

**KAJIAN KARAKTERISTIK PENGGANTIAN GUGUS FUNGSI PADA
ANTOSIANIN SEBAGAI SENYAWA *DYE* PADA DSSC TiO_2
MENGUNAKAN DFT/TDDFT**



Skripsi

Untuk memenuhi sebagian persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia

Disusun oleh :

FUAD AWAL HAFIZH

NIM 10630010

Dosen Pembimbing : Karmanto, M.Sc

PROGRAM STUDI KIMIA

FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA

YOGYAKARTA

2016

ABSTRAK

Sel surya yang banyak digunakan adalah *dye synthesized solar cell* (DSSC). Material penyusun DSSC yaitu substrat kaca ITO, TiO_2 , elektroda karbon dan *dye* alami. Antosianin merupakan *dye* yang sering digunakan dalam pembuatan DSSC karena memiliki nilai efisiensi yang tinggi. Tujuan penelitian ini untuk mengkaji pengaruh penggantian gugus fungsi CF_3 , NO_2 , CN sebagai gugus fungsi penarik elektron dan gugus fungsi CH_3 , CHCH_3 sebagai gugus fungsi pendorong elektron pada antosianin sebagai DSSC TiO_2 berdasarkan parameter jarak ikatan, energi ikat, orbital molekul dan spektra serapan.

Penelitian ini menggunakan metode komputasi untuk mendapatkan hasil yang lebih akurat, hemat biaya, hemat waktu dan tenaga. Metode yang digunakan dalam komputasi ini yaitu DFT/TDDFT dengan basis set 6-31G*. Dalam penelitian ini dilakukan simulasi penggantian gugus fungsi pada *dye* dalam DSSC. Hasil penelitian yang diperoleh menunjukkan bahwa pengaruh penggantian gugus fungsi terhadap karakteristik antosianin sebagai senyawa *dye* pada DSSC TiO_2 dimana variasi gugus fungsi yang memiliki pengaruh terbesar terhadap karakteristik antosianin sebagai DSSC TiO_2 adalah CH_3 . Berdasarkan parameter dalam penelitian ini didapatkan hasil bahwa CH_3 mempunyai jarak ikat yang lebih pendek, energi pembentukan yang lebih sedikit, spektra serapan lebih banyak jika dibandingkan dengan sianidin tanpa penggantian gugus fungsi dan penggantian gugus fungsi lainnya.

Kata Kunci : sianidin, orbital molekul, DFT/TDDFT

PERNYATAAN KEASLIAN PENELITIAN

Saya, yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Fuad Awal Hafizh

NIM : 10630010

Program Studi : Kimia

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa dalam skripsi saya tidak terdapat penelitian karya orang lain dan skripsi saya merupakan asli hasil karya peneliti sendiri serta bukan plagiasi dari karya orang lain

Yogyakarta, September 2016

Yang menyatakan,



Fuad Awal Hafizh
NIM 10630010



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal :

Lamp :

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Fuad Awal Hafizh

NIM : 10630010

Judul Skripsi : Kajian Karakteristik Penggantian Gugus Fungsi pada Antosianin sebagai Senyawa Dye pada DSSC TiO₂ Menggunakan DFT/TDDFT

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam

Dengan ini kami mengharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, September 2016

Pembimbing

Karmanto, S.Si., M.Sc

NIP.19820504 200912 1 005



NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Fuad Awal Hafizh

NIM : 10630010

Judul Skripsi : Kajian Karakteristik Penggantian Gugus Fungsi pada Antosianin sebagai Senyawa
Dye pada DSSC TiO_2 Menggunakan DFT/TDDFT

sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 7 Desember 2016

Konsultan

Dr. Imelda Fajriati, M.Si.

NIP.19750725 200003 2 001

NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Fuad Awal Hafizh

NIM : 10630010

Judul Skripsi : Kajian Karakteristik Penggantian Gugus Fungsi pada Antosianin sebagai Senyawa Dye pada DSSC TiO_2 Menggunakan DFT/TDDFT

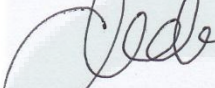
sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 7 Desember 2016

Konsultan



Didik Krisdiyanto, M.Sc.

NIP.19811111 201101 1 007



PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Nomor : B.4402/Un.02/DST/PP.05.3/12/2016

Skripsi/Tugas Akhir dengan judul : Kajian Karakteristik Penggantian Gugus Fungsi pada Antosianin sebagai Senyawa *Dye* pada DSSC TiO_2 Menggunakan DFT/TDDFT

Yang dipersiapkan dan disusun oleh :
Nama : Fuad Awal Hafizh
NIM : 10630010
Telah dimunaqasyahkan pada : 7 November 2016
Nilai Munaqasyah : A/B
Dan dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga

TIM MUNAQASYAH :

Ketua Sidang

Karmanto, M.Sc.
NIP.19820504 200912 1 005

Penguji I

Dr. Imelda Fajriati, M.Si.
NIP. 19750725 200003 2 001

Penguji II

Didik Krisdiyanto, M.Sc.
NIP. 19811111 201101 1 007

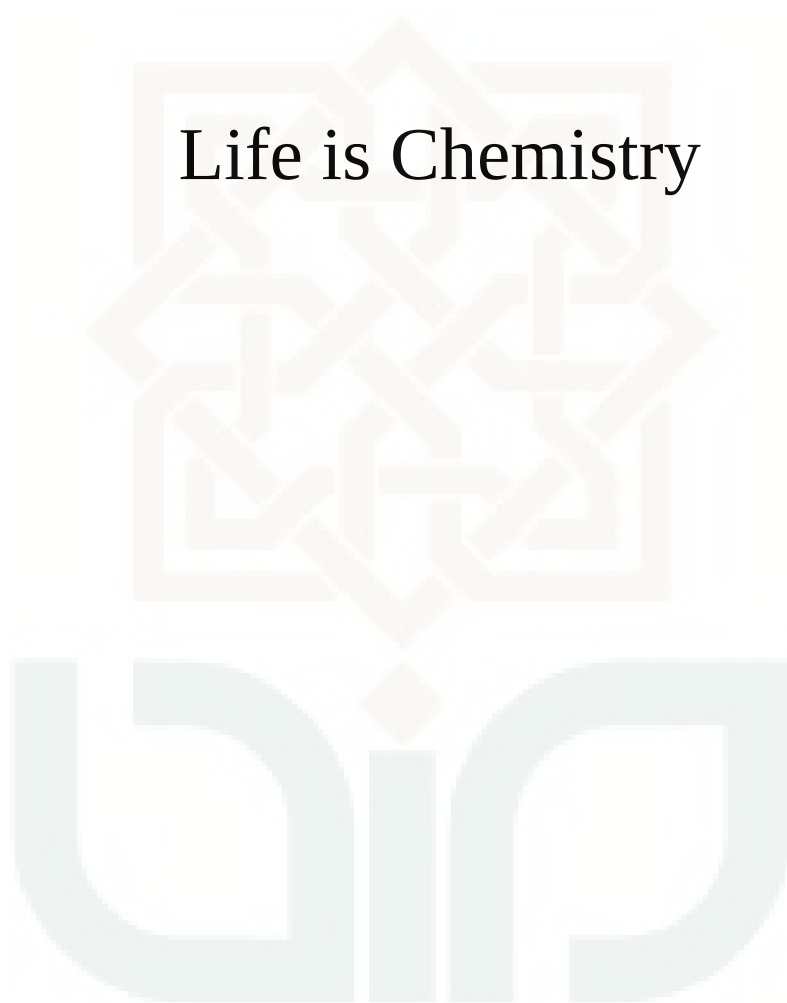
Yogyakarta, 7 Desember 2016
UIN Sunan Kalijaga
Fakultas Sains dan Teknologi
Dekan



Dr. Murtono, M.Si.
NIP. 19691212 200003 1 001

MOTTO

Life is Chemistry



HALAMAN PERSEMBAHAN

Dengan segenap doa, harapan, dan cinta kasih,

Karya sederhana ini saya persembahkan untuk almamater Prodi Kimia

Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

Yogyakarta, semoga dapat terus melahirkan pada cendikiawan hebat

yang tak henti berkarya bagi kemaslahatan bersama.

KATA PENGANTAR

Assalamu`alaikum Wr. Wb.

Alhamdulillahirobbil`alamin segala puji dan puji hamba peruntukan kehadirat Allah SWT dengan segala kuasa, rahmat, taufik, hidayat, dan inayah-Nya terlimpah kepada hambanya yang lemah ini, sehingga selesailah penulisan skripsi ini. Shalawat dan salam senantiasa tercurahkan kepada junjungan kita Nabi Muhammad SAW, keluarga, sahabat, dan pengikut beliau hingga akhir zaman.

Penyusunan skripsi yang berjudul “Kajian Karakteristik Penggantian Gugus Fungsi Pada Antosianin Sebagai Senyawa *Dye* Pada DSSC TiO_2 Menggunakan DFT/TDDFT” ini diajukan guna memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Strata Satu Program Studi Kimia di Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.

Betapapun penelitian yang hasilnya disusun menjadi skripsi ini telah dirancang dan dilaksanakan dengan sungguh-sungguh serta dengan segala kemampuan yang ada, tetapi tentunya masih banyak kekurangan. Oleh karena itu, kemampuan yang ada, tetapi tentunya masih banyak kekurangan. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan terima kasih kepada :

1. Dr. Murtono, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Dr. Susy Yunita Prabandari, M.Si., selaku Ketua Prodi Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.

3. Karmanto, M.Sc., selaku Dosen Pembimbing Skripsi sekaligus Ketua Prodi Program Studi Pendidikan Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
4. Dr. Imelda Fajriati, M.Si dan Didik Krisdiyanto, M.Sc, selaku penguji skripsi yang telah memberikan saran dan masukan demi hasil yang terbaik.
5. Sudarlin Laoddang, M.Si., yang selalu memberikan saran dan motivasi dalam melaksanakan praktik skripsi ini.
6. Dr. Maya Rahmayanti M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang tidak lelah dalam memberikan nasihat dalam membangun motivasi penulis memulai skripsi dan motivasi agar selalu semangat mengikuti kuliah dan mengejar cita-cita.
7. Kepada seluruh jajaran dosen di Program studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta dan seluruh karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
8. Istri saya, Sri Lutfiwati, yang selalu mendampingi, mewarnai dan memotivasi hidup saya selama pengerjaan skripsi ini.
9. Orangtua yang saya sayangi, Bapak Suwarjono dan Ibu Silariyani, yang senantiasa selalu mengingatkan saya agar “kembali” ke jalan yang lurus, terimakasih untuk cinta kasih dan bantuan yang tak ternilai harganya, yang tidak mungkin mampu saya ganti kecuali dengan prestasi yang saya capai hingga hari ini.

10. Adik saya, Feizati Mutiah Salsabila, terima kasih atas bantuan, dukungan dan doa tulusnya untuk selama ini.
11. Seluruh teman-teman di Prodi Kimia angkatan 2010.
12. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu per satu yang telah memberikan bantuan pelaksanaan penelitian dan penyusunan skripsi ini.

Wassalamu`alaikum Wr. Wb.

Yogyakarta, 7 Desember 2016

Penyusun,



Fuad Awal Hafizh

NIM. 10630010

DAFTAR ISI

ABSTRAK	ii
PERNYATAAN KEASLIAN PENELITIAN	iii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	iv
NOTA DINAS KONSULTAN	v
MOTTO	viii
HALAMAN PERSEMBAHAN	ix
KATA PENGANTAR	x
DAFTAR ISI	xiii
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah	7
C. Rumusan Masalah	7
D. Tujuan Penelitian	8
E. Manfaat Penelitian	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	9
A. Tinjauan Pustaka	9
B. Landasan Teori	16
C. Hipotesis	18
BAB III METODE PENELITIAN	19
A. Waktu dan Tempat Penelitian	19
B. Alat dan Bahan Penelitian	19
C. Cara Kerja Penelitian	20
D. Teknik Analisis Data	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	23
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	42
A. Kesimpulan	42
B. Saran	42
GLOSARIUM	43
DAFTAR PUSTAKA	45

DAFTAR TABEL

Tabel 1	Efek medan berbagai gugus relatif terhadap hidrogen	15
Tabel 2	Jarak Ikatan Variasi Sianidin+TiO ₂	23
Tabel 3	Energi Ikat Variasi Sianidin+TiO ₂	24
Tabel 4	Spektra Serapan Sianidin+TiO ₂	36



DAFTAR GAMBAR

Gambar 1	Struktur Antosianin Secara Umum	14
Gambar 2	Reaksi antara Sianidin dengan $\text{Ti}(\text{OH})_4$	17
Gambar 3	Sianidin(OH)+ TiO_2 2 Dimensi.....	26
Gambar 4	Sianidin(OH)+ TiO_2 3 Dimensi.....	26
Gambar 5	Orbital Molekul Sianidin(OH)+ TiO_2	26
Gambar 6	Sianidin(CF_3)+ TiO_2 2 dimensi	27
Gambar 7	Sianidin(CF_3)+ TiO_2 3 dimensi.....	28
Gambar 8	Orbital Molekul Sianidin(CF_3)+ TiO_2	28
Gambar 9	Sianidin(NO_2)+ TiO_2 2 dimensi	29
Gambar 10	Sianidin(NO_2)+ TiO_2 3 dimensi	29
Gambar 11	Orbital Molekul Sianidin(NO_2)+ TiO_2	30
Gambar 12	Sianidin(CN)+ TiO_2 2 dimensi	31
Gambar 13	Sianidin(CN)+ TiO_2 3 dimensi	31
Gambar 14	Orbital Molekul Sianidin(CN)+ TiO_2	31
Gambar 15	Sianidin(CHCH_2)+ TiO_2 2 dimensi.....	32
Gambar 16	Sianidin(CHCH_2)+ TiO_2 3 dimensi.....	33
Gambar 17	Orbital Molekul Sianidin(CHCH_2)+ TiO_2	33
Gambar 18	Sianidin(CH_3)+ TiO_2 2 dimensi	34
Gambar 19	Sianidin(CH_3)+ TiO_2 3 dimensi	34
Gambar 20	Orbital Molekul Sianidin(CH_3)+ TiO_2	35
Gambar 21	Spektra Serapan UV dan Visible Sianidin(OH)+ TiO_2	37
Gambar 22	Spektra Serapan UV dan Visible Sianidin(CH_3)+ TiO_2	38
Gambar 23	Spektra Serapan UV dan Visible Sianidin(CHCH_2)+ TiO_2	38
Gambar 24	Spektra Serapan UV dan Visible Sianidin(CF_3)+ TiO_2	39
Gambar 25	Spektra Serapan UV dan Visible Sianidin(NO_2)+ TiO_2	40
Gambar 26	Spektra Serapan UV dan Visible Sianidin(CN)+ TiO_2	40

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Energi merupakan bagian yang tidak terpisahkan dari kehidupan di dunia ini. Permasalahan energi tampaknya akan tetap menjadi topik yang hangat sepanjang peradaban umat manusia. Berbagai upaya mencari sumber energi alternatif sebagai pengganti bahan bakar fosil terus dikembangkan dan tetap ramai dibicarakan. Para ilmuwan terus mengupayakan penelitian untuk mengembangkan beberapa energi alam sebagai energi alternatif yang bersih, tidak berpolusi, aman dan dengan persediaan yang tidak terbatas (Wenas, 1996). Beberapa energi tersebut bisa didapatkan dari surya, angin, gelombang dan perubahan suhu air laut.

Pengembangan teknologi dengan sumber energi alternatif ini guna mengantisipasi penggunaan sumber energi listrik yang beragam dan tidak bisa dihindari karena di dalam kehidupannya, manusia memiliki kebutuhan energi yang besar dan semakin membesar seiring berjalannya waktu. Perkembangan zaman dengan segala dinamikanya, membuat manusia akan terus menggunakan berbagai benda yang membutuhkan energi listrik yang lebih besar dibanding sebelumnya. Oleh karena itu, pengkajian terhadap berbagai sumber energi baru tidak akan pernah menjadi langkah yang sia-sia. Apabila kita melihat secara lebih jelas, pada Oktober 2012 *Lux Research, Inc.* melaporkan bahwa cadangan energi fosil sebagai energi listrik diperkirakan akan habis dalam kurun waktu 54 tahun mendatang. Dengan keadaan ini, penggunaan energi alternatif melalui sel surya merupakan hal yang paling potensial. Hal ini disebabkan jumlah energi matahari yang sampai ke

bumi sangatlah besar, sekitar 700 Megawatt di setiap menitnya. Bila dikalkulasikan, jumlah ini sama dengan 10.000 kali lebih besar dari total konsumsi energi dunia (Sari dkk, 2013).

Matahari memiliki sumber cahaya sendiri yang berasal dari reaksi fusi. Cahaya matahari yang sampai ke bumi terdiri dari paket-paket yang disebut kuantum, serta memiliki energi foton sebesar $h\nu$. Beberapa negara memiliki potensi untuk memanfaatkan cahaya matahari sebagai sumber energi listrik alternatif dengan cara pengembangan sel surya, salah satunya Indonesia. Hal ini didasarkan pada penilaian posisi Indonesia yang dilalui garis khatulistiwa yang memungkinkan sinar matahari dapat optimal diterima di seluruh Indonesia (Firmanila, 2016).

Sel surya merupakan suatu perangkat yang mampu mengubah energi cahaya matahari menjadi energi listrik dengan mengikuti prinsip fotovoltaiik, yaitu adanya energi foton pada panjang gelombang tertentu akan mengeksitasi sebagian elektron pada suatu material ke pita energi yang lebih luar. Sel surya yang banyak digunakan sekarang ini adalah sel surya generasi pertama yang berbasis silikon sebagai hasil perkembangan pesat teknologi semikonduktor elektronik. Sel surya lebih didominasi oleh bahan silikon sehingga biaya konsumsinya lebih mahal daripada sumber energi fosil. Selain itu kekurangan dari sel surya silikon adalah penggunaan bahan kimia berbahaya karena silikon merupakan salah satu gas rumah kaca. Pada penelitian selanjutnya muncul sel surya generasi kedua yang berbasis lapisan tipis berbahan silikon. Lapisan yang digunakan pada metode ini juga terbuat dari bahan semikonduktor lain seperti CdTe, GaAs, dan kombinasi dari golongan I-III-VI (misalnya, CuInSe). Sel surya ini dapat dideposisi pada substrat yang lentur

sehingga menghasilkan rangkaian sel surya yang fleksibel. Namun kehadirannya belum menjadi salah satu alternatif penggunaan energi listrik karena masih mengandung silikon.

Seiring berkembangnya nanoteknologi, dominasi pengembangan sel surya tersebut secara bertahap mulai tergantikan dengan hadirnya sel surya generasi ketiga, yaitu sel surya yang menggunakan bahan organik, yang dapat dikelompokkan menjadi *dye synthesized solar cell (DSSC)* dan *conjugated polymer solar cell (CPSC)*. DSSC merupakan salah satu kandidat potensial sel surya sebagai sumber energi listrik, yang tidak memerlukan material dengan kemurnian tinggi sehingga biaya produksinya relatif rendah. Tipe DSSC umumnya berbentuk sel basah yang memiliki efisiensi konversi energi yang relatif besar tetapi rentan terhadap terjadinya aglomerasi *dye* dan kebocoran larutan elektrolitnya (Law, 2005).

Material semikonduktor yang sering digunakan adalah metal oksida (keramik) seperti TiO_2 , SnO_2 dan ZnO_2 . TiO_2 sering digunakan sebagai bahan DSSC karena memiliki *band gap* cukup lebar, sifat optis yang baik, inert, serta tidak berbahaya (Firmanila, 2016). Berbagai penelitian dikembangkan untuk memperoleh DSSC yang ideal, dimana memiliki nilai lebih dari faktor-faktor di bawah ini :

1. Memiliki efisiensi tinggi, efisiensi mengkonversikan energi yang diterima menjadi energi listrik yang kita harapkan.
2. Volt tinggi
3. Arus listrik yang besar (Afifudin & Hananto, 2012)

Penelitian Dadi Rusdiana (2014) berjudul “Pembuatan Sel Surya TiO_2 Nanokristal Berbahan Dasar *Anthocyanin* sebagai Material *Dye*”, menyatakan bahwa efisiensi sel surya dengan struktur DSSC yang dibuat dengan teknik *spin coating* dipengaruhi oleh waktu *dipping* TiO_2 dalam *dye* antosianin. Efisiensi yang paling besar dicapai pada sampel sel surya dengan konsentrasi *dye* 30% dengan sel seluas $0,6 \text{ cm}^2$ yang menghasilkan efisiensi $8,72 \times 10^{-4}\%$, I_{sc} yang diperoleh adalah $2,3 \times 10^{-4} \text{ mA/cm}^2$, dan V_{oc} yang dihasilkan adalah 27 mV. Hal ini menunjukkan efisiensi konversi sel surya yang berbahan dasar polimer organik belum sebaik sel surya dari bahan silikon, namun memiliki keuntungan yaitu biaya produksi yang rendah. Dalam penelitian lainnya, Hardeli dkk (2013) mengangkat judul “DSSC Berbasis Nanopori TiO_2 Menggunakan Antosianin dari Berbagai Sumber Alami”, menyimpulkan bahwa secara keseluruhan kinerja sel surya belum cukup baik dengan melihat nilai efisiensi konversi yang masih sangat kecil (di bawah 1 %), dikarenakan belum optimalnya transfer elektron dari antosianin teroksidasi ke dalam lapisan fotoelektroda, begitu juga dengan tranfer elektron di dalam lapisan fotoelektroda yang belum berjalan baik karena hambatan lapisan yang sangat besar.

Prinsip kerja DSSC menggunakan TiO_2 sebagai penyerap energi pada panjang gelombang UV. Ditambah dengan penggunaan *Dye* untuk menyerap energi pada panjang gelombang Visible.

Sensitasi semikonduktor biasanya menggunakan antosianin yang berasal dari pigmen alami. Hal ini karena *antosianin* memiliki keunggulan yang lebih dari klorofil sebagai *sensitizer* DSSC. Senyawa antosianin memiliki gugus karbonil dan hidroksil pada struktur molekulnya, sehingga dapat berikatan dengan permukaan

TiO₂. Antosianin berpotensi sebagai sensitizer karena mempunyai daya serap energi yang cukup lebar. Untuk itu dalam penelitian ini penulis mencoba untuk menemukan senyawa turunan dari antosianin sebagai penyusun sel surya pada DSSC dengan harapan memperoleh susunan yang lebih baik dalam hal menyerap sinar matahari dan menghasilkan energi listrik lebih efisien.

Penulis melakukan simulasi penggantian gugus fungsi terhadap *dye* pada DSSC untuk mengetahui ideal atau tidaknya penggantian tersebut menggunakan teknik kimia komputasi. IUPAC memberi pengertian kimia komputasi sebagai disiplin ilmu yang menggunakan metode matematika untuk menghitung sifat molekular atau untuk mensimulasi kelakuan sistem molekular (Van de Waterbeemd, et al., 1997). Ruang lingkup kimia komputasi meliputi kajian kestabilan konformasi struktur senyawa kimia, termokimia, spektroskopi molekular, mekanisme reaksi, potensial elektrostatik, muatan atom, simulasi Monte Carlo dan dinamika molekular (Jensen, 1999).

Simulasi komputer membutuhkan suatu metode akurat dalam memodelkan sistem yang dikaji. Simulasi sering dilakukan dengan kondisi yang sangat mirip dengan eksperimen, sehingga hasil penghitungan kimia komputasi dapat dibandingkan secara langsung dengan eksperimen. Jika hal ini terjadi, maka simulasi bersifat sebagai alat yang sangat berguna, bukan hanya untuk memahami dan menginterpretasi data eksperimen dalam tingkat mikroskopik, tetapi juga dapat mengkaji bagian yang tidak dapat dijangkau secara eksperimen, seperti reaksi pada kondisi tekanan sangat tinggi atau reaksi yang melibatkan gas berbahaya (Pranowodkk, 1999).

Idealnya, kimia komputasi mempunyai sifat:

1. Dapat diterapkan pada sistem bervariasi, yaitu berlaku untuk sistem yang besar, waktu operasi panjang, sistem cairan atau padatan.
2. Fleksibel, dapat dijalankan pada beberapa platform komputasi (perangkat keras) dan perangkat lunak, dan didukung oleh visualisasi grafis yang memadai.
3. Kemampuan tinggi, mampu dijalankan pada desktop atau platform komputasi paralel berbiaya murah.
4. Mudah digunakan, mekanisme penggunaan yang sederhana dan sistem yang canggih untuk dapat digunakan oleh pengguna dengan kemampuan rata-rata.
5. Validasi eksperimental, hasil perhitungan komputasi divalidasi secara eksperimental.
6. Termasuk dalam kurikulum pendidikan, yaitu diberikan pada S1, S2 maupun S3 melalui kuliah dan praktikum (Pranowo, 2009).

Metode yang umum digunakan dalam studi komputasi adalah metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent Density Functional Theory* (TDDFT). Kelemahan yang dimiliki oleh metode DFT adalah tidak dapat menghitung spektrum absorpsi dan sifat elektro kimia, sementara TDDFT dapat mengatasi kelemahan tersebut. Metode ini mulai berkembang sejak tahun 1980 dan 1990 dan hanya mampu menghitung secara global energi elektronik total dan distribusi kerapatan elektron dari suatu senyawa. Metode DFT berbeda dengan metode Hartre-Fock, dimana dalam metode Hartre-Fock perhitungannya menggunakan fungsi gelombang tunggal yang perhitungannya benar-benar

menghitung seluruh N atau jumlah elektron dalam suatu molekul dalam fungsi gelombang. Pada metode DFT, energi elektronik total berhubungan dengan total kerapatan elektron. Metode DFT digunakan untuk menentukan prediksi sifat optik, dan juga sifat elektronik dari senyawa organik. Metode TDDFT melibatkan potensial luar, namun pada metode DFT tidak dapat menentukan sifat optik maupun sifat elektronik senyawa organik yang digunakan dalam penelitian ini.

Oleh karena itu, penulis memiliki ketertarikan untuk melakukan penelitian mengenai pengembangan teknologi sel surya dengan mengganti gugus fungsi yang dilakukan dengan menggunakan DFT/TDDFT untuk mendapatkan hasil yang lebih efisien dan hemat secara waktu, tenaga, biaya dan tempat.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah dari pembuatan tugas akhir ini antara lain :

1. Menggantikan salah satu gugus fungsi pada Antosianin dengan gugus fungsi pendorong (CH_3 dan CHCH_2) atau penarik elektron (CF_3 , NO_2 dan CN).
2. Parameter yang dipelajari adalah jarak ikatan, energi ikat, orbital molekul dan hasil spektra serapan.

C. Rumusan Masalah

Mengacu pada latar belakang dan batasan masalah di atas, dapat dirumuskan masalah yang ingin diteliti lebih lanjut yaitu bagaimana pengaruh penggantian gugus fungsi pendorong atau penarik elektron terhadap karakteristik DSSC TiO_2 .

Parameter yang digunakan adalah jarak ikatan, energi ikat, orbital molekul dan hasil spektra serapan.

D. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji pengaruh penggantian gugus fungsi pendorong atau penarik elektron terhadap karakteristik antosianin sebagai DSSC TiO_2 berdasarkan parameter jarak ikatan, energi ikat, orbital molekul dan hasil spektra serapan.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini yaitu :

1. Memahami pengaruh penggantian gugus fungsi penarik dan pendorong elektron terhadap karakteristiknya.
2. Menentukan sebuah senyawa baru yang mempunyai nilai lebih sebagai senyawa *dye* untuk DSSC TiO_2 .

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Kesimpulan yang dapat diambil dari penelitian ini adalah:

1. Penggantian gugus fungsi pendorong atau penarik elektron dapat mempengaruhi karakteristik antosianin sebagai DSSC TiO_2 .
2. Variasi gugus fungsi yang memiliki pengaruh terbesar terhadap karakteristik antosianin sebagai DSSC TiO_2 adalah CH_3 . Hal ini disimpulkan berdasarkan parameter jarak ikatan, energi ikat, orbital molekul dan spektra serapan.

B. Saran

Sebagai peneliti di bidang kimia komputasi penulis memberikan beberapa saran yang sekiranya bermanfaat untuk penelitian selanjutnya yaitu:

1. Perlu dilakukan penelitian menggunakan variasi gugus fungsi yang lain dan pada posisi yang berbeda.
2. Perlu dilakukan penelitian menggunakan variasi senyawa *dye* yang mirip dengan sianidin.
3. Perlu dilakukan eksperimen penggantian gugus fungsi secara praktik untuk membuktikan kemungkinan yang diperoleh dari hasil visualisasi 3D secara keseluruhan.

GLOSARIUM

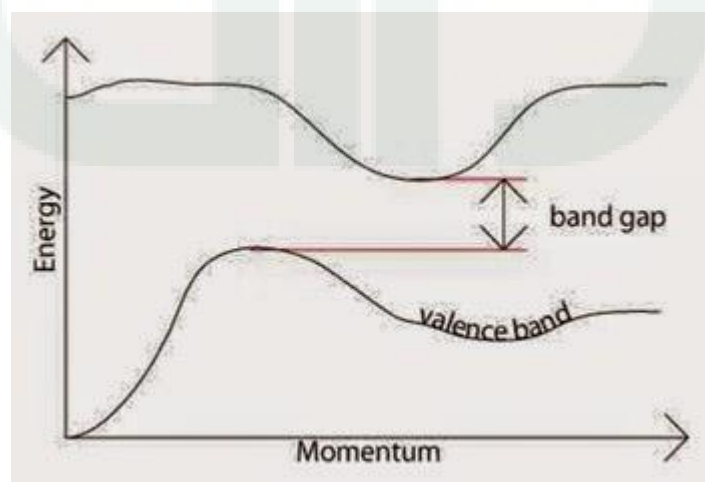
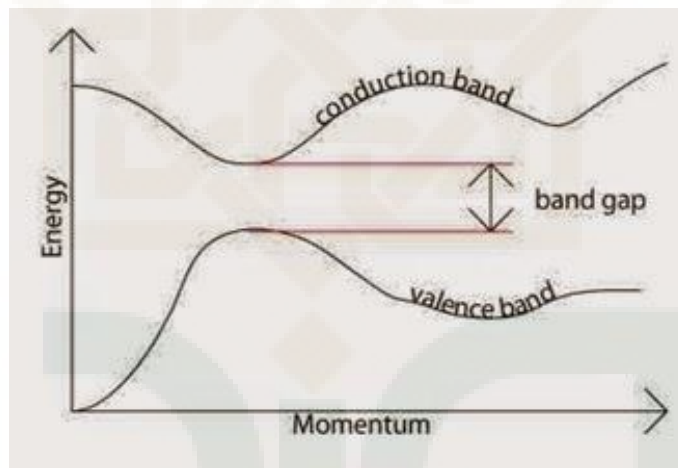
Ikatan Kovalen : sejenis ikatan kimia yang memiliki karakteristik berupa pasangan elektron yang saling terbagi (pemakaian bersama elektron) di antara atom-atom yang berikatan.

DSSC (*dye synthesized solar cell*) : sel surya yang terbuat dari semikonduktor yang dilapisi oleh zat warna untuk meningkatkan efisiensi konversi sinar matahari. DSSC tersusun atas elektroda kerja, elektroda counter dan elektrolit.

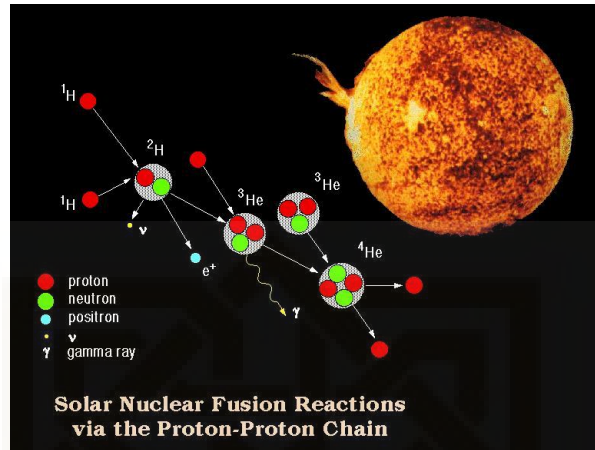
Basis set : deskripsi matematis dari orbital dalam sistem yang digunakan untuk melakukan perhitungan mekanika kuantum.

Basis set 6-31G* : adalah basis set 6-31G yang ditambahi satu fungsi polarisasi kedalamnya (yang ditetapkan untuk atom H sampai Zn)

Band Gap : energi minimum yang berbeda antara ujung pita valensi dan ujung pita konduksi



Reaksi Fusi : reaksi yang terjadi salah satunya ada di Matahari dimana reaksi tersebut menggabungkan Hidrogen menjadi Helium



DAFTAR PUSTAKA

- Afifudin, Falscky., Hananto, Farid Samsu. 2012. Optimalisasi Tegangan Keluaran dari Solar Cell Menggunakan Lensa Pemfokus Cahaya Matahari. *ejournal.uin-malang.ac.id/index/php/.../article/.../pdf*. Diakses 23 Januari 2015.
- Anon. 2013. NW Chem. [Online] Available at: http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page. Diakses 23 Januari 2015
- Effendy. 2006. *Teori VSEPR:Kepolaran, dan Gaya Antarmolekul*. Malang: Banyumedia Publishing.
- Firdaus. 2009. *Kimia Organik Fisis I*. Makassar: Program Studi Kimia Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Hasanuddin.
- Firmanila, Vera. 2016. Karakterisasi DSSC pada Semikonduktor ZnO-SiO₂ dengan Pewarna Ekstrak Buah Mangsi dan Daun Jati. *Skripsi*. Malang: Jurusan Fisika Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim.
- Grätzel & Michael. 2003. Dye-sensitized solar cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* 4, pp. 145-153.
- Grätzel & Michael. 2006. Photovoltaic performance and long-term stability of dyesensitized meosocopic solar cells. *C. R. Chimie* 9, p. 578–583.
- Hardeli, et al. 2013. *Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Berbasis Nanopori TiO Menggunakan Antosianin dari Berbagai Sumber Alami*. Padang: Kimia FMIPA UNP Padang.
- Huang, dkk. 2007. *Preparation of a Novel Polymer Gel Electrolyte Gel based on N-methyl-quinoline Iodide and Its Application in Quasi-Solid-State Dye-Sensitized Solar Cell*. *J.Sol-Gel Sci*.
- Jensen, F. 1999. *Introduction to Computational Chemistry*. New York USA: John Wiley and Sons.
- Kay, A., Gratzel, M. 1996. Low Cost Photovoltaic Modules base on Dye Sensitized Nanocrystalline Titanium Dioxide and Carbon Powder. *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 44, 99-117.
- Law, M.. 2005. Nanowire Dye-Sensitized Solar Cells. *Phys. Chem.*, p. 455.
- Li B, et al. 2006. Review of Recent Progress in Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 549-573.

- Pranowo, H.D. 2009. Peran Kimia Komputasi dalam Desain Molekul Obat. *Pidato Pengukuhan Jabatan Guru Besar pada Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Gajah Mada Yogyakarta*. <http://repository.ugm.ac.id/94789/>. Diakses 15 November 2013.
- Pranowo, H.D., Hetadi, A.K.R. 2011. *Pengantar Kimia Komputasi*. Bandung: Penerbit Lubuk Agung.
- Rahmawati, Fitria. 2003. *Elektrokimia: Transformasi Energi Kimia-Listrik*. Yogyakarta: Graha Ilmu.
- Rusdiana, Dadi. 2014. Pembuatan Sel Surya TiO_2 Nanokristal Berbahan Dasar Anthocyanin sebagai Material Dye. *Jurnal*. Bandung: Jurusan Pendidikan Fisika Universitas Pendidikan Indonesia.
- Sari, dkk. 2012. Penggunaan Ekstrak Buah Mangsi (*Phyllanthus reticulatus* Poir), Dadap Merah (*Erthythrina variegata*), dan Rhodamin B pada Sel Surya Pewarna Tersensitisasi (SSPT) Termodifikasi Emas Nanopartikel. *Skripsi*. Surabaya: ITS.
- Sastrohamidjojo, H.. 2007. *Spektroskopi*. Yogyakarta: Liberty Yogyakarta.
- Smestad, G.P., Gratzel & M. 1998. Demonstrating electron Transfer and Nanotechnology : A Natural Dye Sensitized Nanocrystalline energy Converter. *J.Chem. Educ.*, pp. 752-756.
- Subodro, Rohmat., Ramelan, A. H. 2012. Sintesa Titanium Dioxide (TiO_2) untuk Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC). *Jurnal*. Surakarta: UNS.
- Van de Waterbeemd, et al. 1997. Glossary of Terms Used in Computational Drug Design. *IUPAC Recommendation 1997*, p. 1137.
- Winarno, 1992. *Kimia Pangan dan Gizi*. Jakarta: PT. Gramedia Pustaka Utama.

CURRICULUM VITAE

DATA PRIBADI

Nama : Fuad Awal Hafizh
Tempat & Tanggal Lahir : Yogyakarta, 22 Februari 1991
Alamat : Pandean KG III 618 Purbayan Kotagede
Yogyakarta
Nomor HP : +6289-7581-4691
Jenis Kelamin : Laki-laki
Agama : Islam
Kewarganegaraan : Indonesia
Status : Menikah
Email : fuadshifu@gmail.com

PENDIDIKAN FORMAL

- SD Muh. Kleco III Yogyakarta
- SMP N 9 Yogyakarta
- SMTI Yogyakarta
- Prodi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta