

**KAJIAN TEORITIS PENGARUH GUGUS TRIFENILAMIN  
DAN ASAM SIANOASETAT PADA PELARGONIDIN  
SEBAGAI SENYAWA *DYE* SEL SURYA TERSENSITASI  
(DSSC)**

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



**Gandur Sembodo Affandi  
12630030**

**PROGRAM STUDI KIMIA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA  
2016**



**PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR**

Nomor : B.3462/Un.02/DST/PP.05.3/09/2016

Skripsi/Tugas Akhir dengan judul : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin Sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

Yang dipersiapkan dan disusun oleh :  
Nama : Gandur Sembodo Affandi  
NIM : 12630030  
Telah dimunaqasyahkan pada : 16 September 2016  
Nilai Munaqasyah : A-  
Dan dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga

**TIM MUNAQASYAH :**

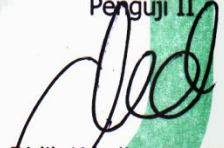
Ketua Sidang

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

Penguji I

  
Pedy Artsanti, M.Sc.

Penguji II

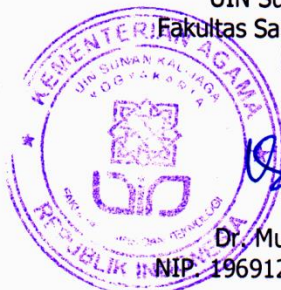
  
Didik Krisdiyanto, M.Sc.  
NIP. 19811111 201101 1 007

Yogyakarta, 21 September 2016

UIN Sunan Kalijaga

Fakultas Sains dan Teknologi

Dekan



  
Dr. Murtono, M.Si.

NIP. 19691212 200003 1 001



**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 : Gandur Sembodo Affandi

NIM : 12630030

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin 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, 12 Agustus 2016

Pembimbing,

Sudarlin, M.Si.

NIP.: 19850611 201503 1 002



## 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 : Gandur Sembodo Affandi  
NIM : 12630030  
Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin 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, 12 Agustus 2016

Pembimbing,

Pedy Aritsanti, S.Si., M.Sc.

NIP.: 19720306 000000 2 301

Didik Krisdiyanto, M.Sc.

**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 : Gandur Sembodo Affandi

NIM : 12630030

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

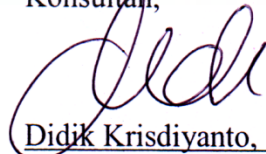
sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

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

*Wassalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh*

Yogyakarta, 21 Sempتمبر 2016

Konsultan,



Didik Krisdiyanto, M.Sc.

NIP.: 19811111 201101 1 007

Pedy Artsanti, S.Si., M.Sc.

## **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 : Gandur Sembodo Affandi

NIM : 12630030

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

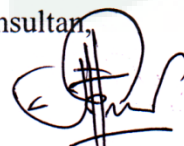
sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

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

*Wassalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh*

Yogyakarta, 21 September 2016

Konsultan,



Pedy Artsanti, S.Si., M.Sc.

NIP.: 19720306 000000 2 301

Sudarlin, M.Si.

**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 : Gandur Sembodo Affandi

NIM : 12630030

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

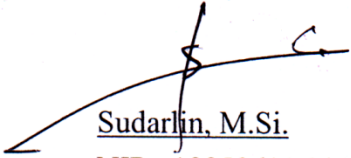
sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

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

*Wassalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh*

Yogyakarta, 21 September 2016

Konsultan,

  
Sudarlin, M.Si.

NIP.: 19850611 201503 1 002

## SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Gandur Sembodo Affandi

NIM : 12630030

Jurusan : Kimia

Fakultas : Sains dan Teknologi

menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul **“Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin 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, 8 Agustus 2016



NIM : 12630030



## HALAMAN PERSEMBAHAN

Dengan mengucap rasa syukur kepada Allah SWT, atas segala rahmat, hidayah serta nikmat sehingga Penulis bisa menyelesaikan karya ilmiah ini.

Karya ini kupersembahkan kepada:

Almamaterku Prodi Kimia  
Fakultas Sains dan Teknologi  
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

Bapak, Mama dan Keluarga besarku  
Terima kasih atas segala cinta, kasih sayang, dukungan  
dan doa yang senantiasa terukir dalam kehidupanku.

## KATA PENGANTAR

Segala puji bagi *Rabbul'alam* yang telah memberi kesempatan dan kekuatan sehingga skripsi yang berjudul “Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa *Dye* Sel Surya Tersensitasi (DSSC)” ini dapat diselesaikan sebagai salah satu persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia.

Penyusun 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 tersebut 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 Jurusan Kimia yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama studi
3. Sudarlin, M.Si. selaku dosen Pembimbing skripsi yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama penelitian skripsi sekaligus sebagai pembimbing penyusunan skripsi yang secara ikhlas dan sabar telah meluangkan waktunya untuk membimbing, mengarahkan, dan memotivasi penyusun dalam menyelesaikan penyusunan skripsi.
4. Pedy Artsanti, M.Sc. selaku dosen Pembimbing skripsi yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama penelitian skripsi sekaligus sebagai pembimbing penyusunan skripsi yang secara ikhlas dan sabar telah

meluangkan waktunya untuk membimbing, mengarahkan, dan memotivasi penyusun dalam menyelesaikan penyusunan skripsi.

5. Irwan Nugraha, M.Si. selaku dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama studi sehingga dapat menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
6. Seluruh Staf Karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu sehingga penyusunan skripsi ini dapat berjalan dengan lancar.
7. Bapak Affandi dan Ibu Sumiyati selaku orang tua kandung yang telah memberikan doa, motivasi dan segalanya selama studi di Kimia Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
8. Sahabat GengGong dan keluarga besar yang senantiasa selalu memberikan motivasi dan semangat.
9. Teman-teman kimia UIN Sunan Kalijaga angkatan 2012 atas kerjasama, saran, dan bantuannya.
10. Semua pihak yang tidak bisa penulis sebutkan satu persatu 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, 28 Agustus 2016

Gandur Sembodo Affandi  
12630030

## DAFTAR ISI

PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR .....	ii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR .....	iii
NOTA DINAS KONSULTAN .....	v
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	viii
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	ix
KATA PENGANTAR .....	x
DAFTAR ISI.....	xii
DAFTAR GAMBAR .....	xiv
DAFTAR TABEL.....	xvi
ABSTRAK .....	xvii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
A. Latar Belakang .....	1
B. Batasan Masalah .....	3
C. Rumusan Masalah.....	4
D. Tujuan Penelitian .....	4
E. Manfaat Penelitian .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI.....	6
A. Tinjauan Pustaka.....	6

B.	Landasan teori .....	8
C.	Hipotesis Penelitian.....	13
<b>BAB III</b>	<b>METODE PENELITIAN.....</b>	<b>17</b>
A.	Waktu dan Tempat Penelitian .....	17
B.	Alat-alat Penelitian.....	17
C.	Rancangan Penelitian .....	17
D.	Prosedur Penelitian .....	18
E.	Proses Kalkulasi.....	19
<b>BAB IV</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>20</b>
A.	Pemilihan Metode .....	21
B.	Optimasi Molekul dan Energi HOMO-LUMO.....	22
C.	Posisi Orbital Energi pada Keadaan HOMO dan LUMO.....	26
D.	Panjang Ikatan.....	29
E.	Spektra .....	33
<b>BAB V</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN.....</b>	<b>36</b>
A.	Kesimpulan .....	36
B.	Saran.....	36
	<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>37</b>
	<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>41</b>

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1. Penampang DSSC .....	9
Gambar 2. 2. Struktur dari pelargonidin .....	11
Gambar 2. 3. Proses deprotonasi pelargonidin.....	11
Gambar 2. 4. Struktur trifenilamin.....	12
Gambar 2. 5. Struktur asam sianoasetat .....	12
Gambar 2. 6. Pembagian metode komputasi.....	13
Gambar 3. 1. Proses kalkulasi.....	19
Gambar 4. 1. Optimasi DFT pelargonidin .....	22
Gambar 4. 2. Optimasi DFT pelargonidin + trifenilamin .....	24
Gambar 4. 3. Optimasi DFT pelargonidin + sianoasetat.....	24
Gambar 4. 4. Kurva HOMO-LUMO.....	25
Gambar 4. 5. Pelargonidin (a) HOMO dan (b) LUMO.....	27
Gambar 4. 6. Pelargonidin + trifenilamin (a) HOMO dan (b) LUMO .....	28
Gambar 4. 7. Pelargonidin + sianoasetat (a) HOMO (b) LUMO .....	29
Gambar 4. 8. Panjang ikatan atom pelargonidin .....	30

Gambar 4. 9. Panjang ikatan pelargonidin + trifenilamin.....	31
Gambar 4. 10. Panjang ikatan pelargonidin + sianasetat .....	32
Gambar 4. 11. Spektrum absorpsi pelargonidin.....	33
Gambar 4. 12. Spektrum absorpsi pelargonidin + trifenilamin.....	34
Gambar 4. 13. Spektrum absorpsi pelargonidin + sianasetat.....	35



## DAFTAR TABEL

Tabel 4.1. Energi eksitasi data eksperimen dan perhitungan.....	21
Tabel 4.2. Nilai muatan mulliken.....	23
Tabel 4.3. Energi HOMO-LUMO.....	25
Tabel 4.4. Panjang ikatan dari masing-masing senyawa.....	32





## ABSTRAK

### KAJIAN TEORITIS PENGARUH GUGUS TRIFENILAMIN DAN ASAM SIANOASETAT PADA PELARGONIDIN SEBAGAI SENYAWA DYE SEL SURYA TERSENSITASI (DSSC)

Oleh:  
**Gandur Sembodo Affandi**  
**12630030**

Penelitian ini dilakukan secara teoritis untuk memperkirakan sifat-sifat dan efisiensi modifikasi senyawa DSSC. Modifikasi yang dilakukan menggunakan pelargonidin sebagai senyawa utama, asam sianoasetat sebagai akseptor elektron, dan senyawa trifenilamin (TPA) sebagai donor elektron. Parameter teoritis yang akan digunakan modifikasi adalah panjang ikatan antara Ti dan molekul *sensitizer*, spektra, serta posisi kerapatan elektron pada posisi HOMO dan LUMO. Optimasi geometri menggunakan software *Nw-Chem* basis set 6-31G\*. Optimasi keadaan dasar menggunakan metode DFT-B3LYP dan optimasi keadaan tereksitasi menggunakan metode TDDFT. Hasil penelitian dari parameter panjang ikatan menunjukkan bahwa antara Ti dan molekul *sensitizer* umumnya berikatan. Pada parameter energi ikat menunjukkan bahwa pelargonidin + sianoasetat memiliki selisih energi HOMO-LUMO yang kecil yaitu 2,552 eV. Hasil spektra yang berperan efektif dalam DSSC adalah pelargonidin + sianoasetat yang memiliki serapan panjang gelombang 411,874 nm dan 475,943 nm. Parameter kerapatan elektron dalam pada posisi HOMO-LUMO menunjukkan bahwa pengaruh trifenilamin sebagai donor elektron tidak signifikan meningkatkan efisiensi sel surya, sebaliknya peran sianoasetat cenderung berpengaruh dalam efisiensi sel surya. Modifikasi pelargonidin terbaik yang mampu meningkatkan efisiensinya sebagai dye sel surya adalah pelargonidin + sianoasetat.

Kata kunci : DSSC, eksitasi, HOMO & LUMO, dan Pelargonidin.

# BAB I PENDAHULUAN

## A. Latar Belakang

Sel surya merupakan energi alternatif yang mengkonversi sinar matahari menjadi listrik. Secara umum, sel surya dikelompokkan menjadi beberapa jenis, yaitu sel surya berbahan dasar semikonduktor, berbahan senyawa organik, berbahan polimer, dan sel surya tersensitasi *dye* (Lee *et al.*, 2011). Berdasarkan tahap perkembangannya, sel surya meliputi tiga generasi, yaitu generasi *single junction silicon cell* atau sel silikon sambungan tunggal monokristal dan polikristal, generasi sel surya film tipis (*thin film solar cells*), serta sel surya generasi sel surya dari bahan-bahan non-semikonduktor atau *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC). Sel surya generasi terakhir dikembangkan oleh Micheal Gratzel pada tahun 1991 (Ningsih dan Hastuti., 2012).

Sel surya DSSC memiliki beberapa kelebihan, yakni biaya fabrikasinya relatif murah karena menggunakan material dasar yang murah, preparasi mudah, serta memiliki kemampuan konversi energi cahaya menjadi listrik yang tinggi (Shi *et al.*, 2009). Sel surya ini memanfaatkan keadaan tereksitasi molekul senyawa *dye* yang dapat menginjeksikan elektronnya pada bahan semikonduktor.

Beberapa senyawa alam yang dapat digunakan sebagai senyawa *dye* pada DSSC adalah antosianin, klorofil, dan xantofil (Kumara dan Prajitno., 2012). Antosianin 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. Turunan senyawa ini telah banyak diteliti dan digunakan sebagai senyawa *dye* pada DSSC. Beberapa diantaranya adalah pelargonidin (orange), sianidin (orange-merah), penoidin (orange-merah), delphinidin (biru-merah), petunidin (biru-merah), dan malvidin (biru-merah) (Rondonuwu *et al.*, 2013).

Pelargonidin dan sianidin dapat ditemukan pada *Canarium odontophyllum*. Sebagai senyawa *dye*, pelargonidin menghasilkan efisiensi sebesar 0,79% (Lim *et al.* 2015) atau 0,87% (Ekanayake *et al.*, 2013). Nilai ini masih sangat rendah sehingga dibutuhkan modifikasi yang dapat meningkatkan efisiensi pelargonidin.

Modifikasi dapat dilakukan berdasarkan asumsi dasar susunan *dye* dalam DSSC. Sebagian besar *sensitizer* terdiri dari gugus donor elektron (D), jembatan  $\pi$  terkonjugasi dan akseptor elektron (A) yang sering disebut molekul D- $\pi$ -A (Preat *et al.*, 2009). Jembatan  $\pi$  selain berfungsi sebagai penghubung akseptor dan donor elektron, juga penentu daerah penyerapan cahaya dari DSSC (Shen *et al.*, 2009). Berdasarkan skala teoritis dan eksperimental, jembatan  $\pi$  terkonjugasi mempengaruhi sifat fotoelektrokimia dan efisiensi *sensitizer* (Xu *et al.*, 2008).

Hasil beberapa penelitian telah memperkenalkan trifenilamin (TPA) dan asam sianoasetat sebagai molekul yang potensial dikembangkan sebagai donor elektron dan akseptor elektron. Pengenalan TPA sebagai donor elektron dapat memperpanjang wilayah penyerapan pewarna organik pada cahaya tampak. Hasil penelitian yang lain menunjukkan efisiensi DSSC menggunakan trifenilamin rata-rata sebesar 7,2% (Hagberg *et al.*, 2008) sedangkan efisiensi DSSC menggunakan asam sianoasetat sebagai akseptor sebesar 5,06% (Wu *et al.*, 2013).

Berdasarkan hal tersebut, trifenilamin dan asam sianasetat diharapkan dapat meningkatkan efisiensi pelargonidin sebagai senyawa *dye*. Penelitian ini dilakukan secara teoritis untuk memperkirakan sifat-sifat dan peningkatan efisiensi pelargonidin sebagai senyawa *dye* DSSC. Modifikasi yang dapat dilakukan adalah menggunakan pelargonidin sebagai donor dan asam sianasetat sebagai akseptor elektron atau senyawa trifenilamin (TPA) sebagai donor dan pelargonidin sebagai akseptor elektron.

Parameter teoritis yang akan digunakan untuk mengetahui hasil modifikasi adalah panjang ikatan antara Ti dan molekul *sensitizer*, energi ikat, spektra, serta posisi kerapatan elektron pada posisi HOMO dan LUMO. Perbedaan sebaran elektron pada masing-masing modifikasi akan menyebabkan perbedaan nilai pada masing-masing parameter tersebut. Harapannya, modifikasi yang dilakukan akan menunjukkan pengaruh penggunaan trifenilamin dan asam sianasetat sebagai gugus pendonor dan akseptor elektron pada pelargonidin sehingga dapat dilakukan modifikasi lebih lanjut.

## **B. Batasan Masalah**

Batasan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Modifikasi dilakukan dalam 2 bentuk yaitu pelargonidin sebagai donor dan asam sianasetat sebagai akseptor elektron atau pelargonidin sebagai akseptor elektron dan trifenilamin sebagai donor.
2. Parameter yang digunakan adalah panjang ikatan, spektra, dan kerapatan elektron molekul.

### **C. Rumusan Masalah**

Rumusan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Bagaimana pengaruh trifenilamin dan asam sianasetat sebagai donor dan akseptor elektron terhadap efisiensi fotoelektrik pelargonidin berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, dan kerapatan elektron molekul?
2. Bagaimana modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan efisiensi terbaik untuk pelargonidin sebagai senyawa *dye* pada DSSC?

### **D. Tujuan Penelitian**

Tujuan penelitian pada penelitian ini adalah:

1. Mempelajari pengaruh trifenilamin dan asam sianasetat sebagai donor dan akseptor elektron terhadap efisiensi fotoelektrik pelargonidin berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, dan kerapatan elektron molekul.
2. Menentukan modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan efisiensi terbaik untuk pelargonidin sebagai senyawa *dye* pada DSSC

### **E. Manfaat Penelitian**

Manfaat penelitian ini adalah:

1. Menghasilkan referensi teoritik mengenai metode yang dapat digunakan dalam meningkatkan efisiensi pelargonidin sebagai senyawa *dye* pada DSSC.

2. Pengaruh trifenilamin dan asam sianasetat sebagai donor dan akseptor elektron terhadap efisiensi fotoelektrik pelargonidin berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, dan kerapatan elektron molekul



## **BAB V**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **A. Kesimpulan**

Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan dapat ditarik kesimpulan antara lain:

1. Berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, energi HOMO-LUMO dan kerapatan elektron molekul, pengaruh trifenilamin sebagai donor elektron tidak signifikan meningkatkan efisiensi sel surya, sebaliknya sianoasetat potensial meningkatkan efisiensi sel, sedangkan peran sianoasetat cenderung berpengaruh dalam efisiensi fotoelektrik.
2. Modifikasi pelargonidin terbaik yang mampu meningkatkan efisiensinya sebagai dye sel surya adalah kombinasi pelargonidin + sianoasetat.

#### **B. Saran**

1. Mempelajari laju transfer elektron dari modifikasi senyawa kompleks yang telah tereksitasi ke semikonduktor TiO<sub>2</sub>.
2. Mempelajari secara eksperimen.

## DAFTAR PUSTAKA

- Ati, N.H., Rahayu, P., Notosoedarmo, S., dan Limantara, L., 2010. The Composition and The Content of Pigments from Some Dyeing Plant for Ikat Weaving in Timorrese Regency, Nusa Tenggara Timur. *Indonesian Journal of Chemistry*, 6 (3), 325–331.
- Bonho<sup>^</sup>te, P., Moser, J.-E., Humphry-Baker, R., Vlachopoulos, N., Zakeeruddin, S.M., Walder, L., dan Grätzel, M., 1999. Long-lived photoinduced charge separation and redox-type photochromism on mesoporous oxide films sensitized by molecular dyads. *Journal of the American Chemical Society*, 121 (6), 1324–1336.
- Chan, Chung Chown., Herman Lam., Y.C. Lee., Zue Ming., 2004. *Analytical Method Validation And Instrument Performance Verification*. John Willey & sons, Inc publication. Ney Jersey.
- Chen, C.-Y., Wu, S.-J., Wu, C.-G., Chen, J.-G., dan Ho, K.-C., 2006. A Ruthenium Complex with Superhigh Light-Harvesting Capacity for Dye-Sensitized Solar Cells. *Angewandte Chemie*, 118 (35), 5954–5957.
- Choi, H., Lee, J.K., Song, K.H., Song, K., Kang, S.O., dan Ko, J., 2007. Synthesis of new julolidine dyes having bithiophene derivatives for solar cell. *Tetrahedron*, 63 (7), 1553–1559.
- Deviyanti., 2014., Studi Komputasi Kompleks Molekul Zat Warna Unggulan pada DSSC., Skripsi S-1., Institut Teknologi Bandung.
- Ekanayake, P., Kooh, M.R.R., Kumara, N., Lim, A., Petra, M.I., Voo, N.Y., dan Lim, C.M., 2013. Combined experimental and DFT–TDDFT study of photo-active constituents of *Canarium odontophyllum* for DSSC application. *Chemical Physics Letters*, 585, 121–127.
- Fernando, J., dan Senadeera, G.K.R., 2008. Natural anthocyanins as photosensitizers for dye-sensitized solar devices. *Curr. Sci*, 95 (5), 10.
- Foresman, J. B., dan Frisch, JE., 1993. *Exploring Chemistry with Elektronik Structure Method*. 2<sup>nd</sup> edition. Gaussian, Inc, Pittsburg, PA, 3-7, 61-69, 97-99.
- Hagberg, D.P., Yum, J.-H., Lee, H., De Angelis, F., Marinado, T., Karlsson, K.M., Humphry-Baker, R., Sun, L., Hagfeldt, dan A., Grätzel, M., 2008. Molecular engineering of organic sensitizers for dye-sensitized solar cell applications. *Journal of the American Chemical Society*, 130 (19), 6259–6266.



- Hara, K., Sato, T., Katoh, R., Furube, A., Yoshihara, T., Murai, M., Kurashige, M., Ito, S., Shinpo, dan A., Suga, S., 2005. Novel Conjugated Organic Dyes for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells. *Advanced Functional Materials*, 15 (2), 246–252.
- Iwan, A. dan Sek, D., 2011. Polymers with triphenylamine units: Photonic and electroactive materials. *Progress in Polymer Science*, 36 (10), 1277–1325.
- Kumara, M.S.W. dan Prajitno, G., 2012. Studi Awal Fabrikasi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) dengan Menggunakan Ekstraksi Daun Bayam (*Amaranthus Hybridus L.*) sebagai Dye Sensitizer dengan Variasi Jarak Sumber Cahaya pada DSSC. *Jurnal Ilmiah. Institut Teknologi Sepuluh Nopember. Surabaya*.
- Lee, J.-J., Ahammad, A.S., Lee, J.K., Rahman, M.M., Nath, N.D., dan Sarker, S., 2011. *Metal oxides and their composites for the photoelectrode of dye sensitized solar cells*. INTECH Open Access Publisher.
- Li, B., Wang, L., Kang, B., Wang, P., dan Qiu, Y., 2006. Review of recent progress in solid-state dye-sensitized solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 90 (5), 549–573.
- Lim, A., Kumara, N., Tan, A.L., Mirza, A.H., Chandrakanthi, R.L.N., Petra, M.I., Ming, L.C., Senadeera, G.K.R., dan Ekanayake, P., 2015. 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, 596–602.
- Lopes, Fatima., Pascual, Sonia., Rivas, Julian., dan Santos, Celestino., 2001. Identification of anthocyanin pigments in strawberry (cv Camarosa) by LC using DAD and ESI-MS detection. *Eur Food Res Technol*. Springer-Verlag.
- Mishra, A., Fischer, M.K., dan Bäuerle, P., 2009. Metal-free organic dyes for dye-sensitized solar cells: From structure: Property relationships to design rules. *Angewandte Chemie International Edition*, 48 (14), 2474–2499.
- Mulliken, R. S., 1935. Electronic Structures of Molecules XI. Electroaffinity, Molecular Orbitals and Dipole Moments. *J. Chem. Phys.* 3: 573–585.
- Ningsih, R. dan Hastuti, E., 2012. Karakterisasi Ekstrak Teh Hitam dan Tinta Cumi-Cumi Sebagai Fotosensitiser pada Sel Surya Berbasis Pewarna Tersensitasi. Universitas Islam Negeri Maliki Malang.
- Nuryanti, S. dan Matsjeh, S., 2011. Isolasi dan Identifikasi Antosianin dari *Hibiscus Rosa Sinensis L* dan *Hibiscus Sabdariffa L* serta Alikasi Ekstrak dan Aantosianinnya sebagai Indikator dalam Titrasi Asam-Basa. Universitas Gadjah Mada.

- Ogura, R.Y., Nakane, S., Morooka, M., Orihashi, M., Suzuki, Y., dan Noda, K., 2009. High-performance dye-sensitized solar cell with a multiple dye system. *Applied Physics Letters*, 94 (7), 073308.
- Pranowo, H.D., Hetadi, A.K.R., 2011, Pengantar Kimia Komputasi, Bandung, Lubuk Agung.
- Preat, J., Michaux, C., Jacquemin, D., dan Perpete, E.A., 2009. Enhanced efficiency of organic dye-sensitized solar cells: triphenylamine derivatives. *The Journal of Physical Chemistry C*, 113 (38), 16821–16833.
- Pongajow, N. T., Juliandri., dan Hastiawan., 2013. Density Functional Theory Untuk Penentuan Geometri dan Karakteristik Ikatan dari Kompleks Ni(II)-dibutilditiokarbamat dan Co(II)-dibutioakbarmat. BATAN Bandung.
- Rondonuwu, F.S., Saputra, F.R., dan Sutresno, A., 2013. Pemanfaatan Ekstrak Antosianin Kol Merah (*Brassica Oleracea* Var) Sebagai Dye Sensitized Dalam Pembuatan Prototipe Solar Cell (Dssc).
- Shen, P., Liu, Y., Huang, X., Zhao, B., Xiang, N., Fei, J., Liu, L., Wang, X., Huang, H., dan Tan, S., 2009. Efficient triphenylamine dyes for solar cells: effects of alkyl-substituents and  $\pi$ -conjugated thiophene unit. *Dyes and Pigments*, 83 (2), 187–197.
- Shi, J., Peng, S., Pei, J., Liang, Y., Cheng, F., dan Chen, J., 2009. Quasi-solid-state dye-sensitized solar cells with polymer gel electrolyte and triphenylamine-based organic dyes. *ACS applied materials & interfaces*, 1 (4), 944–950.
- Shi, W., Fan, S., Huang, F., Yang, W., Liu, R., dan Cao, Y., 2006. Synthesis of novel triphenylamine-based conjugated polyelectrolytes and their application as hole-transport layers in polymeric light-emitting diodes. *Journal of Materials Chemistry*, 16 (24), 2387–2394.
- Slätt, J., Romero, I., dan Bergman, J., 2004. Cyanoacetylation of Indoles, Pyrroles and Aromatic Amines with the Combination Cyanoacetic Acid and Acetic Anhydride. *Synthesis*, 2004 (16), 2760–2765.
- Smestad, G.P. dan Grätzel, M., 1998. Demonstrating Electron and Nanotechnology. *J. Chem. Educ*, 75 (6), 1–6.
- Strittmatter, H., Hildbrand, S., dan Pollak, P., 2000. Malonic Acid and Derivatives. In: *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- Sundari, Citra Deliana Dewi., 2012. Investigasi TD-DFT Pada Struktur Elektronik dan Dpektrum Absorpsi Kompleks cis-(Ru(H<sub>2</sub>dcby)<sub>2</sub>(SCN) dan cis-

(Ru(H<sub>2</sub>dcbiq)<sub>2</sub>(SCN<sub>2</sub>) Fasa Gas dan Fasa Larutan Etanol Untuk Aplikasi DSSC. Institut Teknologi Bandung

- Wu, G., Kong, F., Li, J., Chen, W., Fang, X., Zhang, C., Chen, Q., Zhang, X., dan Dai, S., 2013. Influence of different acceptor groups in julolidine-based 4organic dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 99 (3), 653–660.
- Xu, W., Peng, B., Chen, J., Liang, M., dan Cai, F., 2008. New triphenylamine-based dyes for dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 112 (3), 874–880.
- Yella, A., Lee, H.-W., Tsao, H.N., Yi, C., Chandiran, A.K., Nazeeruddin, M.K., Diau, E.W.-G., Yeh, C.-Y., Zakeeruddin, S.M., dan Grätzel, M., 2011. Porphyrin-sensitized solar cells with cobalt (II/III)-based redox electrolyte exceed 12 percent efficiency. *science*, 334 (6056), 629–634.

## LAMPIRAN

1. Persentase perbandingan antara hasil perhitungan dengan hasil eksperimen:

$$\frac{\text{Hasil perhitungan}}{\text{hasil eksperimen}} \times 100\% = \frac{2,4698}{2,6050} \times 100\% = 94,8\%$$

2. Konversi energi (eV) dari hasil perhitungan panjang gelombang pelargonidin + sianoasetat:

Panjang gelombang : 475,942619384982 nm

$$475,942619384982 \text{ nm} = 0.0026050 \text{ eV}$$

3. Perhitungan  $\Delta$  HOMO-LUMO

	Pelargonidin	Pelargonidin + trifenilamin	Pelargonidin + sianoasetat
HOMO (eV)	-4,659	-4,601	-4,917
LUMO (eV)	-1,184	-1,248	-2,365
$\Delta$	3,475	3,353	2,552

$$\Delta = \text{HOMO} - \text{LUMO}$$

$$\Delta \text{ Pelargonidin} = -4,659 - (-1,184) = 3,475 \text{ eV}$$

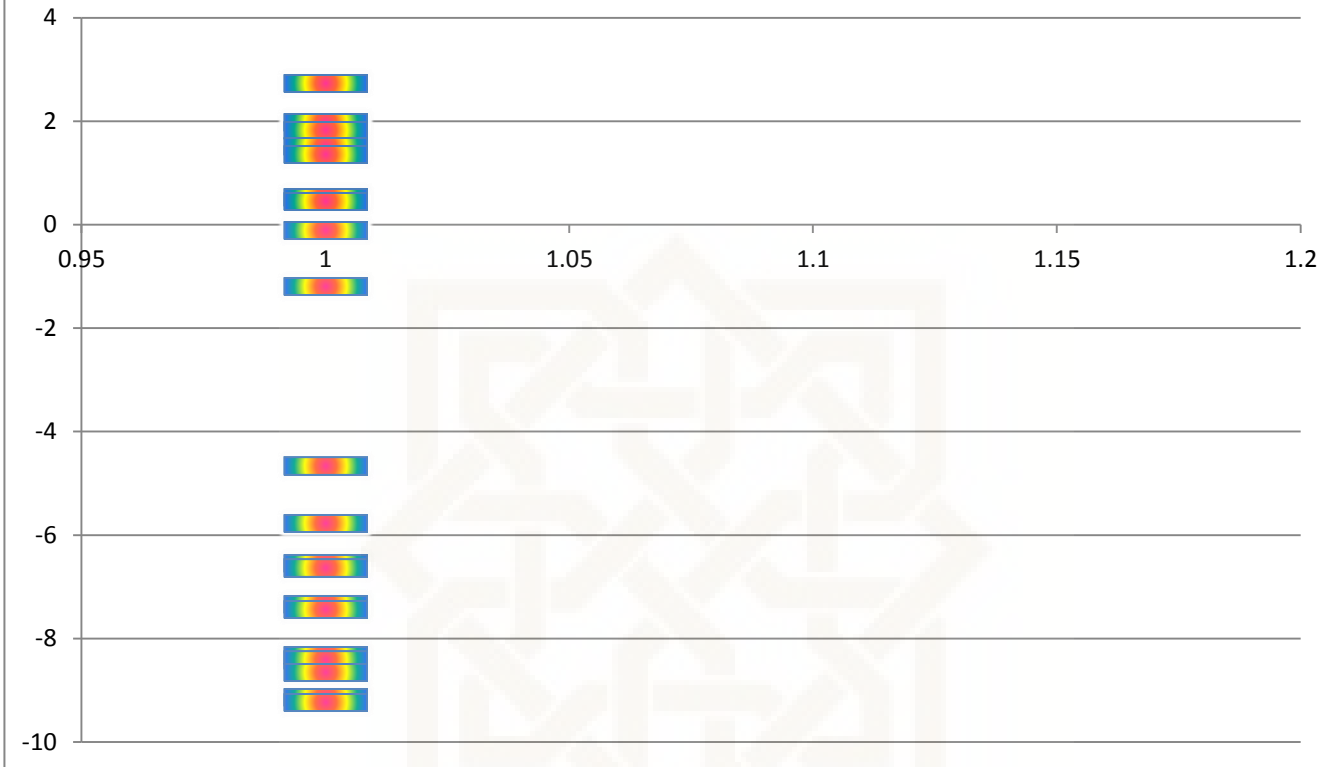
$$\Delta \text{ Pelargonidin + trifenilamin} = -4,601 - (-1,248) = 3,353 \text{ eV}$$

$$\Delta \text{ Pelargonidin + sianoasetat} = -4,917 - (-2,365) = 2,552 \text{ eV}$$

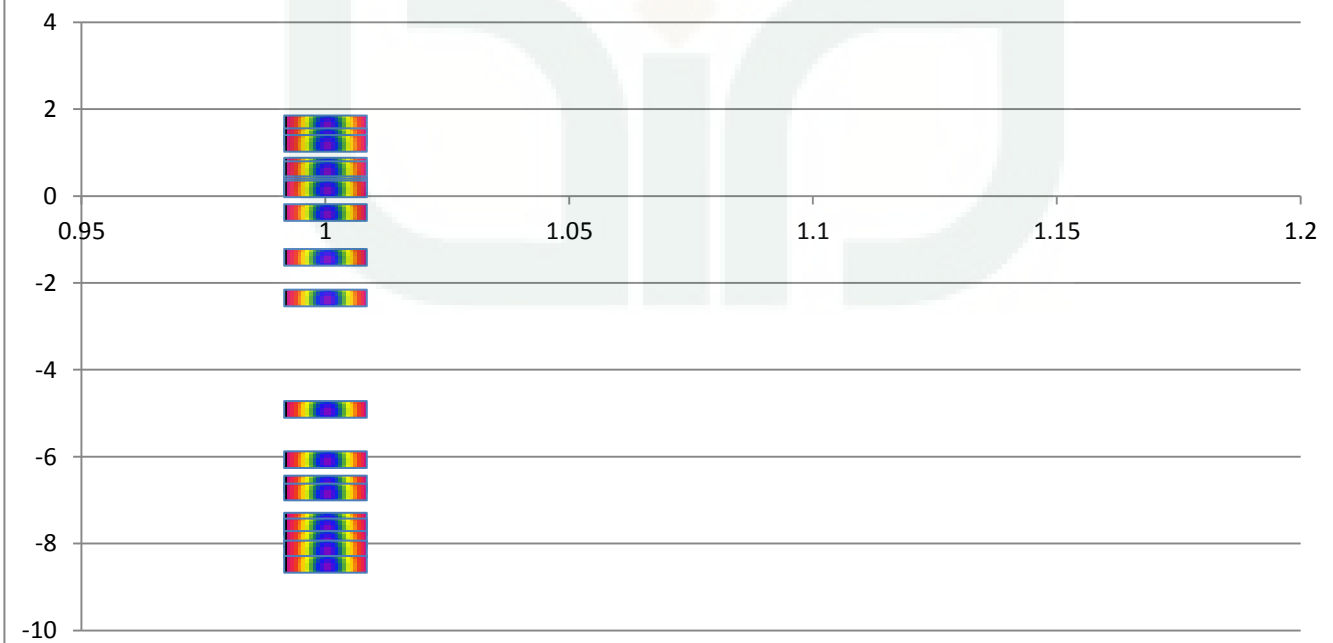
4. Kurva HOMO-LUMO

Pelargonidin energi (eV)	Pelargonidin +sianoasetat energi (eV)	Pelargonidin +Trifenilamin energi (eV)
2.73194293	1.65752801	1.91541045
1.97581975	1.3665293	1.45483029
1.83576268	1.21213181	1.27324862
1.51624642	0.68232586	0.99158342
1.36070606	0.6036577	0.8500025
0.53375161	0.26150155	0.40768119
0.45287933	0.20411271	0.17045221
-0.1032401	0.15951323	0.0513207
-1.184349	-0.3794086	-0.0882738
-4.6594897	-1.4161629	-0.341231
-5.7799735	-2.3517725	-0.3852318
-6.5424097	-4.9173993	-0.4361171
-6.6294862	-6.0712171	-1.2482958
-7.3319213	-6.6319896	-4.601094
-7.4286578	-6.8142516	-4.9295628
-8.3134092	-7.4843051	-5.854315
-8.4070165	-7.6151647	-6.3935089
-8.6465584	-7.9046668	-6.5329129
-9.138214	-8.1255417	-6.694086
-9.2235217	-8.4778477	-6.7677745

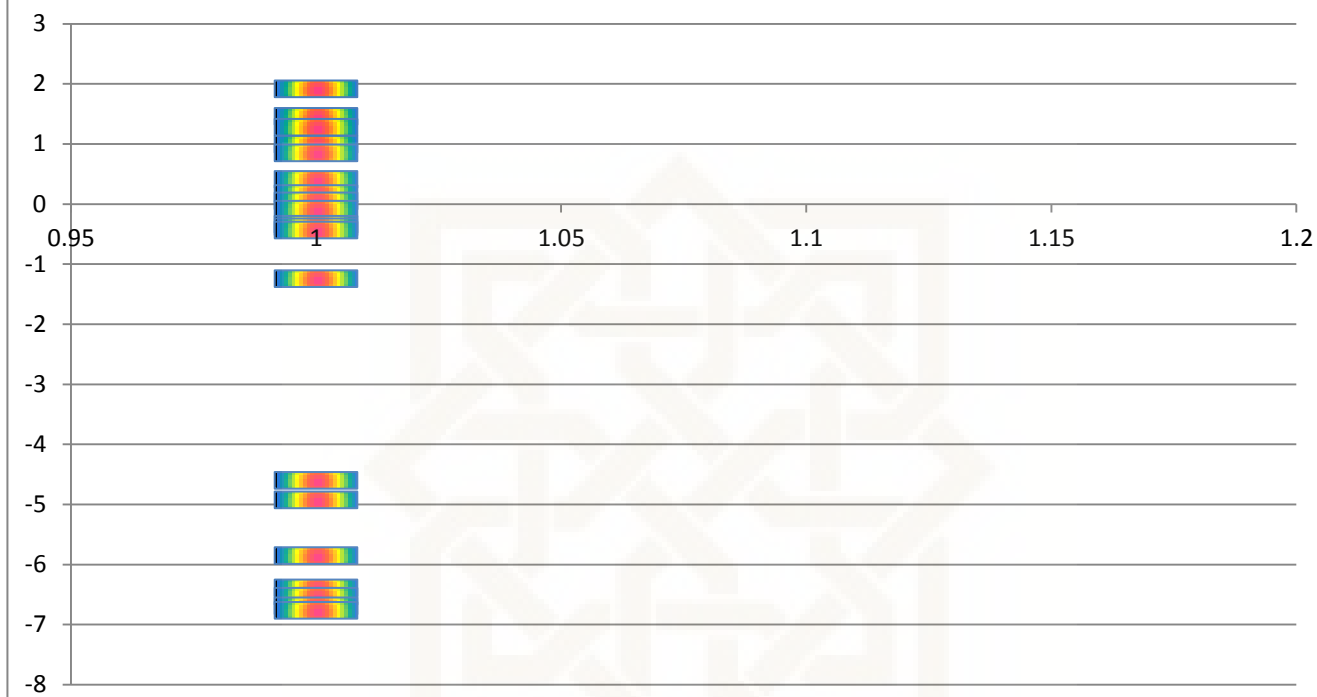
## HOMO-LUMO PG



## HOMO-LUMO PG + SN



### HOMO-LUMO PG+TPA



## CURRICULUM VITAE

### A. Biodata Pribadi

Nama Lengkap : Gandur Sembodo Affandi  
Jenis Kelamin : Laki-Laki  
Tempat,Tanggal Lahir: Bekasi, 13 Mei 1994  
Alamat Asal : Jl. Ceremai raya BC 238 Kayuringin Jaya Bekasi  
Alamat Tinggal : Jl. Adisucipto Gang perkutut 75A Yogyakarta  
Email : [gaganffandi@gmail.com](mailto:gaganffandi@gmail.com)  
No. HP : 087845672339



### B. Latar Belakang Pendidikan Formal

Jenjang	Nama Sekolah	Tahun
TK	TK Aisyiyah Bekasi	2000
SD	SDN Kayuringin Jaya XVI	2006
SMP	SMP Jaya Bekasi	2009
SMA	SMA Tunas Jakasampurna	2012
S1	UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta	2016

### C. Pengalaman Organisasi

1. Kepengurusan Osis SMA Tunas Jakasampurna
2. Kepengurusan Rohis SMA Tunas Jakasampurna
3. Saintek Musik

### D. Pengalaman Kerja

1. PKL di BBTKLPP (Balai Besar Teknik Kesehatan Lingkungan dan Pengendalian Penyakit) Yogyakarta.