

**KAJIAN TEORITIS PENGGUNAAN TURUNAN ASAM SIANO
SEBAGAI GUGUS AKSEPTOR ELEKTRON PADA SIANIDIN
SEBAGAI SENYAWA *DYE* SEL SURYA TERSENSITASI
(DSSC)**

**Skripsi
Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana S-1**



**Muhammad Nur Maulidin Mahmud
13630021**

**PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2018**



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp. : -

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh

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

Nama : Muhammad Nur Maulidin Mahmud

NIM : 13630021

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano sebagai
Gugus Akseptor Elektron pada Sianidin sebagai Senyawa Dye
Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

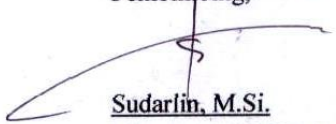
sudah dapat diajukan kembali kepada Jurusan Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

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

Wassalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh

Yogyakarta, 2 Agustus 2018

Pembimbing,


Sudarlin, M.Si.

NIP. 19850611 201503 1 002



NOTA DINAS KONSULTAN



NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh

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

Nama : Muhammad Nur Maulidin Mahmud
NIM : 13630021

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano sebagai
Gugus Akseptor Elektron pada Sianidin sebagai Senyawa *Dye*
Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

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 warahmatullahi wabarakatuh

Yogyakarta, 2 Agustus 2018

Konsultan,

Didik Krisdiyanto, S.Si., M.Sc

NIP. 19811111 201101 1 007



NOTA DINAS KONSULTAN



NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh

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

Nama : Muhammad Nur Maulidin Mahmud
NIM : 13630021

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano sebagai
Gugus Akseptor Elektron pada Sianidin sebagai Senyawa Dye
Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

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 warahmatullahi wabarakatuh

Yogyakarta, 2 Agustus 2018

Konsultan,

Karmanto S.Si., M.Sc.

NIP. 19820504 200912 1 005



SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI



SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Muhammad Nur Maulidin Mahmud

NIM : 13630021

Jurusan : Kimia

Fakultas : Sains dan Teknologi

menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul **“Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano sebagai Gugus Akseptor Elektron pada Sianidin sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC)”** merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 12 Juli 2018



Muhammad Nur Maulidin Mahmud
NIM 13630021



PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-UINSK-BM-05-07/RO

PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Nomor : B.895/Un.02/DST/PP.05.3/08/2018

Skripsi/Tugas Akhir dengan judul : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano Sebagai Gugus Akseptor Elektron Pada Sianidin Sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

Yang dipersiapkan dan disusun oleh :
Nama : Muhammad Nur Maulidin Mahmud
NIM : 13630021
Telah dimunaqasyahkan pada : 25 Juli 2018
Nilai Munaqasyah : A/B
Dan dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga

TIM MUNAQASYAH :

Ketua Sidang

Sudarlin, M.Si.
NIP.19850611 201503 1 002

Penguji I

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

Penguji II

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

Yogyakarta, 1 Agustus 2018
UIN Sunan Kalijaga
Fakultas Sains dan Teknologi
Dekan



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

MOTO

Man Jadda Wa Jadda

(Barang siapa bersungguh-sungguh maka ia akan berhasil)

“Maka sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Maka apabila engkau telah selesai (dari sesuatu urusan), tetaplah bekerja keras (untuk urusan yang lain). Dan hanya kepada Tuhanmulah engkau berharap.” (QS. Al-Insyirah,6-8)

“Percayalah kepada Allah, Allah akan tuntun ke jalan yang terbaik dan indah”
(Anonim)

HALAMAN PERSEMBAHAN

*Dengan penuh rasa syukur kepada Allah SWT dan
shalawat serta salam atas Rasul-Nya,
kupersembahkan karya ini untuk:*

*Bapak, Ibu, dan Saudara-saudara saya atas
semangat, motivasi, dan dorongannya untuk
kelancaran serta kesuksesan kuliahku*

*Sahabat-sahabatku yang luar biasa,
untuk almamater kebanggaanku
Prodi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi,
Universitas Islam Negeri Yogyakarta*

KATA PENGANTAR

Segala puji bagi *Rabbul'alamin* yang telah memberi kesempatan dan kekuatan sehingga skripsi yang berjudul “**Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano sebagai Gugus Akseptor Elektron pada Sianidin sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC)**” ini dapat diselesaikan sebagai salah satu persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia.

Penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan dorongan, semangat, dan ide-ide kreatif sehingga tahap demi tahap penyusunan skripsi ini telah selesai. Ucapan terima kasih itu secara khusus disampaikan kepada:

1. Dr. Murtono, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si., selaku Ketua Program Studi Kimia yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama studi.
3. Irwan Nugraha, S.Si. M.Sc., selaku Dosen Penasihat Akademik yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama studi.
4. Sudarlin, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang secara ikhlas dan sabar meluangkan waktunya untuk membimbing, mengarahkan, dan memotivasi penyusun dalam menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
5. Dosen-dosen Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta yang sudah membagi ilmu yang sangat bermanfaat.

6. Seluruh staf karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu sehingga penyusunan skripsi ini berjalan dengan lancar.
7. Yusuf Murdani, S.Kom., M. Munawir, S.T., Awan Pramudya W., S.Kom. selaku PLP laboratorium Komputer UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
8. Bapak dan Ibu, yang selalu mengusahakan yang terbaik, tidak pernah berhenti mendoakan dan memberi semangat secara materiil maupun moril untuk kesuksesan anaknya.
9. Risqi Pradana Yuniarti, Annistya Pranata, Ibnu sayyidil, Kintan Savira, yang selalu menjadi keluarga terbaik dalam hidup saya.
10. Imam Muslim, Andhika, dan Zidni, selaku teman penelitian yang memiliki dosen pembimbing sama yang selalu berbagi semangat dan motivasi.
11. Liska Triyastiti dan M. Harissudin Al-amin, selaku teman penelitian dan sahabat yang sering berdiskusi dan memberi motivasi dalam berbagai hal.
12. Imam syafi'i dan Rezki Tri, selaku teman dan sering berdiskusi serta saling memberi semangat.
13. Normalita, alfi, faqih dan teman-teman kimia angkatan 2013 yang tidak dapat disebutkan satu per satu, yang selalu membantu proses studi.
14. Indri N. L. selaku teman dan sahabat yang sudah memberikan semangat dan membantu dalam proses tugas akhir.
15. Mas Irfan, Mas domo, Mas Alfi, Mas Tejo, Mas Farikh, dan kakak angkatan kimia 2012 yang tidak dapat disebutkan satu per satu, yang selalu membantu dalam proses penelitian.

16. Seluruh keluarga besar Himpunan Mahasiswa Program Studi (HMPS) Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.

17. Rekan-rekan kimia lintas angkatan serta semua pihak yang tidak bisa penulis sebutkan satu per satu atas bantuannya dalam penyelesaian skripsi ini.

18. Semua pihak yang tidak bisa penulis sebutkan satu per satu atas bantuannya dalam penyelesaian skripsi ini.

Demi kesempurnaan skripsi ini, kritik dan saran sangat penulis harapkan. Penulis berharap skripsi ini bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan secara umum dan kimia secara khusus.

Yogyakarta, 12 Juli 2018

Muhammad Nur Maulidin Mahmud
NIM 13630021

DAFTAR ISI

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	ii
NOTA DINAS KONSULTAN	iii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	v
PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	vi
MOTO	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR TABEL	xiv
ABSTRAK	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah	5
C. Rumusan Masalah	5
D. Tujuan Penelitian	6
E. Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	8
A. Tinjauan Pustaka.....	8
B. Landasan Teori.....	11
1. <i>Dye Sensitized Solar Cell</i> (DSSC).....	11
2. Sianidin.....	13
3. DFT dan TDDFT	14
4. Basis Set	16
C. Hipotesis Penelitian.....	17
BAB III METODE PENELITIAN.....	18
A. Waktu dan Tempat Penelitian.....	18
B. Alat-alat Penelitian.....	18
C. Cara Kerja Penelitian	18
D. Teknik Analisis Data	20
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	22
A. Pemilihan Metode	22
B. Optimasi Molekul dan Energi HOMO-LUMO.....	22
C. Posisi Orbital Elektron pada Keadaan LUMO.....	29
D. Spektra	32
E. Efisiensi Penyerapan Cahaya (<i>Light Harvesting Efficiency</i>)	34
F. Konstanta Kopling (V_{RP})	36
G. Panjang Ikatan.....	37
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	43
A. Kesimpulan	43
B. Saran.....	44
DAFTAR PUSTAKA	45
LAMPIRAN	49

DAFTAR GAMBAR

Gambar 4.1	Optimasi sianidin dengan metode DFT	23
Gambar 4.2	Sianidin posisi HOMO	24
Gambar 4.3	Optimasi sianidin sianoasetat, sianidin benzothiadizol sianoakrilik, sianidin sianovinil, dan sianidin sianosinamik dengan metode DFT	25
Gambar 4.4	Energi HOMO LUMO pada sianidin, sianidin sianoasetat, sianidin benzothiadizol sianoakrilik, sianidin sianovinil, dan sianidin sianosinamik	26
Gambar 4.5	Orbital sianidin, sianidin sianoasetat, sianidin benzothiadizol sianoakrilik, sianidin sianovinil, dan sianidin sianosinamik pada posisi LUMO	30
Gambar 4.6	Spektrum absorpsi sianidin, sianidin sianoasetat, sianidin benzothiadizol sianoakrilik, sianidin sianovinil, dan sianidin sianosinamik	32
Gambar 4.7	Konstanta kopling pada sianidin, sianidin sianoasetat, sianidin benzothiadizol sianoakrilik, sianidin sianovinil, dan sianidin sianosinamik	36
Gambar 4.8	Panjang ikatan sianidin dengan TiO_2	38
Gambar 4.9	Panjang ikatan sianidin sianoasetat dengan TiO_2	39
Gambar 4.10	Panjang ikatan sianidin benzothiadizol sianoakrilik dengan TiO_2	40
Gambar 4.11	Panjang ikatan sianidin sianovinil dengan TiO_2	40
Gambar 4.12	Panjang ikatan sianidin sianosinamik dengan TiO_2	41

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1	Energi eksitasi sianidin eksperimen dan perhitungan 22
Tabel 4.2	Efisiensi penyerapan cahaya pada sianidin, sianidin sianasetat, sianidin benzothiadizol sianakrilik, sianidin sianovinil, dan sianidin sianosinamik34
Tabel 4.3	Panjang ikatan sianidin, sianidin sianasetat, sianidin benzothiadizol sianakrilik , sianidin sianovinil, sianidin sianosinamik dengan TiO_2 42



ABSTRAK
KAJIAN TEORITIS PENGGUNAAN TURUNAN ASAM SIANO SEBAGAI
GUGUS AKSEPTOR ELEKTRON PADA SIANIDIN SEBAGAI
SENYAWA DYE SEL SURYA TERSENSITASI (DSSC)

Oleh:
Muhammad Nur Maulidin Mahmud
NIM 13630021

Pembimbing
Sudarlin, M.Si.

Kajian teoritis penggunaan turunan asam siano sebagai gugus akseptor elektron pada sianidin sebagai senyawa *dye* sel surya tersensitasi (DSSC) telah dilakukan berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya, konstanta kopling, dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 . Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh asam sianoasetat, benzothiadizol sianoakrilik, asam sianovinil, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik fotoelektrik sianidin dan menentukan turunan asam siano yang dapat menghasilkan karakteristik fotoelektrik sianidin lebih baik berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 .

Penelitian ini diawali menggambar struktur dengan avogadro, kemudian optimasi molekul menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan basis set 6.311G*. Untuk parameter HOMO-LUMO digunakan metode yang sama dengan teknik analisis menggunakan ECCE. Parameter lokalisasi elektron LUMO menggunakan metode yang sama, namun teknik analisis menggunakan ECCE. Spektra menggunakan metode DFT, menggunakan teknik analisis menggunakan *Chemcraft*. Parameter efisiensi penyerapan cahaya menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan teknik analisis menghitung menggunakan persamaan yang ada. Parameter konstanta kopling menggunakan metode yang sama, teknik perhitungan menggunakan persamaan energi senyawa *dye* pada kondisi HOMO, LUMO dan energi TiO_2 . Parameter panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 menggunakan metode DFT dengan teknik analisis avogadro.

Sianidin sianoasetat menjadi modifikasi terbaik berdasarkan parameter energi HOMO LUMO dengan hasil -4,569 dan -1,01 eV. Pada parameter lokalisasi elektron, modifikasi terbaik dihasilkan pada sianidin sianoasetat dengan pola elektron berpusat pada gugus sianoasetat. Parameter spektra menghasilkan modifikasi terbaik yaitu sianidin sianoasetat dengan panjang gelombang 378,811 nm dengan kekuatan osillator 0,633. Parameter efisiensi penyerapan cahaya menghasilkan modifikasi terbaik pada sianidin sianoasetat dengan nilai sebesar 0,767. Parameter konstanta kopling, modifikasi terbaik adalah sianidin benzothiadizol sianoakrilik dengan nilai -0,269. Modifikasi terbaik pada parameter panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 adalah sianidin sianoasetat dengan panjang ikatan sebesar 1,926 Å.

Kata Kunci : benzothiadizol sianoakrilik, DFT, DSSC, efisiensi penyerapan cahaya, HOMO-LUMO, konstanta kopling, lokalisasi LUMO, panjang ikatan, sianidin, sianoasetat, sianosinamik, sianovinil, dan TD-DFT.

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

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. Elektron selanjutnya mengalir melalui material *Transparent Conductive Oxide* (TCO) melewati sirkuit luar menuju elektroda lawan. Sistem elektrolit redoks akan mengisi kekosongan elektron pada molekul zat *dye* sekaligus menerima elektron dari elektroda lawan sehingga terjadi proses regenerasi elektron (Mishra, 2009). Zat pemeka atau *dye* terbagi menjadi dua jenis yaitu *dye* organik bebas logam dan *dye* organik dengan logam (Liang, 2007).

Dye sintesis mengandung senyawa organik logam berbasis kompleks ruthenium, siklometal iridium, dan lain-lain. *Dye* sintesis, seperti kompleks ruthenium memiliki harga yang mahal dan mengandung ruthenium yang berpotensi menimbulkan pencemaran lingkungan (Maddu dkk, 2007). Sejak 20 tahun yang lalu terjadi perkembangan penelitian DSSC, banyak penelitian telah dilakukan untuk menemukan kompleks logam transisi serta *dye* organik, tetapi belum ada yang mampu melebihi kinerja kompleks ruthenium berdasarkan hasil konversi dan stabilitas jangka panjang atau daya tahan penggunaanya (Aditya C.N., 2015).

Dye alami merupakan senyawa organik non logam yang dapat diekstrak dari bagian tumbuhan (Maddu dkk, 2007). Salah satu *dye* alami yang telah banyak diteliti, yaitu antosianin. Senyawa ini merupakan pigmen yang larut dalam air dan

secara alami terdapat pada berbagai jenis tumbuhan. Warna pigmen muncul dari susunan ikatan rangkap terkonjugasinya yang panjang sehingga mampu menyerap cahaya pada rentang cahaya tampak (Rahman dan Prajitno, 2013). Senyawa antosianin yang paling banyak ditemukan, antara lain pelargonidin, sianidin, peonidin, delphinidin, pertunidin, dan malvidin (Fernando dan Senaadera, 2008).

Hasil penelitian menunjukkan sianidin memiliki efisiensi yang lebih baik berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Ekanayake dkk. (2013) menggunakan ekstrak antosianin dari *Canarium odonthophyllum*. Hasil yang diperoleh menunjukkan efisiensi konversi energi matahari sianidin sebesar 1.43%, pelargonidin sebesar 0.87%, dan maritimein sebesar 0.60%.

Selain secara eksperimen, penggunaan sianidin untuk senyawa dye pada DSSC juga telah dipelajari secara komputasi. Salah satunya penelitian yang dilakukan oleh Ainurraziqin (2016) yang mengkombinasikan antara sianidin dengan salah satu asam siano, yakni sianoasetat. Metode komputasi yang digunakan adalah metode DFT dan TDDFT dengan basis set 6-31G*. Hasil yang diperoleh menunjukkan sianidin dengan modifikasi sianoasetat memiliki panjang ikatan sebesar 1.937 Å dengan selisih energi HOMO-LUMO sebesar 3.21 eV. Pada penelitian ini, akan digunakan basis set yang berbeda yaitu 6.311G* agar menghasilkan efisiensi yang lebih baik.

Penelitian lain oleh Galappathhi dkk. (2016) mengkombinasikan sianidin dengan sianosinamik menggunakan metode DFT dan TDDFT. Hasil yang diperoleh menunjukkan energi LUMO sianosinamik yang dimodifikasi dengan sianidin memiliki nilai tertinggi dari pita konduksi tingkat TiO₂. Sianidin memiliki tingkat LUMO tanpa optimasi sebesar -3.82 eV dan tingkat LUMO dengan optimasi sebesar -3.39 eV.

Sementara itu, untuk sianidin yang dimodifikasi dengan sianosinamik memiliki hasil energi LUMO sebesar -3,90 eV dan -3.66 eV. Pada penelitian ini digunakan metode dan senyawa yang sama, namun basis set yang berbeda yaitu 6.311G*.

Terkait penggunaan asam siano, Peng Qi dkk. (2008) telah mempelajari turunan asam siano yang lain, yakni sianovinil yang diikat pada senyawa trifenilamin. Metode yang digunakan, yaitu DFT dengan tingkat B3LYP/6.31G*. Hasilnya menunjukkan tingkat LUMO senyawa sianovinil menjadi akseptor elektron, sehingga dapat digunakan sebagai DSSC tipe-p dan menghasilkan selisih energi HOMO-LUMO, yaitu 0.67 eV. Perbedaan antara penelitian yang dilakukan dengan Peng Qi dkk dengan penelitian yang dilakukan adalah senyawa *dye* yang digunakan dan basis set yang berbeda yaitu 6.311G*.

Turunan asam siano lainnya yang telah dipelajari adalah benzothiadizol sianoakrilik (Yongzhen Wu dan Welhong Zu, 2012). Parameter yang dipelajari adalah energi eksitasi dan kekuatan osillator dengan menggunakan metode TDDFT. Hasilnya menunjukkan penggunaan benzothiadizol sianoakrilik pada DSSC dilakukan dengan pengukuran pada tingkat HOMO-LUMO diperoleh selisih sebesar 2.57 eV, sedangkan nilai kekuatan osillator sebesar 1.3202.

Parameter lain yang dapat diukur secara komputasi, yaitu efisiensi penyerapan cahaya atau *light harvesting efficiency* (LHE). Obotowo dkk. (2016) melaporkan nilai LHE senyawa fenil 4- [bis(4-oktooksilfenil)] amino dengan senyawa *dye* APP-IV menggunakan metode DFT sebesar 0.8611, nilai V_{oc} 691 mV, faktor pengisian sel (FF) sebesar 0.76, dan efisiensi sebesar 7.12%.

Penelitian lain oleh Wenjie Fan, (2012) menghitung nilai efisiensi penyerapan cahaya (LHE) untuk senyawa trifenilamin. Metode yang digunakan,

yaitu DFT dan TDDFT. Hasilnya menunjukkan nilai LHE sebesar 0.9677. Dua penelitian di atas menunjukkan bahwa nilai LHE dapat digunakan sebagai parameter teoritis DSSC.

Parameter DSSC lain yang dapat diukur secara komputasi adalah konstanta kopling (V_{RP}). Logsdail dkk. (2017) menghitung nilai konstanta kopling magnetik pada senyawa MnO menggunakan metode DFT. Hasil penelitian menunjukkan bahwa MnO memproduksi sedikit konstanta kopling magnetik dan struktur rhombohedral terdistorsi. Sifat MnO dihitung dengan *generalized gradient approximation* (GGA-). Penelitian di atas menunjukkan nilai konstanta kopling dapat digunakan sebagai parameter teoritis DSSC.

Berdasarkan uraian di atas, potensi pemanfaatan sianidin sebagai senyawa *dye* pada DSSC diharapkan dapat dimaksimalkan menggunakan turunan asam siano. Penelitian ini dilakukan secara teoritis untuk memperkirakan sifat-sifat dan peningkatan efisiensi sianidin sebagai senyawa *dye* DSSC. Modifikasi yang dilakukan yaitu menggunakan sianidin sebagai donor dan turunan asam siano sebagai akseptor elektron. Perubahan basis set dapat menghasilkan hasil yang lebih akurat dan baik. Sehingga pada penelitian ini digunakan metode DFT dan TDDFT dengan basis set 6.311G*.

Parameter teoritis yang akan digunakan untuk mengetahui hasil modifikasi tersebut adalah energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 . Perbedaan sebaran elektron pada masing-masing modifikasi akan menyebabkan perbedaan nilai pada masing-masing parameter tersebut. Harapannya, modifikasi yang dilakukan akan menunjukkan pengaruh

penggunaan turunan asam siano sebagai gugus pendonor dan akseptor elektron pada sianidin sehingga dapat dilakukan modifikasi lebih lanjut.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini sebagai berikut:

1. Turunan asam siano yang akan digunakan sebagai akseptor elektron, antara lain asam sianoasetat, benzothiadizol sianoakrilik, asam sianovinil, dan asam sianosinamik.
2. Parameter teoritis yang akan digunakan, meliputi energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 .

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang dan batasan masalah di atas, maka dapat dirumuskan masalah sebagai berikut:

1. Bagaimana pengaruh asam sianoasetat, benzothiadizol sianoakrilik, asam sianovinil, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik fotoelektrik sianidin berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 ?

2. Turunan asam siano manakah yang dapat menghasilkan karakteristik fotoelektrik sianidin yang lebih baik berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 ?

D. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas maka tujuan penelitian ini, antara lain sebagai berikut:

1. Mengetahui pengaruh asam sianoasetat, benzothiadizol sianoakrilik, asam sianovinil, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik fotoelektrik sianidin berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 .
2. Menemukan turunan asam siano yang dapat menghasilkan karakteristik fotoelektrik sianidin yang lebih baik berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 .

E. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah menghasilkan referensi teoritis mengenai metode yang dapat digunakan dalam karakteristik fotoelektrik sianidin sebagai senyawa *dye* pada DSSC dan mengetahui pengaruh beberapa gugus siano yang digunakan sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik fotoelektrik sianidin berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, lokalisasi elektron LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (*light harvesting efficiency*), konstanta kopling (V_{RP}), dan panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 .



BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Pengaruh adanya sianovinil, benzothiadizol sianoakrilik, sianoasetat, dan sianosinamik mempunyai kelebihan dan kekurangan masing-masing. Sianidin dan sianosinamik menyebabkan elektron berpusat pada atom O-3 sianidin sehingga kurang efektif dalam DSSC. Sementara untuk sianidin sianoasetat, sianidin benzothiadizol sianoakrilik dan sianidin sianovinil mempunyai efek yang sama, yaitu elektron berpusat pada gugus sianoasetat, benzothiadizol sianoakrilik dan sianovinil yang menyebabkan naiknya efektivitas DSSC.
2. Sianidin sianoasetat menjadi modifikasi terbaik berdasarkan parameter energi HOMO LUMO dengan hasil -4,569 dan -1,01 eV. Pada parameter lokalisasi elektron, modifikasi terbaik dihasilkan pada sianidin sianoasetat dengan pola elektron berpusat pada gugus sianoasetat. Parameter spektra menghasilkan modifikasi terbaik yaitu sianidin sianoasetat dengan panjang gelombang 378,811 nm dengan kekuatan osillator 0,633. Parameter efisiensi penyerapan cahaya menghasilkan modifikasi terbaik pada sianidin sianoasetat dengan nilai sebesar 0,767. Parameter konstanta kopling, modifikasi terbaik adalah sianidin benzothiadizol sianoakrilik dengan nilai -0,269. Modifikasi terbaik pada

parameter panjang ikatan *sensitizer* dengan TiO_2 adalah sianidin sianoasetat dengan panjang ikatan sebesar $1,926 \text{ \AA}$

B. Saran

1. Perlu dilakukan studi lebih lanjut di dalam laboratorium secara eksperimen.



DAFTAR PUSTAKA

- Aditya. C. N. Aplikasi Senyawa Kompleks Siklometal Iridium Dalam Oled's dan Dssc (Dye Sensitized Solar Cell). Fmipa Universitas Negeri Semarang. 2015.
- Affandi. 2016. Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSSC). *Skripsi*. Program Studi Kimia. Fakultas Sains dan Teknologi. UIN Sunan Kalijaga: Yogyakarta.
- Ainurraziqin, Moh. Irfan. 2017. Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Sianoasetat pada Sianidin sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSS). *Skripsi*. Program Studi Kimia. Fakultas Sains dan Teknologi. UIN Sunan Kalijaga: Yogyakarta.
- Capelle, K., 2006. A Bird's-Eye View of Density-Functional Theory.
- Deviantin. Studi Komputasi Kompleks Molekul Zat Warna Unggulan Pada DSSC. *Tesis*. Program Studi Magister Kimia, ITB. 2014.
- Dewi, P. A.; Gunawan.; Haris. A.; Pengaruh Pelarut Metanol dan Pelarut Metanol-Asam-Asetat-Air Terhadap Efisiensi *Dye Sensitized Solar Cell* dari Ekstrak Bunga Rosela (*Hibiscus Sabdariffa*). Jurusan Kimia. FMIPA. Universitas Diponegoro. 2010.
- Ekanayake, P.; Kooh, M. R. R.; Kumara. N. T. R. N.; Lim, A.; Petra, M. I.; Yoong, V. N.; Ming, L. C. Combined Experimental and DFT-TDDFT Study of Photo-active Constituents of *Canarium Odontophyllum* for DSSC Application. *Chemical Physics Letters. Elsevier*. 2013.
- Farima, devi. 2009. Karakterisasi dan Ekstraksi Simplisia Bunga Mawar (Rose hybrida L) serta formulasinya dalam Sediaan Pewarna Bibir. *Skripsi*. Fakultas Farmasi. Universitas Sumatera Utara : Medan
- Fernando, J., dan Senadeera, G.K.R., 2008. Natural anthocyanins as photosensitizers for dye-sensitized solar devices. *Curr. Sci*, 95 (5), 10.
- Galapathi, K., Ekanayake, P., Petra, M.K. 2016. Computational study of modification of cyanidin as high efficient organic sensitizer for dye sensitized solar cells. Brunai Darussalam. *Scientia Bruneiana Special Issue*.
- Harborne JB. 1958. Spectral methods of characterizing anthocyanins. *Biochem J* 70:22-28.
- Hardeli. Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Berbasis Nanopori TiO₂ Menggunakan

- Antosianin dari Berbagai Sumber Alami. Prosiding Semirata FMIPA Universitas Lampung, 2013
- Harianto, B. Studi Awal Fabrikasi *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) Berbasis Pemeka *Erithrosine*. Tesis. Program Studi Magister Kimia, ITB. 2014.
- 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* 11222.2016.80-87.
- Li Yuanzuo, Chaofan Sun, Peng Song, Fengcai Ma, dan Yanhui Yang. 2017. Tuning the Electron-Transport and Electron-Accepting Abilities of Dyes through Introduction of Different π -Conjugated Bridges and Acceptors for Dye-Sensitized Solar Cells. *CHEMPHYS CHEM* DOI:10.1002/cphc.2016.01101.
- Liang, M., Xu, W., Cai, F., Chen, Q., Peng, B., Chen, Jun., dan Li, Z., 2007. New Triphenylamine-Based Organic Dyes for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells. *J. Phys. Chem. C* 2007, 111, 4465-4472
- Longsdail, A., A. Catlow, A. Downing, A. Sokol., 2017. Magnetic coupling constants for MnO as calculated using hybrid density functional theory. *Chemical Physics Letters* 690 (2017) 47–53
- Kazici, M., Bozar, S., Yuksel, S.A., Ongul, F., Gokce, H., Gunes, S., dan Goreci, C.Y., Theoretical and experimental investigations of the 2-(4-chlorophenyl)-3-{[5-(2-cyano-2-phenylethenyl)]furan-2-yl}acrylonitrile molecule as a potential acceptor in organic solar cells. *Nanotechnology* 27 (2016) 234003.
- Kim, B.G., Chung, K., dan Kim, J. 2013. Molecular Design Principle of All-organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *Chem. Eur. J.* 2013, 19, 5220 – 5230.
- Maddu, A.; Zuhri. M.; Irmansyah. Penggunaan Ekstrak Antosianin Kol Merah sebagai Fotosensitizer pada Sel Surya TiO₂ Nanokristal Tersensitasi Dye. Departemen Fisika, FMIPA, IPB, Bogor. 2007.
- Mirsha, A., Fischer, M.K., dan Bauerle, P., 2009. Review Metal-Free Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: From Structure: Property Relationships to Design Rules, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, 48, 2474 – 2499.
- Preat, J.; Michaux, C.; Jacquemin, D.; Perpete, E. A. Enhanced Efficiency of Organic Dye-Sensitized Solar Cells: Triphenylamine Derivatives. *J. Phys. Chem.* 2009, 113, 16821–16833..
- Pujiarti, H. *Kajian Karakteristik Fotovoltaik dan Impedensi dari Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) dengan Gel Elektrolit*. Tesis. Departemen Fisika, ITB. 2014.

- Putri., dkk. 2015. Aktivitas Antioksidan Antosianin dalam Ekstrak Etanol Kulit Buah Naga Super Merah (*Hylocereus costaricensis*) dan Analisis Kadar Totalnya. *Jurnal Kimia* 9(2).2015, 243-251.
- Qin, P., Zhu, H., Edvinson, T., Boschloo, G., Hagfeldt, A., dan Sun, L., 2008. Design of an Organic Chromophore for P-Type Dye-Sensitized Solar Cells. *J. Am. Chem. Soc.* 2008, 130, 8570–8571.
- Rahman, H.; Prajitno, G. Pengaruh Pemberian Space (Bantalan) untuk Mendapatkan Kestabilan Arus dan Tegangan Prototipe DSSC dengan Ekstraksi Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) sebagai Dye Sensitizer. Jurusan Fisika.FMIPA. ITS. 2013.
- Shen, P.; Liu, Y.; Huang, X.; Zhao, B.; Xiang, N.; Fei, J.; Liu, L.; Wang, X.; Huang, H.; Tan, S. Efficient Triphenylamine Dyes for Solar Cells: Effects of Alkyl-substituents and π -conjugated Thiophene Unit. *Dyes and Pigments*. Elsevier. 2009.
- Senthil T.S., Muthukumarasamy N., DhayalanVelauthapillai, S. Agilan, M. Thambidurai, R. Balasundrappabhu., 2011. Natural Dye (Cyanidin 3-O-Glucoside) Sensitized Nanocrystalline TiO₂ Solar Cell Fabricated Using Liquid Electrolyte/ Quasi-Solid-State Polymer Electrolyte. *Renewable Energy* 2011, 36, 2484-2488.
- Sundari, Citra Deliana Dewi., 2012. Investigasi TD-DFT Pada Struktur Elektronik dan Spektrum Absorpsi Kompleks cis-(Ru(H₂dcbbpy)₂(SCN) dan cis-(Ru(H₂dcbbiq)₂(SCN)₂) Fasa Gas dan Fasa Larutan Etanol Untuk Aplikasi DSSC. Institut Teknologi Bandung.
- Uuriintya D. and Sang- Woo Joo. 2010. Infrared Spectroscopic Study of α -Cyano-4-hydroxycinnamic Acid on Nanocrystalline TiO₂ Surfaces: Anchoring of Metal-Free Organic Dyes at Photoanodes in Dye-Sensitized Solar Cells. *Bull. Korean Chem. Soc.* 2010, Vol. 31, No. 1
- Wahyuono, R.A., dan D.D. Risanti. Quasi-solid State DSSC Performance Enhancement by Bilayer Mesoporous TiO₂ Structure Modification. *Advanced Materials Research* Vol. 789 (2013). Pp 93-96
- Wenjie Fan, Dazhi Tan, and Wei-Qiao Deng, Acene-Modified Triphenylamine Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: A Computational Study. *ChemPhysChem* 2012, 00, 1 – 11.
- Wulandari Handini. Performa sel surya tersensitasi zat pewarna (DSSC) berbasis ZnO dengan variasi tingkat pengisian dan besar kristal TiO₂. Universitas Indonesia, 2008.
- Yongzhen Wu dan Weihong Zu, Organic sensitizers from D-p-A to D-A-p-

A:effect of the internal electron-with drawing units on molecular absorption, energy levelsand photovoltaic performances,*Chem. Soc. Rev.* 2012, 42,2039-2058.

Xu, W.; Peng, B.; Chen, J.; Liang, M.; Cai, F. New Triphenylamine-Based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *J. Phys. Chem.* 2008, 112, 874-880.



