada penelitian ini struktur dioptimalkan dari keadaan dasar 4 zat warna variasi rantai donor untuk menentukan sifat elektronik dari molekul zat warna tersebut seperti nilai bandgap (celah energi), energi HOMO, energi LUMO, panjang gelombang serta contour HOMO-LUMO. Struktur geometri dari keempat zat warna variasi rantai donor dioptimasi dengan menggunakan basis set B3LYP/6-31G. hasil optimasi berupa contour HOMO-LUMO zat warna dapat dilihat pada Gambar 2 struktur geometri optimal, contour HOMO dan LUMO bisa dilihat pada Gambar 2.

Contour HOMO-LUMO menunjukkan kerapatan elektron. contour HOMO menunjukkan kerapatan elektron pada pita HOMO sebagai pendonor elektron sedangkan contour LUMO menunjukkan kerapatan elektron pada pita LUMO sebagai akseptor elektron (Amkassou & Zgou, 2019)



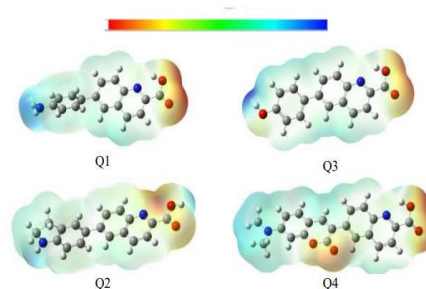
Gambar 2. Struktur geometri optimal (warna atom: merah = oksigen, biru; nitrogen, abu = karbon, putih = hydrogen), contour HOMO dan LUMO (warna hijau: OM Bonding, merah: OM anti bonding) zat warna Q1-Q4 (Q = Kuinolin).

Sedangkan kerapatan elektron pada contour LUMO sebagian besar berada pada rantai π -konjugasi dan akseptor yang terdistribusi pada atom dengan atom oksigen (O) pada asam format. Hal ini menunjukkan bahwa rantai donor berperan sebagai pendorong elektron elektron dan asam format berperan sebagai penarik elektron, sedangkan rantai π -konjugasi berperan sebagai jembatan. Sehingga ketika zat warna dikenai oleh cahaya atau foton maka akan terjadi resonansi dari rantai donor ke asam format.

ESP (Electrostatic Surface Potential)

Electrostatic Surface Potential merupakan suatu parameter yang berfungsi untuk memprediksi daerah yang bersifat elektronegatif maupun elektropositif. Urutan meningkatnya keelektronegatifan ditunjukkan oleh distribusi warna biru <cyan <kuning <merah (Li et al., 2019). Warna biru menunjukkan sifat elektropositif sehingga mudah mendonorkan elektron dan warna merah menunjukkan sifat elektronegatif sehingga mudah menarik elektron. Semakin elektronegatif suatu atom atau molekul maka akan semakin mudah untuk menarik elektron kearahnya. Peta ESP ditunjukkan pada

Gambar 3.



Gambar 3. Peta ESP Zat Warna Q1-Q4

Peta ESP zat warna Q1-Q4 yang diperlihatkan pada Gambar 3 menunjukkan bahwa variasi rantai donor bersifat elektropositif yang ditandai dengan distribusi warna biru dan asam format lebih bersifat elektronegatif yang tandai dengan sistribusi warna merah, hal ini karena pada asam format terdapat atom O yang memiliki sifat elektronegatif yang besar sehingga ia kuat menarik elektron kearahnya.

Energi Frontier dan BandGap (ΔE)

Ketika zat warna dikenai oleh foton maka akan terjadi eksitasi elektron dari pita HOMO ke pita LUMO. Jarak antara pita HOMO ke pita LUMO disebut dengan bandgap. Hukum plank menyatakan bahwa $\Delta E = hc/\lambda$, yang berarti bahwa semakin kecil nilai ΔE maka besarnya panjang gelombang yang

Elvira Deswita, Imelda, Rifky Farhan. S, Oesamah diserap semakin besar. Hal ini karena semakin mudahnya proses eksitasi elektron dari pita HOMO ke pita LUMO yang menyebabkan kepekaan terhadap cahaya semakin meningkat (Imelda et al., 2020). Data Tabel 1 menunjukkan energi HOMO-LUMO dan bandgap dari zat warna Q1-Q4.

Tabel 1. Energi HOMO-LUMO dan BandGap zat warna Q1-Q4

Zat warna (dye)	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE (eV)
Kuinolin	-5,701	-1,630	4,071
Q1	-5,430	-2,550	2,880
Q2	-4,923	-2,304	2,620
Q3	-6,019	-2,636	3,387
Q4	-5,612	-2,592	3,019

Dapat dilihat pada Tabel 1. nilai bandgap dari keempat zat warna yang divariasikan rantai donornya memiliki nilai yang lebih kecil dari kuinolin tanpa dimodifikasi. Hal ini menunjukkan bahwa semakin panjang resonansi ikatan π maka akan semakin banyak elektron yang terkeksitasi sehingga jarak anatar pita HOMO ke pita LUMO semakin kecil. Dari tabel nilai bandgap yang terkecil yaitu pada zat warna Q2 dengan nilai 2,620 eV. Zat warna Q2 memiliki atom N pada rantai donor dan π -konjugasi, dimana keelektronegatifannya lebih rendah dari atom O (3,44) yaitu 3,04. Jari-jari atom N juga lebih kecil dari atom O (Imelda et al., 2020). Oleh karena itu, atom O pada rantai akseptor lebih mudah menarik elektron dari atom N pada rantai donor dan rantai π -konjugasi. Atom nitrogen (N) yang lebih elektronegatif dari atom karbon (C) akan lebih mudah menarik elektron dari atom-atom yang kurang elektronegatif (Imelda et al., 2020)

Sudut Dihedral dan Panjang Ikatan

Nilai panjang ikatan dan sudut dihedral zat warna Q1-Q4 disajikan pada Tabel 2.

Tabel 2. Panjang ikatan dan sudut dihedral zat warna Q1-Q4

Zat Warna (Dye)	θ_1 (°)	θ_2 (°)	d_1 (Å)	d_2 (Å)
Q1	120,49	115,34	1,492	1,461
Q2	120,58	120,16	1,494	1,441
Q3	120,93	114,96	1,469	1,473
Q4	121,77	115,29	1,432	1,467

Sudut dihedral dan panjang ikatan merupakan suatu parameter untuk menentukan struktur geometri molekul. Sudut dihedral merupakan sudut yang terbentuk antara rantai donor dengan π -konyugasi dan rantai π -konjugasi dengan akseptor dengan bidang yang dibentuk oleh tiga atom, sedangkan panjang ikatan (d) merupakan jarak antara dua inti atom C antara yang saling terikat antara rantai donor dengan π -konjugasi dan rantai π -konyugasi dengan akseptor. Sudut dihedral menunjukkan keplanaran dari suatu zat warna. Apabila sudut dihedral mendekati 0° dan 180° maka rantai tersebut koplanar (sebidang). Semakin planar molekul dan semakin pendek panjang ikatan maka semakin mudah transfer elektron terjadi didalam molekul (Li et al., 2019).

Berdasarkan Tabel 2 zat warna Q1-Q4 memiliki sudut dihedral yang hampir sama yaitu mendekati 120° , hal ini menunjukkan bahwa zat warna kurang planar tetapi memiliki nilai yang hampir sama sehingga kemampuan transfer elektron juga hampir sama. Sedangkan panjang ikatan zat warna Q1-Q4 memiliki nilai lebih pendek dari daripada ikatan tunggal C-C yaitu sebesar 1,54 Å. Hal tersebut karena adanya resonansi elektron π dalam molekul sehingga memperpendek ikatan C-C tunggal.

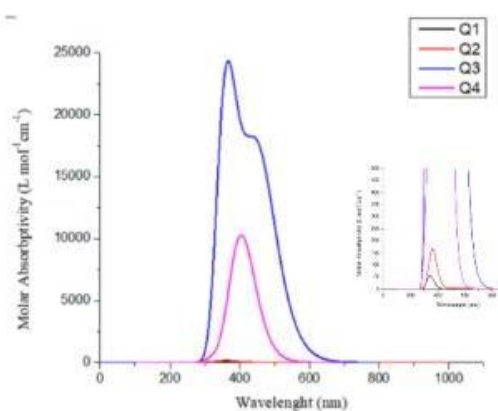
Spektrum Absorpsi

Spektrum absorpsi dari zat warna Q1-Q4 diperlihatkan pada Gambar 4 dan transisi elektronik diperlihatkan pada Tabel 3.

Pada Gambar 4 terlihat puncak-puncak spektrum dari zat warna, munculnya puncak spektrum karena adanya transisi elektronik pada molekul zat warna. Zat warna yang memiliki absorbtivitas molar yang terbesar ditunjukkan oleh zat warna

Elvira Deswita, Imelda, Rifky Farhan. S, Oesamah

Q4 dengan nilai 0,575 dan zat warna yang menghasilkan serapan cahaya yang terbesar adalah zat warna Q2.



Gambar 4. Spektrum absorpsi zat warna Q1-Q4

Pada Tabel 3 dapat dilihat bahwa serapan cahaya kuinolin yang telah

Tabel 3. Transisi elektronik zat warna Q1-Q4

Zat warna	Keadaan eksitasi	$\lambda_{\text{eksitasi}}$ (nm)	E_{eksitasi} (eV)	Konfigurasi OM	(f)
Kuinolin	1	417,86	2,9671	H→L = 99,49 %	0,0014
	2	298,19	4,1579	H→L+1 = 99,52%	0,0000
	3	291,66	4,2510	H-2→L+1 = 17,69 % H-3→L = 97,56 %	0,0657
Q1	1	513,52	2,4144	H→L = 99,71 %	0,000
	2	346,42	3,5790	H-3→L = 97,45 % H-3→L+1 = 16,71 %	0,007
	3	338,37	3,6642	H→L+1 = 99,60 %	0,007
Q2	1	566,80	2,1875	H→L = 99,72 %	0,0001
	2	361,61	3,4287	H-3→L = 99,56 %	0,0018
	3	359,86	3,4453	H→L+1 = 99,57 %	0,0023
Q3	1	404,82	3,0627	H→L = 98,79 %	0,2532
	2	344,74	3,5964	H-2→L = 97,24 % H-2→L+1 = 16,33 %	0,0007
	3	327,41	3,7868	H-4→L = 18,53 % H-1→L = 80,62 % H→L+1 = 52,56 %	0,0109
Q4	1	454,10	2,7303	H→L = 99,10 %	0,4051
	2	363,51	3,4108	H-1→L = 17,57% H→L+1 = 95,89 %	0,5752
	3	347,67	3,5661	H-3→L = 95,46 % H-3→L+1 = 18,33 % H-3→L+2 = 16,45 %	0,0011

Zat warna yang memiliki efisisensi serapan cahaya yang baik yaitu yang memiliki absroptivitas molar yang tinggi dan serapan cahaya panjang gelombang yang besar. Akan tetapi

dimodifikasi memiliki serapan yang lebih besar dibandingkan dengan kuinolin tanpa modifikasi. Serapan panjang gelombang semua zat warna berada di wilayah sinar UV dan sinar tampak dan serapan yang mempunyai serapan panjang gelombang terbesar yaitu zat warna Q2 dengan nilai 566,80 nm dan memiliki energi eksitasi 2,1875 eV.

Data Tabel 3 pada konfigurasi OM (Orbital Molekul) menunjukkan transisi mayor dihasilkan dari H→L, H→L+1, H-3→L, H-2→L, H-1→L dan transisi minor dihasilkan dari H-2→L+1, H-3→L+1, H-4→L, H-1→L, H-3→L+1, H-3→L+2.

panjang gelombang lebih berpengaruh terhadap efisisensi serapan cahaya (Pratiwi et al., 2017) Dari data yang didapatkan zat warna yang mempunyai efisisensi yang paling baik adalah zat warna Q2.

Elvira Deswita, Imelda, Rifky Farhan. S, Oesamah Momen Dipol, ΔG^{inject} dan ΔG^{reg}

Nilai momen dipol, ΔG^{inject} , ΔG^{reg} zat warna Q1-Q4 diperlihatkan pada Tabel 4.

Tabel 4. Momen dipol, ΔG^{inject} dan ΔG^{reg} zat warna Q1-Q4

Zat warna (Dye)	Momen Dipol (D)	ΔG^{inject} (eV)	ΔG^{reg} (eV)
Q1	35.0042	-3,8445	0,6301
Q2	33.3062	-3,1114	0,1239
Q3	22.4182	-5,0816	1,2189
Q4	36.2116	-4,3418	0,8115

Tabel 4 momen dipol, ΔG^{inject} dan ΔG^{reg} zat warna Q1-Q4 Momen dipol, Energi Bebas Gibbs Injeksi (ΔG^{inject}) dan Energi Regenrasi (ΔG^{reg}) adalah parameter penting dalam penentuan kinerja DSSC. Momen dipol memberikan informasi tentang struktur elektronik dari eksitasi elektron. momen dipol merupakan suatu proses pengkutuban oleh suatu molekul zat warna yang terjadi akibat adanya perbedaan keelektronegatifan. pada rantai donor akan terjadi kutub positif dikarenakan elektron akan bergerak dari rantai donor ke rantai akseptor melalui rantai π -konjugasi. Sedangkan pada rantai akseptor akan terbentuk kutub negatif karena menerima elektron dari rantai donor. Semakin besar nilai momen dipol maka akan semakin mudah terjadinya transfer elektron.

Dari tabel zat warna Q4 memiliki nilai momen dipol yang paling besar dikarenakan pada zat warna Q4 ada unsur O pada rantai donor sehingga mudah menarik elektron dari atom H dan C pada metil dan pada rantai akseptor terdapat atom O sehingga semakin mudah menarik elektron kearah dirinya. ΔG^{inject} menunjukkan kemudahan suatu zat dalam menginjeksikan elektron dalam sel, semakin negatif nilai ΔG^{inject} maka akan semakin mudah zat dalam menginjeksikan elektronnya, karena ΔG^{inject} . Dari Tabel 4 zat warna Q3 memiliki ΔG^{inject} paling negatif dengan

nilai -5,0816 sedangkan zat warna Q1, Q2 dan Q4 memiliki nilai ΔG^{inject} hampir sama yang menunjukkan bahwa zat warna Q3 sangat mudah menginjeksikan elektronnya dibandingkan dengan zat warna lainnya. Nilai ΔG^{reg} atau kemampuan regenerasi zat warna yang menunjukkan kemudahan transfer elektron dari elektrolit I-/I3- ke pita HOMO zat warna. Nilai ΔG^{reg} yang ideal untuk regenrasi zat warna berada pada range 0,2 eV – 0,3 eV (Anders Hagfeldt and Michael Gratzel, 2000). Berdasarkan Tabel 4 nilai ΔG^{reg} yang memenuhi persyaratan adalah zat warna Q2 dengan nilai 0,1239 sedangkan untuk Q1, Q3 dan Q4 berada diluar range yang menunjukkan bahwa terjadi pelepasan potensial selama proses regenerasi zat warna (Estrella et al., 2019).

Analisis Sifat Listrik

Kemampuan zat warna untuk menghasilkan arus listrik dipengaruhi oleh beberapa parameter diantaranya nilai Voc, Jsc dan efesiensi daya DSSC (η). Efesiensi daya DSSC dipengaruhi oleh nilai Jsc, Voc, dan intensitas cahaya (I). Nilai efesiensi daya DSSC akan meningkat seiring dengan peningkatan nilai Jsc dan Voc serta penurunan intensitas cahaya. Nilai Jsc dipengaruhi oleh nilai LHE dan panjang gelombang (λ) yang ditunjukkan pada persamaan (3) dimana semakin besar nilai LHE dan panjang gelombang maka nilai Jsc akan semakin besar pula. Adapun nilai LHE dan Voc dari zat warna Q1-Q4 ditunjukkan pada Tabel 5.

Tabel 5. Nilai LHE dab Voc zat warna Q1-Q4

Zat warna (dye)	LHE	Voc (eV)
Q1	0,0016	1,45004
Q2	0,0053	1,6965
Q3	0,4418	1,36843
Q4	0,7341	1,40774

Berdasarkan tabel diatas zat warna yang mempunyai nilai LHE dan Voc yang paling besar adalah zat warna Q4 dan Q2. Nilai efesiensi daya DSSC akan

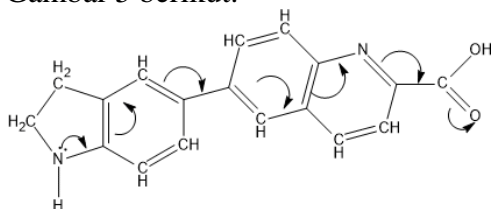
Elvira Deswita, Imelda, Rifky Farhan. S, Oesamah

meningkat apabila nilai intensitas cahaya yang dihasilkan rendah. Semakin rendah intensitas cahaya yang dihasilkan maka cahaya dapat diserap pada panjang gelombang yang lebih besar sehingga bandgap yang dihasilkan semakin kecil. Oleh karena itu, untuk variasi donor diprediksi zat warna Q2 memiliki efisiensi yang lebih baik untuk DSSC daripada 3 zat warna lainnya. Adanya gugus NH_2 yang memiliki pasangan elektron bebas menyebabkan kemampuan donor elektron indolin lebih kuat dan resonansi elektron π pada anilin juga lebih panjang dibanding molekul donor yang lain.

0,00414; 0,00528, V_{oc} 1,6965 eV, ΔG^{inject} -3,1114 eV dan ΔG^{reg} 0,1239 eV. Oleh karena itu, modifikasi zat warna kuinolin menjadi tipe D- π -A mampu meningkatkan kinerja dari DSSC.

Resonansi elektron π pada zat warna Q2

Berdasarkan contour HOMO-LUMO dan ESP maka dapat diperkirakan resonansi elektron π yang terjadi pada zat warna Q2 seperti diperlihatkan pada Gambar 5 berikut.



Gambar 5. Resonansi elektron π zat warna terbaik

4 KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan secara komputasi dengan metode DFT dan basis set B3LYP/6-31G maka dapat disimpulkan bahwa modifikasi struktur kuinolin mendjadi tipe D- π -A mampu meningkatkan efisiensi serapan cahaya zat warna diketahui dengan meningkatnya serapan cahaya sampai daerah sinar tampak (566,80 nm). Meningkatnya efisien serapan cahaya zat warna akan meningkatkan efisiensi daya listrik DSSC. Zat warna terbaik sebagai sensitizer adalah zat warna 2 dengan nama *6-(indolin-5-yl) quinoline-2-carboxylic acid* dengan nilai bandgap 2,6204 eV, λ 566,80 nm, LHE 0,00023;

DAFTAR PUSTAKA

- Amkassou, A., & Zgou, H. (2019). New dyes for DSSC containing thienylen-phenylene: A theoretical investigation. *Materials Today: Proceedings*, 13, 569–578. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.04.015>
- Anders Hagfeldt and Michael Gratzel. (2000). Hagfeldt, Grätzel - 2000 - Molecular Photovoltaics - Accounts of Chemical Research.pdf - Unknown.pdf - Unknown.pdf. *Accounts of Chemical Research*, 33(5), 269–277.
- Arooj, Q., & Wang, F. (2019). Switching on optical properties of D-II-A DSSC sensitizers from II-spacers towards machine learning. *Solar Energy*, 188(June), 1189–1200. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.06.044>
- Arslan, B. S., Arkan, B., Gezgin, M., Derin, Y., Avcı, D., Tutar, A., Nebioğlu, M., & Şişman, İ. (2021). The improvement of photovoltaic performance of quinoline-based dye-sensitized solar cells by modification of the auxiliary acceptors. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 404(June 2020), 1–10. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2020.112936>
- Arslan, B. S., Ülüş, S. N., Gezgin, M., Arkan, B., Güzel, E., Avcı, D., Nebioğlu, M., & Şişman, İ. (2020). Insight into the effects of the donors and pi-spacers on the photovoltaic performance of quinoline and pyridocarbazole based DSSCs. *Optical Materials*, 106(February). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.109974>
- Eiamprasert, U., Sudchanham, J., Surawatanawong, P., Pakawatpanurut, P., & Kiatisevi, S. (2018). Additional donor bridge as a design approach for multi-anchoring dyes for highly efficient dye-sensitized solar cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 352, 86–97. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2017.10.033>
- Estrella, L. L., Lee, S. H., & Kim, D. H. (2019). New semi-rigid triphenylamine donor moiety for D- π -A sensitizer: Theoretical and experimental investigations for DSSCs. *Dyes and Pigments*. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2019.02.002>
- Galappaththi, K., Ekanayake, P., & Petra, M. I. (2018). A rational design of high efficient and low-cost dye sensitizer with exceptional absorptions: Computational study of cyanidin based organic sensitizer. *Solar Energy*, 161(December 2017), 83–89. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.12.027>
- Han, F., Wang, Y., Wan, Z., Jia, C., Luo, J., & Yao, X. (2016). Enhanced photovoltaic performances of dye-sensitized solar cells sensitized with D-D- π -A phenothiazine-based dyes. *Synthetic Metals*, 221, 95–102. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2016.08.011>
- 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/10.14445/23939133/ijac-v7i2p111>
- Li, Y., Liu, J., Liu, D., Li, X., & Xu, Y. (2019). D-A- π -A based organic dyes for efficient DSSCs: A theoretical study on the role of π -spacer. *Computational Materials Science*. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.01.033>

Elvira Deswita, Imelda, Rifky Farhan. S, Oesamah

Luo, Y., Yue, X., Wei, P., Zhou, A., Kong, X., & Alimzhanova, S. (2020). A state-of-the-art review of quinoline degradation and technical bottlenecks. *Science of the Total Environment*, 747, 141136. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141136>

Muslim, Muhamad Imam, S. (2019). Studi Teoritis Penggunaan Derivasi Asam Siano sebagai Akseptor. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 22(4), 123–128.

Obotowo, I. N., Obot, I. B., & Ekpe, U. J. (2016). Organic sensitizers for dye-sensitized solar cell (DSSC): Properties from computation, progress and future perspectives. *Journal of Molecular Structure*, 1122, 80–87. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.05.080>

Pratiwi, D. D., Nurosyid, F., Kusumandari, Supriyanto, A., & Suryana, R. (2017). Performance improvement of dye-sensitized solar cells (DSSC) by using dyes mixture from chlorophyll and anthocyanin. *Journal of Physics: Conference Series*, 909(1). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/909/1/012025>

Qian, X., Wang, X., Shao, L., Li, H., Yan, R., & Hou, L. (2016). Molecular engineering of D–D– π –A type organic dyes incorporating indoloquinoxaline and phenothiazine for highly efficient dye-sensitized solar cells. *Journal of Power Sources*, 326, 129–136. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.06.127>