

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

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



**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2017**



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 : Muhamad Imam Muslim

NIM : 14630007

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano Sebagai Gugus Akseptor Elektron 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, 10 Agustus 2018

Pembimbing,

Sudarlin, M.Si.

NIP.: 19850611 201503 1 00

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 : Muhamad Imam Muslim

NIM : 14630007

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano Sebagai Gugus Akseptor Elektron 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, 30 Agustus 2018

Konsultan,



Didik Krisdiyanto, S.Si., M.Sc

NIP. : 19811111 201101 1 007

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 : Muhamad Imam Muslim

NIM : 14630007

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano Sebagai Gugus Akseptor Elektron 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, 30 Agustus 2018

Konsultan,



Karmanto, S.Si., M.Sc

NIP. :19820504 200912 1 005



SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Muhamad Imam Muslim


NIM : 14630007

Jurusan : Kimia

Fakultas : Sains dan Teknologi

menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul **“Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano Sebagai Gugus Akseptor Elektron 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, 10 Agustus 2018


Muhamad Imam Muslim
NIM 14630007



PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

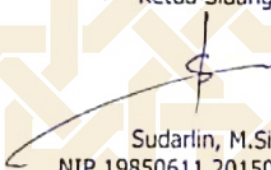
Nomor : B.1367/Un.02/DST/PP.05.3/09/2018

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

Yang dipersiapkan dan disusun oleh :
Nama : Muhamad Imam Muslim
NIM : 14630007
Telah dimunaqasyahkan pada : 28 Agustus 2018
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



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

Penguji II


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

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




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

MOTTO

Teruslah belajar dari waktu yang sudah
dilalui, **Jangan berhenti.**

Barangsiapa yang hari ini lebih baik daripada hari
kemarin maka dia orang yang beruntung.

Barangsiapa yang hari ini lebih sama dengan hari
kemarin maka dia orang yang merugi.



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 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 Program Studi Kimia dan Dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan motivasi dan pengarahan selama studi.
3. Sudarlin, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang telah sangat banyak membantu dari tahap penelitian hingga penulisan skripsi ini serta selalu memberikan motivasi sejak awal masa perkuliahan hingga sekarang.
4. Dosen-dosen Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta yang sudah membagi ilmu yang sangat bermanfaat.
5. Seluruh staf karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu sehingga penyusunan skripsi ini berjalan dengan lancar.

6. Yusuf Murdani, S. Kom., M. Munawir, S.T., Awan Pramudya W., S.Kom selaku PLP laboratorium Komputer UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
7. Bapak dan Ibu serta kakak, yang selalu berusaha semaksimal mungkin, membantu, mendorong dan tidak pernah lupa untuk selalu mendoakan saya sehingga bisa menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
8. Andika, Zidni, dan mas Mahmud selaku teman penelitian yang memiliki dosen pembimbing sama yang selalu berbagi semangat dan motivasi
9. Zahrotul Maknunah selaku teman dan sahabat yang sangat sering memberi motivasi dalam berbagai hal.
10. Mahfud, Viki, Andika, Afi, Fifi, Ditha, Nafis, Rafida sebagai teman nongkrong, ngumpul dan muncak yang selalu memberi semangat.
11. Teman-teman kimia angkatan 2014 yang tidak dapat disebutkan yang selalu membantu proses studi.
12. Mas Irfan, Mas Gandur, Mas Fuad, Mas Hendra dan kakak angkatan kimia yang tidak dapat disebutkan yang selalu membantu dalam proses penyelesaian skripsi.
13. Rekan-rekan kimia lintas angkatan serta semua pihak yang tidak bisa penulis sebutkan satu persatu atas bantuannya dalam penyelesaian skripsi ini.
14. Seluruh keluarga besar Himpunan Mahasiswa Islam Komisariat Saintek UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
15. 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, 2018

Muhamad Imam Muslim
NIM 14630007



DAFTAR ISI

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	ii
NOTA DINAS KONSULTAN	iii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	v
PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	vi
MOTTO	vii
KATA PENGANTAR	viii
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR TABEL.....	xiv
ABSTRAK	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah	6
C. Rumusan Masalah.....	7
D. Tujuan Penelitian	7
E. Manfaat Penelitian	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	
Error! Bookmark not defined.	
A. Tinjauan	Pustaka
Error! Bookmark not defined.	

B. Landasan teori

Error! Bookmark not defined.

C. Hipotesis Penelitian

Error! Bookmark not defined.

BAB III METODE PENELITIAN

Error! Bookmark not defined.

A. Waktu dan Tempat Penelitian

Error! Bookmark not defined.

B. Alat-alat Penelitian

Error! Bookmark not defined.

C. Cara Kerja Penelitian

Error! Bookmark not defined.

D. Teknik Analisis Data

Error! Bookmark not defined.

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

Error! Bookmark not defined.

A. Pemilihan Metode

Error! Bookmark not defined.

B. Optimasi Molekul Energi dan Energi HOMO-LUMO

Error! Bookmark not defined.

C. Posisi Orbital Energi pada Keadaan HOMO-LUMO

Error! Bookmark not defined.

D.	Spektra	
	Error! Bookmark not defined.	
E.	Konstanta Kopling <i>Dye</i> dan Permukaan Semikonduktor (V_{RP})	
	Error! Bookmark not defined.	
F.	Efisiensi Penyerapan Cahaya	(LHE)
	Error! Bookmark not defined.	
G.	Panjang	Ikatan
	Error! Bookmark not defined.	
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN.....	52
A.	Kesimpulan	52
B.	Saran.....	53
DAFTAR PUSTAKA	54
LAMPIRAN	58

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Penampang DSSC	
	Error! Bookmark not defined.	
Gambar 2.2	Struktur Pelargonidin	16

Gambar 2.3 Self Consistent Field (SCF).....	21
Gambar 4.1 Optimasi DFT Pelargonidin	30
Gambar 4.2 Optimasi hasil Modifikasi Pelargonidin	32
Gambar 4.3 Energi HOMO-LUMO	33
Gambar 4.4 Posisi HOMO-LUMO Pelargonidin	36
Gambar 4.5 Posisi HOMO-LUMO Pelargonidin Termodifikasi.....	37
Gambar 4.6 Spektrum Absorpsi Pelargonidin	40
Gambar 4.7 Spektrum Absorpsi Pelargonidin + Akseptor elektron.....	41
Gambar 4.8 Nilai V_{RP} Pelargonidin dan Pelargonidin Modifikasi	45
Gambar 4.9 Panjang Ikatan Pelargonidin.....	48
Gambar 4.10 Panjang Ikatan Pelargonidin-Benzotiadiazol sianokrilik	48
Gambar 4.11 Panjang Ikatan Pelargonidin-Asam Sianosinamik	49
Gambar 4.12 Panjang Ikatan Pelargonidin-Sianakrilik.....	50
Gambar 4.13 Panjang Ikatan Pelargonidin-Sianovinil.....	50

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Perbandingan λ maks antara hasil eksperimen dan perhitungan.....	29
Tabel 4.2 Nilai Muatan Mulliken.....	31
Tabel 4.3 Energi HOMO-LUMO.....	33
Tabel 4.4 Nilai VRP Pelargonidin dan Pelargonidin Modifikasi.....	44
Tabel 4.5 Nilai LHE dye Pelargonidin dan Pelargonidin dengan modifikasi..	46



ABSTRAK

Kajian Teoritis Penggunaan Turunan Asam Siano Sebagai Gugus Akseptor Elektron pada Pelargonidin Sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

Oleh:
Muhamad Imam Muslim
NIM 14630007

Pembimbing
Sudarlin, M.Si.

Kajian Teoritis penggunaan turunan asam siano sebagai gugus akseptor elektron pada pelargonidin sebagai senyawa *dye* sel surya tersensitasi (DSSC) telah dilakukan berdasarkan parameter panjang ikatan dengan TiO₂, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh modifikasi penambahan gugus asam benzatiadizol sianoakrilik, sianoakrilik, sianovinil, dan sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik pelargonidin sebagai *dye* pada DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO.

Penelitian ini dimulai dengan tahapan pertama yaitu menggambar struktur dengan avogadro, kemudian molekul di optimasi dengan metode DFT dan TDDFT menggunakan basis set 6.311G*. Untuk mengetahui parameter energi HOMO-LUMO dan kerapatan elektron saat HOMO-LUMO digunakan metode yang sama serta menggunakan teknik analisis dengan ECCE. Spektra menggunakan metode DFT dengan teknik analisis *Chemcraft*. Parameter LHE dan V_{RP} menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan teknik analisis menggunakan persamaan yang ada. Parameter panjang ikatan *dye* dengan TiO₂ menggunakan metode DFT dengan teknik analisis menggunakan avogadro.

Pelargonidin-benzatiadizol sianoakrilik menjadi modifikasi yang lebih baik apabila dibandingkan dengan pelargonidin tanpa modifikasi maupun pelargonidin yang dimodifikasi dengan asam siano lain, berdasarkan parameter posisi kerapatan elektron molekul, energi HOMO-LUMO, konstanta kopling (V_{rp}), panjang ikatan, dan spektra. Pada pelargonidin-benzatiadizol sianoakrilik kerapatan elektron di keadaan LUMO terkumpul pada benzatiadizol sianoakrilik, energi HOMO sebesar -4,97856 eV & LUMO -2,56731 eV, nilai V_{RP} 0,439, panjang ikatan 1,936 Å, dan puncak spektra pada panjang gelombang 393,14 nm & 377,09 nm . Apabila ditinjau dari parameter efisiensi penyerapan cahaya (LHE) maka yang terbaik adalah pelargondin tanpa modifikasi dengan nilai LHE sebesar 0,820.

Kata kunci : akseptor elektron, asam benzatiadizol sianoakrilik, DFT, TD-DFT, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), V_{RP} , kerapatan elektron, spektra, energi HOMO-LUMO, basis set, panjang ikatan, asam sianoakrilik, sianovinil, dan sianosinamik.

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).

DSSC yang menggunakan *dye* berupa bahan organik alami bebas logam memiliki beberapa keunggulan dan dapat dikembangkan dengan biaya murah serta fabrikasi mudah (Ekasari, 2013). *Dye* dari bahan alam yang diekstrak dari buah-buahan, bunga, dan daun tanaman memiliki beberapa keunggulan dibandingkan kompleks logam dan *dye* organik lainnya yaitu mudah didapat karena sudah tersedia di alam, mudah untuk diekstrak, tidak membutuhkan pemurnian lanjutan, ramah lingkungan, dan dapat mengurangi biaya pembuatan (Senthil, 2011).

Ekstrak *dye* atau pigmen tumbuhan yang sering digunakan sebagai fotosensitizer pada DSSC adalah ekstrak klorofil, karoten, dan antosianin (Maddu, 2007). Antosianin merupakan *dye* yang larut dalam air dan secara alami terdapat pada berbagai jenis tumbuhan dan buah-buahan. Pigmen tersebut memberikan

warna merah, biru, dan ungu pada buah, bunga, dan daun yang masuk dalam kelas flavonoid. Senyawa antosionin yang paling banyak ditemukan adalah pelargonidin (jingga), sianidin (jingga-merah), peonidin (jingga-merah), delphinidin (biru-merah), petunidin (biru-merah), dan malvidin (biru-merah) (Misbachudin, 2014).

Pelargonidin dapat ditemukan di alam pada buah *Canarium odontophyllum*. Sebagai senyawa *dye* pada DSSC, pelargonidin dari buah tanaman ini menghasilkan efisiensi sebesar 0.79% (Lim dkk., 2014). Nilai ini masih sangat rendah sehingga perlu dilakukan modifikasi yang dapat meningkatkan efisiensi pelargonidin.

Modifikasi pada *dye* dapat dilakukan berdasarkan asumsi dasar dari susunan *dye* pada DSSC. Saat ini, sebagian besar sensitiser organik dibuat dengan susunan (D- π -A), dimana D merupakan gugus donor elektron, π merupakan jembatan terkonjugasi, dan A merupakan akseptor elektron. Susunan yang demikian menghasilkan efisiensi yang lebih baik (Wu dkk., 2012). Contoh *dye* bebas logam yang menggunakan susunan (D- π -A) serta menghasilkan efisiensi tinggi pada DSSC telah berhasil disintesis oleh Horiuchi dkk., (2004). Gugus donor yang digunakan berupa indoline dan trifetilamin, jembatan terkonjugasi berupa *thiophene*, dan gugus akseptor elektron asam rodanin-3 asetat. Efisiensi yang dihasilkan pada DSSC sebesar 9%. Selain asam rodanin-3 asetat yang telah digunakan sebagai gugus akseptor elektron oleh Horiuchi dkk., (2004) terdapat berbagai macam jenis gugus akseptor elektron yang dapat digunakan dalam melakukan modifikasi. Salah satunya adalah turunan asam siano.

Adanya gugus siano atau -CN pada benzatiadizol sianoakrilik, asam sianoakrilik, sianosvinil dan sasam sianosinamik menyebabkan gugus tersebut

memiliki sifat sebagai penarik elektron atau akseptor elektron karena gugus siano atau nitril memiliki muatan molekul positif sehingga dapat menarik elektron disekitarnya (Firdaus, 2009).

Penelitian menggunakan turunan asam siano sebagai akseptor elektron telah dilakukan oleh Affandi (2016) menggunakan asam sianoasetat atau asam sianoakrilik dengan metode komputasi, Qin (2008) menggunakan sianovinil, Kim dkk., (2013) menggunakan asam benzotiadizol sianoakrilik, dan Galappaththi dkk., (2016) menggunakan asam sianosinamik. Metode yang digunakan merupakan perpaduan antara metode komputasi dan eksperimen.

Penelitian yang dilakukan oleh Affandi (2016) secara komputasi menggunakan metode komputasi DFT/TDDFT untuk mempelajari pengaruh penambahan gugus asam sianoasetat atau asam sianoakrilik terhadap pelargonidin dengan parameter tingkat energi HOMO-LUMO. Hasil yang diperoleh menunjukkan terjadinya perubahan selisih tingkat energi HOMO-LUMO pelargonidin. Pelargonidin memiliki Δ HOMO-LUMO sebesar 3.475 eV, sedangkan pelargonidin yang telah ditambahkan gugus sianoakrilik memiliki Δ HOMO-LUMO lebih rendah sebesar 2.552 eV.

Kim dkk., (2013) memadukan metode komputasi dan metode eksperimen untuk mempelajari benzotiadizol sianoakrilik. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa benzotiadizol sianoakrilik dapat digunakan sebagai akseptor elektron. Studi teoritis juga telah dilakukan menggunakan metode DFT/TDDFT oleh (Galappaththi dkk., 2016), (Kazici dkk., 2016), dan (Qin dkk., 2008) yang memperoleh hasil

bahwa asam sianosinamik, asam sianoasetat atau asam sianoakrilik, dan sianovinil dapat digunakan sebagai akseptor elektron.

Pengaruh penambahan sianovinil sebagai akseptor elektron pada trifenilamin dengan jembatan π berupa thiopene telah dipelajari secara teoritik menggunakan metode DFT pada B3LYP/6-31+G(d) dan eksperimen oleh Qin dkk., (2008). Hasil yang didapatkan untuk parameter tingkat energi LUMO sebesar -5,37 eV, dan tingkat energi sebesar HOMO -5,88 eV, dan efisiensi 0.05%.

Li dkk., (2017) telah mempelajari pengaruh penambahan beberapa gugus akseptor elektron dan jembatan π pada dithieno[2,3-d:2',3'-d']benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene (DTBDT) sebagai senyawa donor DSSC. Salah satu akseptor elektron yang dipelajari adalah benzotiadizol sianoaklirik dan tiofene sebagai jembatan π . Penelitian dilakukan secara komputasi menggunakan metode DFT. Hasil yang diperoleh menunjukkan benzotiadizol sianoaklirik merupakan akseptor elektron yang paling berpengaruh dengan parameter tingkat energi HOMO -4.94 eV dan tingkat energi LUMO -3.04 eV.

Penelitian secara komputasi untuk gugus asam sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap sianidin sebagai donor elektron juga telah dilakukan oleh Galapathi dkk., (2016). Hasilnya menunjukkan penambahan asam sianosinamik dapat menggeser tingkat energi HOMO sianidin dari -6.18 eV menjadi -6.48 eV dan tingkat energi LUMO dari -3.39 eV menjadi -3.66 eV.

Hasil beberapa penelitian di atas menjadi dasar untuk memodifikasi pelargonidin. Penelitian dapat dilakukan secara teoritis untuk mengetahui pengaruh asam sianoakrilik, sianovinil, benzotiadizol sianoaklirik, dan asam sianosinamik

pada pelargonidin sebagai senyawa *dye* DSSC. Modifikasi yang dapat dilakukan adalah menggunakan pelargonidin sebagai donor elektron dan asam sianokrilik, sianovinil, asam benzotiadizol sianokrilik, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron.

Metode komputasi yang dapat digunakan adalah metode DFT/TDDFT. Metode ini telah digunakan untuk berbagai penelitian terkait sel surya DSSC. Beberapa diantaranya adalah Liang dkk., (2007) untuk mengetahui efisiensi DSSC menggunakan *dye* berupa trifenilamin sebagai donor elektron dan asam rodanin-3 asetat sebagai akseptor elektron dengan variasi penambahan gugus $\text{CH}_2=\text{CH}-$ dan penambahan panjang jembatan π . Hasil yang diperoleh dari beberapa variasi menunjukkan penurunan $\Delta\text{HOMO-LUMO}$ dari senyawa *dye* yang dihasilkan. Hasil uji secara eksperimen menghasilkan efisiensi terbaik sebesar 5,84%.

Ekanayake dkk., (2013) juga menggunakan metode DFT/TDDFT dan metode eksperimen untuk mengetahui pengaruh penggunaan *Canarium odontophyllum* pada DSSC dengan parameter struktur molekul, struktur elektronik, dan absorpsi spektra. Hasil yang diperoleh menunjukkan selisih tingkat energi HOMO-LUMO sebesar 2,90 eV untuk pelargonidin, dan efisiensi sebesar 0,87 % yang didapatkan secara eksperimen.

Parameter yang akan digunakan pada penelitian ini untuk mengetahui hasil modifikasi adalah panjang ikatan antara Ti dan molekul sensitiser, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), spektra, dan kerapatan elektron pada posisi HOMO-LUMO. Parameter efisiensi penyerapan cahaya (LHE) telah digunakan untuk mempelajari *dye* yang

terdiri dari donor elektron berupa ulazine dan akseptor elektron berupa asam sianoakrilik. Hasil yang diperoleh menunjukkan *dye* tersebut memiliki LHE sebesar 0,985 (Obotowo dkk., (2016) dan Feng dkk., (2013)).

Parameter V_{RP} juga telah digunakan pada penelitian yang dilakukan oleh Abdullah dkk., (2013). Pada penelitian tersebut, V_{RP} digunakan sebagai salah satu parameter untuk menghitung efisiensi *dye* bebas logam yang dimodifikasi dengan penambahan gugus donor elektron dan jembatan π menggunakan metode DFT untuk mengetahui dan mengoptimasi sifat fotofisikalnya. Hasilnya didapatkan modifikasi terbaik pada modifikasi *dye*-4 dengan nilai V_{RP} sebesar 1,050.

Perbedaan sebaran elektron pada masing-masing modifikasi menjadi dasar perbedaan nilai pada panjang ikatan antara Ti dan molekul sensitiser, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), energi ikat, spektra, kerapatan elektron pada posisi HOMO dan LUMO tersebut. Modifikasi yang dilakukan terhadap pelargonidin sebagai donor elektron diharapkan menghasilkan efisiensi yang lebih baik berdasarkan parameter-parameter tersebut.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Turunan asam siano yang digunakan sebagai akseptor adalah asam sianoakrilik, sianovinil, benzotiadizol sianoakrilik, dan asam sianosinamik.

2. Parameter yang digunakan adalah panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO.

C. Rumusan Masalah

Rumusan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Bagaimana pengaruh penambahan asam sianoakrilik, sianovinil, asam benzotiadizol sianoakrilik, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik fotoelektrik pelargonidin sebagai *dye* pada DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO.
2. Bagaimana modifikasi gugus siano terbaik yang mampu menghasilkan karakteristik fotoelektrik pelargonidin yang lebih baik untuk pelargonidin sebagai senyawa *dye* pada DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO.

D. Tujuan Penelitian

Tujuan pada penelitian ini adalah:

1. Mempelajari pengaruh modifikasi penambahan gugus asam benzotiadizol sianoakrilik, asam sianoakrilik, sianovinil, dan asam sianosinamik sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik pelargonidin sebagai *dye* pada DSSC

berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron molekul, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO.

2. Menentukan modifikasi yang memberikan karakteristik fotoelektrik pelargonidin lebih baik sebagai senyawa *dye* pada DSSC berdasarkan indikasi parameter nilai panjang ikatan yang kecil, spektra yang berada pada daerah sinar tampak, kerapatan elektron molekul yang terkumpul di akseptor elektron pada posisi LUMO, nilai efisiensi penyerapan cahaya (LHE) tinggi, nilai konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}) yang tinggi, dan selisih energi HOMO-LUMO yang kecil.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah menghasilkan referensi teoritik mengenai metode yang dapat digunakan untuk meningkatkan karakteristik pelargonidin sebagai senyawa *dye* alami bebas logam pada DSSC dan mengetahui pengaruh beberapa gugus siano yang digunakan sebagai akseptor elektron terhadap karakteristik pelargonidin berdasarkan parameter panjang ikatan, spektra, kerapatan elektron, efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor (V_{RP}), dan energi HOMO-LUMO.

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut

1. Pengaruh penambahan gugus akseptor elektron berupa benzatiadizol sianoakrilik, asam sianosinamik, asam sianoakrilik/sianosetat, sianovinil pada pelargonidin memberikan hasil yang bervariasi, tergantung jenis akseptor elektron yang digunakan. Terdapat kekurangan dan kelebihan yang diberikan oleh akseptor elektron berdasarkan parameter-parameter yang digunakan.
2. Modifikasi menggunakan akseptor elektron benzatiadizol sianoakrilik memberikan hasil yang lebih baik apabila dibandingkan dengan modifikasi dengan akseptor siano lain berdasarkan panjang ikatan yang terkecil, spektra yang berada disinar tampak dengan dua puncak serapan, kerapatan elektron molekul yang terkumpul di benzatiadizol sianoakrilik pada posisi LUMO, nilai konstanta kopling (V_{TP}) yang terbesar, dan selisih energi HOMO-LUMO yang terkecil. Apabila ditinjau dari parameter efisiensi penyerapan cahaya (LHE) maka yang terbaik adalah pelargondin tanpa modifikasi dengan nilai LHE yang terbesar jika dibandingkan dengan pelargonidin yang telah dimodifikasi.

B. Saran

Perlu diadakan studi lebih lanjut melalui didalam laboratorium melalui eksperimen ataupun secara komputasi dengan menambahkan parameter-parameter lain.



DAFTAR PUSTAKA

- Abdullah, I.M., Janjua, M.R.S.A., Nazar, M.F., Mahmud, A., 2013. Quantum Chemical Designing of Efficient TC4-Based Sensitizers by Modification of Auxiliary Donor and π -Spacer. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* Vol. 86, No. 11, 1272-1281.
- Capelle, K., 2006. A Bird's-Eye View of Density-Functional Theory. arXiv:cond-mat/0211443v5 [cond-mat.mtrl-sci].
- Chang, H., Wu, H.M., Chen, T.L., Huang, K.D., Jwo, C.S., Lo, Y.J., 2009. Dye-sensitized solar cell using natural dyes extracted from spinach and ipomoea. *Journal of Alloys and Compounds* 495 (2010) 606–610.
- Cramer, C.J. 2004. *Essentials of Computational*. England : John Wiley & Sons Ltd.
- Deviyanti., 2014. Studi Komputasi Molekul Zat Warna Unggulan pada DSSC., Skripsi., Institut Teknologi Bandung.
- Ekanayake, P., Kooh, M.R., Kumara, N.T., Lim, A., Petra, M.I., Yoong, V.N., Ming,L.C., 2013. Combined experimental and DFT–TDDFT study of photo-activeconstituents of Canarium odontophyllum for DSSC application. *Chemical Physics Letters* 585 (2013) 121–127
- Ekasari, V dan Yudoyono, G., 2013. Fabrikasi Dssc dengan Dye Ekstrak Jahe Merah (Zingiber Officinale Linn Var. Rubrum) Variasi Larutan Tio2 Nanopartikel Berfase Anatase dengan Teknik Pelapisan Spin Coating. Surabaya. *Jurnal Sains dan Seni Pomits*.
- Firdaus. 2009. *Kimia Organik Fisis I*. Makasar : Program Studi Kimia Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Hasanudin.
- Feng, J., Jiao, Y., Ma, W., Nazeeruddin, M., Gratzel, M., Meng, S., 2013. First Principles Design of Dye Molecules with Ullazine Donor for Dye Sensitized Solar Cells . Beijing. *J. Phys. Chem. C* 2013, 117, 3772–3778
- 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*.

- Gratzel, M., dan O'Regan, B., 1991. A Low-Cost, high efficiency solar cell based on dye sensitized colloidal TiO₂ film. *Nature Publishing Group* vol 353 ; 737-739.
- Green, M.A., 2009. The Path to 25% Silicon Solar Cell Efficiency: History of Silicon Cell Evolution. *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 2009; 17:183–189.
- Harborne, J .B., 1958. Spectral Methods of Characterizing Anthocyanins. *Biochem J.* 1958 Sep; 70(1): 22–28.
- Horiuchi, T., Miura, H., Sumioka, K., Uchida, S., 2004. High Efficiency of Dye-Sensitized Solar Cells Based on Metal-Free Indoline Dyes. *J. AM. CHEM. SOC.* 2004, 126, 12218-12219
- 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.
- 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
- Lim, A., Kumara, N.T., Tan, A.L., Mirza, A.H., Candrakanthi, R.L., Petra, M.I., Ming, L.C., Senadeera, G.K., 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 (2015) 596–602.
- Maddu, A., 2007. Penggunaan Ekstrak Antosianin Kol Merah Sebagai Fotosensitizer pada Sel Surya TiO₂ Nanokristal Tersensitasi Dye. Depok. Makara Journal of Technology.
- Mintorogo, D.S., 2000. Strategi Aplikasi Sel Surya (Photovoltaic Cells) Pada Perumahan Dan Bangunan Komersial. *Dimensi Teknik Arsitektur* Vol. 28, No. 2, Desember 2000: 129 - 141.
- 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.
- Mischbanuhin, M.C., 2014. Pengaruh pH Larutan Antosianin Strawberry dalam Prototipe Dye Sensitized Solar Cell (DSSC). Surabaya. Jurusan FMIPA ITS.

- Novir, B.S., Hashemianzadeh, S.M., 2017. Quantum chemical investigation of structural and electronic properties of trans- and cis-structures of some azo dyes for dye-sensitized solar cells. *Computational and Theoretical Chemistry* 1102 (2017) 87–97.
- Obotowo, I.N., Obot, I., Ekpe, U., 2016. Organic sensitizers for dye-sensitized solar cell (DSSC): Properties from computation, progress and future perspectives. *Journal of Molecular Structure* 1122 (2016) 80-87
- Rocca, D., Gebauer, R., Filipo, D.A., Nazeerudin, M.K., Baroni, S., 2009. Time-dependent density functional theory study of squaraine dye-sensitized solar cells. *Chemical Physics Letters* 475 (2009) 49–53
- Rahman, I.A., Purqon, A., 2015. Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS₂. Bandung: Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung.
- Senthill, T.S., 2011. Natural dye (cyanidin 3-O-glucoside) sensitized nanocrystalline TiO₂ solar cell fabricated using liquid electrolyte/quasi-solid-state polymer electrolyte. *Renewable Energy* 36 (2011) 2484e2488.
- Sundari, Citra Deliana Dewi., 2012. Investigasi TD-DFT Pada Struktur Elektronik dan Dpektrum Absorbansi Kompleks cis-(Ru(H₂dcby)₂(SCN) dan cis-(Ru(H₂dcby)₂(SCN)₂) Fasa Gas dan Fasa Larutan Etanol Untuk Aplikasi DSSC. Institut Teknologi Bandung.
- Pongajow, N.T., Juliandri., dan Hastiawan., 2013. Density Functional Theory Untuk Penentuan Geometri Dan Karakteristik Ikatan Dari Kompleks Ni(II)-Dibutilditiokarbamat Dan Co(II)-Dibutilditiokarbamat. Bandung : Batan
- Pranowo, H.D. 2011. Pengantar Kimia Komputasi. Bandung : Penerbit Lubuk Agung.
- 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.
- Sundarti, L.W., 2017. Kajian Teoritis Mekanisme Transpor Proton Pada Model Membran Komposit Kitosan / Asam Fosfat Untuk Sistem Direct Methanol Fuel Cell (DMFC). Tesis. Departement Of Chemistry Faculty

Of Mathematics And Natural Sciences Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya.

Ruzsinszky, A., dan Csonka, G., 2003 Rapid Estimation of Enthalpies of Formation from Hartree-Fock Total Energy and Partial Charges for Compounds Containing Si, S, and Cl Atoms. *J. Phys. Chem. A* 2003, 107, 8687-8695

Wu, Y., dan Zhu, W., 2013. Organic sensitizers from D-p-A to D-A-p-A: effect of the internal electron-withdrawing units on molecular absorption, energy levels and photovoltaic performances. *Chem. Soc. Rev.*, 2013, 42, 2039--2058.



LAMPIRAN

Perhitungan nilai V_{RP}

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

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

1. V_{RP} Pelargonidin

$$|V_{RP}| = \frac{[-1,51959 + (2(-4,88425))] - [-1,51959 + (-4,88425) + 4.1]}{2}$$
$$= 0,392$$

2. V_{RP} Pelargonidin-Benzotiadiazol sianokrilik

$$|V_{RP}| = \frac{[-2,56731 + (2(-4,97856))] - [-2,56731 + (-4,97856) + 4.1]}{2}$$
$$= 0,439$$

3. V_{RP} Pelargonidin-Sianosinamik

$$|V_{RP}| = \frac{[-1,57902 + (2(-4,96180))] - [-1,57902 + (-4,96180) + 4.1]}{2}$$
$$= 0,430$$

4. V_{RP} Pelargonidin-Sianokrilik

$$|V_{RP}| = \frac{[-1,53306 + (2(-4,94150))] - [-1,53306 + (-4,94150) + 4.1]}{2}$$
$$= 0,420$$

5. V_{RP} Pelargonidin-Sianovinil

$$|V_{RP}| = \frac{[-1,53684 + (2(-4,94417))] - [-1,53684 + (-4,94417) + 4.1]}{2}$$
$$= -0,422$$

Perhitungan nilai LHE

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

1. Pelargonidin

$$\begin{aligned}\text{LHE} &= 1 - 10^{-0,747} \\ &= 0,820\end{aligned}$$

2. Pelargonidin-Benzotiadizol sianokrilik

$$\begin{aligned}\text{LHE} &= 1 - 10^{-0,557} \\ &= 0,723\end{aligned}$$

3. Pelargonidin-Sianosinamik

$$\begin{aligned}\text{LHE} &= 1 - 10^{-0,314} \\ &= 0,514\end{aligned}$$

4. Pelargonidin-Sianokrilik

$$\begin{aligned}\text{LHE} &= 1 - 10^{-0,643} \\ &= 0,772\end{aligned}$$

5. Pelargonidin-Sianovinil

$$\begin{aligned}\text{LHE} &= 1 - 10^{-0,537} \\ &= 0,709\end{aligned}$$

DAFTAR RIWAYAT HIDUP

A. Data Pribadi

Nama Lengkap : Muhamad Imam Muslim
Jenis Kelamin : Laki-Laki
Tempat, Tanggal Lahir : Palangka Raya 27 Juni 1997
Agama : Islam
Status : Mahasiswa
Alamat Asal : Jl. Rajawali VII RT.007 RW.03
Bukit Tunggal, Palangka Raya,
Kalimantan tengah
Alamat Jogja : Jl. Salam no. 97B Nologaten
Condong Catur Depok Sleman,
DIY.
No. Telepon : 089676976176
E-mail : imammuslim@gmail.com



B. Riwayat Pendidikan

2002-2008 : SDN 1 Bukit Tunggal
2008-2011 : SMPN 3 Palangka Raya
2011-2014 : SMAN 2 Palangka Raya
2014-2018 : UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

C. Pengalaman Organisasi

Anggota Pengkaderan Himpunan Mahasiswa Kimia UIN Sunan Kalijaga 2015-2017
Ketua Bidang KPP HMI Komisariat Sains dan Teknologi 2017-2018
Ketua Panitia Kunjungan Industri Mahasiswa Kimia UIN Sunan Kalijaga 2016
Anggota Bidang PTKM HMI Komisariat Sains dan Teknologi 2016-2017
Peserta Pelatihan Wirausaha Kimia 2015
Peserta Pelatihan Manajemen Organisasi 2015
Panitia Bidang Konsumsi dalam acara Chemistry Festival and Competition (CFC) 2016
Peserta Workshop “Metodologi Riset dan Kewirausahaan Mahasiswa Bidikmisi” 2017

D. Pengalaman Pekerjaan

Magang di Balai Besar Kulit, Karet dan Plastik Yogyakarta (2016/2017)

Asisten Praktikum Teori dan Struktur Atom (2016/2017)

