

**MODIFIKASI TEORITIK FEOFITIN MENGGUNAKAN  
ATOM Cu, Ni, DAN Zn SEBAGAI SENYAWA PEMEKA  
ENERGI ALTERNATIF SEL SURYA BERBASIS DSSC**

**Skripsi**

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



**Oleh:  
Zidni Rahmatika  
14630023**

**STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA**

**kepada  
JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA  
2019**



# SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-UINSK-BM-05-03/RO

## 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 : Zidni Rahmatika  
NIM : 14630023  
Judul Skripsi : Modifikasi Teoritik Feofitin Menggunakan Atom Cu, Ni, dan Zn 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, 16 Mei 2019  
Pembimbing,

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

## NOTA DINAS KONSULTAN



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-UINSK-BM-05-03/RO

### 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 selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Zidni Rahmatika

NIM : 14630023

Judul Skripsi : Modifikasi Teoritik Feofitin Menggunakan Atom Cu, Ni, dan Zn Sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

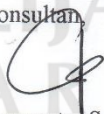
sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

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

*Wassalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh*

Yogyakarta, 16 Mei 2019

Konsultan,

  
Karmanto, S.Si., M.Sc

NIP. 19820504 200912 1 005

## NOTA DINAS KONSULTAN



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-UINSK-BM-05-03/RO

### 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 selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Zidni Rahmatika

NIM : 14630023

Judul Skripsi : Modifikasi Teoritik Feofitin Menggunakan Atom Cu, Ni, dan Zn 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*

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 16 Mei 2019

Konsultan)

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

# SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-UINSK-BM-05-03/RO

## SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Zidni Rahmatika  
NIM : 14630023  
Jurusan : Kimia  
Fakultas : Sains dan Teknologi

menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “Modifikasi Teoritik Feofitin Menggunakan Atom Cu, Ni, dan Zn 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, 15 Mei 2019



Zidni Rahmatika  
NIM.: 14630023

# PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



KEMENTERIAN AGAMA  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

## PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-1796/Un.02/DST/PP.00.9/05/2019

Tugas Akhir dengan judul : Modifikasi Teoritik Feofitin Menggunakan Atom Cu, Ni, dan Zn Sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC)

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : ZIDNI RAHMATIKA  
Nomor Induk Mahasiswa : 14630023  
Telah diujikan pada : Selasa, 16 April 2019  
Nilai ujian Tugas Akhir : A

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

### TIM UJIAN TUGAS AKHIR

Ketua Sidang

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

Penguji I

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

Penguji II

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

Yogyakarta, 16 April 2019  
UIN Sunan Kalijaga

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

Fakultas Sains dan Teknologi  
F.S.T.K.A.N

Dr. Murtoko, M.Si.  
NIP. 19520501 19820501 1 001

MOTTO

# QS 68:1

DO WHAT YOU WANNA DO

Listen with your heart, you will understand  
(Pocahontas)

"It is not in doing what you like,  
but in liking what you do  
That is the secret of happiness."

(J. M Barrie, *Peter Pan*)

"A scientist in his laboratory is not a mere technician: he  
is also a child confronting natural phenomena that  
impress him as though they were fairy tales"

(Marie Curie)



## KATA PENGANTAR

Segala puji bagi *Rabbul'alamin* yang telah memberi kesempatan dan kekuatan sehingga skripsi yang berjudul “Modifikasi Teoritik Feofitin Menggunakan Atom Cu, Ni, dan Zn Sebagai Senyawa Pemeka Energi Alternatif Sel Surya Berbasis 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, Ibu, Fahma-Fahmi, Mbah Ibuk dan seluruh keluarga besar yang selalu berusaha semaksimal mungkin, membantu, mendorong dan tidak pernah lupa untuk selalu mendoakan saya sehingga bisa menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
8. Andika, Imam, dan Mas Mahmud sebagai teman penelitian yang memiliki dosen pembimbing sama yang selalu berbagi semangat dan motivasi
9. Lisa, Kartika, Alifah, Laila, Dewi sebagai teman dan sahabat *hunting* berbagai hal aneh, unik dan menyenangkan.
10. Pak Wijayanto, Bu Isni, Pak Indra, Mas Zamhari, Ambar, Dina, Mbak Fitri, Mbak Ida dan adik-adik tim asisten alat bahan baru sebagai penyemangat disela-sela menyiapkan alat dan bahan di lab.
11. Tim RnD BORDA Indonesia, khususnya Mbak Ika, Feni, Isti, Dwiki dan Alfin yang selalu mengingatkan penulis dengan kata “Zid, jangan lupain skripsi.” disela-sela waktu *sampling* dan *nongkrong* di lab.
12. Teman-teman kimia angkatan 2014 yang tidak dapat disebutkan yang selalu membantu proses studi dan mendukung proses penulisan.
13. Rekan-rekan kimia lintas angkatan serta semua pihak yang tidak bisa penulis sebutkan satu persatu atas bantuannya dalam penyelesaian skripsi ini.
14. Teman-teman TOFEL kelas B dengan jargonnya “Don’t forget to be happy.”
15. Seluruh keluarga besar Himpunan Mahasiswa Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.

16. Seluruh keluarga besar Rumah Dongeng Mentari dan Awicarita Festival 2018
17. Seluruh keluarga besar PRISMA Riyadhush Sholihin, TPA Riyadhush Sholihin dan BADKO TKA-TPA se-kecamatan Pleret
18. 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, 2019

Zidni Rahmatika  
NIM 14630023

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

## DAFTAR ISI

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR .....	i
NOTA DINAS KONSULTAN .....	ii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	iv
PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR .....	v
MOTTO.....	vi
KATA PENGANTAR .....	vii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR GAMBAR .....	xii
DAFTAR TABEL.....	xiii
ABSRTRAK .....	xiv
BAB I PENDAHULUAN .....	1
A. Latar Belakang .....	1
B. Batasan Masalah .....	5
C. Rumusan Masalah.....	5
D. Tujuan Penelitian .....	6
E. Manfaat Penelitian .....	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI .....	7
A. Tinjauan Pustaka.....	7
B. Landasan Teori.....	10
C. Hipotesis Penelitian.....	19
BAB III METODE PENELITIAN.....	20
A. Waktu dan Tempat Penelitian.....	20

B. Alat-alat Penelitian.....	20
C. Rancangan Penelitian.....	20
D. Prosedur Penelitian .....	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	22
A. Pemilihan Metode .....	22
B. Optimasi Molekul .....	23
C. Panjang Ikatan Ligan dan Atom Pusat.....	26
D. Energi HOMO-LUMO.....	29
E. Posisi Orbital Energi pada Keadaan HOMO & LUMO .....	33
F. Spektra .....	38
G. Konstanta Kopling Dye (LHE) dan Permukaan Semikonduktor (VRP).....	41
H. Panjang Ikatan antara <i>Dye</i> dengan Semikonduktor .....	45
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	54
A. Kesimpulan .....	54
B. Saran.....	55
DAFTAR PUSTAKA .....	56
LAMPIRAN.....	60

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1	Skema Umum DSSC .....	10
Gambar 2. 2	Skema Representasi DSSC dan reaksi yang terjadi pada DSSC (Sumber: Urbani 2014).....	12
Gambar 2. 3	Reaksi Feofitinasia .....	13
Gambar 4. 1	Struktur Feofitin secara umum.....	23
Gambar 4. 2	Struktur hasil optimasi DFT Feofitin $\alpha$ dan $\beta$ .....	24
Gambar 4. 3	Hasil Optimasi Modifikasi Feofitin (a). Cu Feofitin $\alpha$ , (b). Cu Feofitin $\beta$ , (c). Ni Feofitin $\alpha$ , (d). Ni Feofitin $\beta$ , (e). Zn Feofitin $\alpha$ , (f). Zn Feofitin $\beta$ .....	25
Gambar 4. 4	Panjang ikatan dengan atom pusat .....	27
Gambar 4. 5	Nilai Energi HOMO-LUMO feofitin dan feofitin hasil modifikasi .....	30
Gambar 4. 6	Feofitin $\alpha$ dan $\beta$ pada posisi HOMO dan LUMO .....	34
Gambar 4. 7	Feofitin $\alpha$ dan $\beta$ hasil modifikasi pada posisi HOMO dan LUMO .....	36
Gambar 4. 8	Spektra UV-Vis Hasil Modifikasi Feofitin.....	38
Gambar 4. 9	Nilai $V_{RP}$ Feofitin Termodifikasi Logam Cu, Ni dan Zn.....	42
Gambar 4. 10	Panjang Ikatan Feofitin $\alpha$ dengan $TiO_2$ .....	46
Gambar 4. 11	Panjang Ikatan Feofitin $\beta$ dengan $TiO_2$ .....	47
Gambar 4. 12	Panjang Ikatan Cu Feofitin $\alpha$ dengan $TiO_2$ .....	48
Gambar 4. 13	Panjang Ikatan Cu Feofitin $\beta$ dengan $TiO_2$ .....	48
Gambar 4. 14	Panjang Ikatan Ni Feofitin $\alpha$ dengan $TiO_2$ .....	49
Gambar 4. 15	Panjang Ikatan Ni Feofitin $\beta$ dengan $TiO_2$ .....	50
Gambar 4. 16	Panjang Ikatan Zn Feofitin $\alpha$ dengan $TiO_2$ .....	51
Gambar 4. 17	Panjang Ikatan Zn Feofitin $\beta$ dengan $TiO_2$ .....	52

## DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1	Perbandingan energi eksitasi hasil eksperimen dan perhitungan .....	22
Tabel 4. 2	Panjang Ikatan Dye dan Semikonduktor termodifikasi .....	46



**ABSTRAK**  
**MODIFIKASI TEORITIK FEOFITIN MENGGUNAKAN ATOM Cu, Ni,  
DAN Zn SEBAGAI SENYAWA PEMEKA ENERGI ALTERNATIF SEL  
SURYA BERBASIS DSSC**

Oleh:  
**Zidni Rahmatika**  
**NIM. 14630023**

**Pembimbing**  
**Sudarlin, M.Si.**

---

---

Kajian teoritis penggunaan senyawa feofitin termodifikasi atom Cu, Ni, dan Zn 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<sub>2</sub>. Penelitian ini bertujuan untuk merumuskan pengaruh penambahan atom pusat Cu, Ni dan Zn terhadap karakteristik fotoelektrik feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  berdasarkan kestabilan senyawa ditinjau dari tingkat energi total serta modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan karakteristik terbaik untuk feofitin sebagai senyawa dye pada DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan terpendek, serapan spektra terbesar ada daerah UV-Vis, kerapatan molekul tertinggi, energi HOMO-LUMO, nilai LHE tertinggi, dan  $\Delta G$  injeksi terendah.

Penelitian ini diawali menggambar struktur dengan Avogadro, kemudian optimasi molekul menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan basis set 6.31G\*. Interpretasi energi HOMO-LUMO dianalisis menggunakan ECCE. Spektra diperoleh dari interpretasi menggunakan aplikasi Chemcraft. Parameter efisiensi penyerapan cahaya dihitung dengan persamaan *Light Harvesting Energy*. Parameter konstanta kopling diperoleh dari perhitungan menggunakan persamaan energi senyawa dye pada kondisi HOMO, LUMO dan energi TiO<sub>2</sub>. Parameter panjang ikatan atom pusat-ligan dan sensitizer-TiO<sub>2</sub> menggunakan metode DFT dengan software Avogadro.

Berdasarkan basis set yang digunakan ketelitian metode yang digunakan sebesar 89,27 % dan 96,09 %. Senyawa yang memiliki kestabilan terbaik adalah Zn Feofitin  $\beta$  dengan total energi sebesar -4594,713 kJ/mol Parameter menunjukkan panjang ikatan atom pusat-ligan terbaik adalah Ni Feofitin  $\alpha$ ; energi HOMO-LUMO terbaik diperoleh Feofitin  $\alpha$  dengan nilai energi LUMO sebesar -2,6349 eV dan nilai energi HOMO sebesar -4,7282 eV; spektra terbaik diperoleh oleh Zn Feofitin  $\beta$  dengan serapan pada panjang gelombang 386,77 nm dan 536,15 nm; efisiensi penyerapan cahaya (LHE) terbaik adalah Zn Feofitin  $\beta$ ; konstanta kopling ( $V_{rp}$ ) terbaik yaitu Cu Feofitin  $\alpha$ ; dan panjang ikatan *dye* dengan TiO<sub>2</sub> terbaik adalah Feofitin  $\beta$ . Berdasarkan parameter diatas modifikasi terbaik untuk DSSC yaitu Zn Feofitin  $\beta$  > Zn Feofitin  $\alpha$  > Feofitin  $\beta$  > Feofitin  $\alpha$  > Cu Feofitin  $\beta$  > Ni Feofitin  $\alpha$  > Ni Feofitin  $\beta$  > Cu Feofitin  $\alpha$ .

---

**Kata Kunci:** Feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$ , DFT, DSSC, energi HOMO-LUMO,  $V_{rp}$ , dan LHE



# **BAB I PENDAHULUAN**

## **A. Latar Belakang**

Energi matahari merupakan salah satu energi yang giat dikembangkan beberapa dekade belakangan ini. Salah satu aplikasi energi matahari adalah pemanfaatannya dalam konversi energi cahaya menjadi listrik yaitu dengan sel surya. Pengembangan sel surya menjadi kebutuhan ketika manusia dihadapkan pada berbagai kerusakan lingkungan akibat penggunaan bahan bakar fosil dan pemanasan global. Saat ini, sel surya yang banyak dikembangkan adalah sel surya berbasis pewarna tersensitasi (DSSC) (Zulkifli, 2015).

Sel surya DSSC pertama kali ditemukan oleh Michel Gratzel dan Brian Oregan. DSSC merupakan sel surya fotoelektrokimia menggunakan elektrolit sebagai medium transport muatan (O'regan, 1991). Pada dasarnya, prinsip kerja DSSC merupakan suatu siklus transfer elektron oleh komponen-komponen DSSC.

Sel surya DSSC terdiri dari lima komponen yaitu kaca konduktif, lapisan semikonduktor, sensitizer, elektrolit, dan elektroda lawan. Salah satu jenis sensitiser yang banyak digunakan adalah porfirin. Porfirin sangat efisien untuk digunakan dalam DSSC karena penyerapannya yang kuat pada daerah IR dekat, sifat fotokimia, dan kestabilan termal yang baik serta memiliki konversi foton-elektron yang tinggi sekitar 13% untuk DSSC (Urbani, 2015). Namun, kompleks porfirin dengan efisiensi tinggi tersebut merupakan kompleks sintesis menggunakan atom logam ruthenium yang langka, mahal, dan berefek buruk pada lingkungan.

Cincin porfirin dapat ditemukan dalam jumlah melimpah di alam dalam bentuk klorofil, hemoglobin, dan mioglobin. Klorofil merupakan sumber porfirin paling logis yang dapat digunakan sebagai sensitizer dalam DSSC. Klorofil, merupakan bahan utama untuk fotosintesis. Sumber utama klorofil diproduksi dari tanaman hijau. Dari segi ekonomi, klorofil merupakan pilihan terbaik untuk modifikasi DSSC. Zat warna tersebut yang dapat diproduksi oleh derivatisasi sederhana dari molekul klorofil alami (Wang, 2012). Salah satu turunan klorofil yang sering digunakan untuk tujuan tersebut adalah feofitin.

Modifikasi feofitin dengan karoten dapat meningkatkan respon spektroskopi zat warna tersebut (Feng, 2014). Modifikasi klorofil dengan atom Zn dan Cu menghasilkan absorbansi maksimum dan emisi maksimum sebesar 0.032 eV untuk klorofil, 0.028 eV untuk Zn-feofitin, dan 0.053 eV untuk Cu-feofitin (Sugiharto, 2014). Pada porfirin, atom logam pusat menjadi sangat substansif untuk menghasilkan efisiensi yang tinggi. Atom pusat Zn dapat menghasilkan konversi energi tertinggi (Wang, 2010). Penggunaan atom pusat Zn dalam klorofil alami dengan modifikasi atom lain yang satu priode belum banyak dikaji.

Berdasarkan hal tersebut, penambahan atom pusat diharapkan dapat meningkatkan efisiensi feofitin sebagai senyawa dye untuk DSSC. Jenis atom pusat yang akan digunakan adalah Cu, Ni, dan Zn. Pada tahun 2013, Shalabi, dkk menggunakan atom Zn, Ni, Fe dan Ti pada kompleks metaloporfirin tersubstitusi thiophene sebagai dye pada DSSC dengan hasil energi gap Ni sebesar 3,06 eV dan Zn sebesar 2,95 eV. Penggunaan logam Cu sebagai atom pusat pernah dilakukan dengan memodifikasi Cu dengan ligan 5,10,15,20-tetrakis(4-carboxyphenyl)

porphyrin (TCPP) dengan panjang gelombang maksimum 542 nm (Kilian,2016). Modifikasi feofitin sebagaimana disebutkan di atas dapat dilakukan secara teoritik menggunakan secara eksperimen di lab basah atau metode komputasi.

Melalui pertimbangan efisiensi, metode yang cocok adalah metode teoritik atau metode kimia komputasi. Metode komputasi yang digunakan adalah DFT/TD-DFT. Penggunaan metode ini didasarkan data yang dibutuhkan sebagai aplikasi dye pada DSSC yaitu energi ikat, spektra UV-Vis, kerapatan elektron pada posisi HOMO dan LUMO, LHE (Light Harvesting Energy), dan  $\Delta G$  injeksi elektron ( $\Delta G^{\text{injeksi}}$ ).

Metode DFT memiliki hubungan dengan elektron pada densitas elektron dan dapat meramalkan sifat seperti keadaan dasar elektron dan prediksi geometri. Sementara itu, metode TDDFT digunakan menghitung sifat spektra termasuk energi eksitasi, spektra UV-Vis, kekuatan osilator, dan komposisi elektron (Ernzerhof, 1999).

Santhanamoorthi, dkk.(2013), menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan fungsi TD-B3LYP dan basis set 6-31G untuk DSSC berbasis Zn porfirin dengan variasi penarik elektron. Hasilnya menunjukkan kompleks Zn porfirin memiliki energi gap sebesar 3.5-4,1 eV. Penelitian yang sejenis dilakukan juga oleh Wang (2012) menggunakan fungsi CAM-B3LYP dan basis set 6-31G untuk mempelajari modifikasi porfirin dengan atom Zn dan Cu. Hasilnya menunjukkan efisiensi Zn Por-1 sebesar 2.9% dan Ni-Por-1 sebesar 1,5 %. Penelitian Shalabi (2013) menggunakan fungsi B3LYP/SDD dengan basis set STO-3G, dihasilkan energi HOMO-LUMO pada kompleks Zn porfirin tersubstitusi thiophene sebesar

2,93 eV dan Ni sebesar 3,06 eV. Selain parameter energi gap HOMO-LUMO sebagaimana telah dihasilkan pada beberapa penelitian di atas, parameter lainnya yang dapat dipelajari adalah panjang ikatan antara molekul semikonduktor dan molekul sensitizer hasil modifikasi, energi ikat, spektra UV-Vis, kerapatan elektron pada posisi HOMO dan LUMO, LHE (*Light Harvesting Energy*), dan  $\Delta G$  injeksi elektron ( $\Delta G^{\text{injeksi}}$ ).

Parameter di atas pernah dilakukan oleh Wenjie (2012) menggunakan senyawa asen dengan gugus trifenilamin yang menghasilkan nilai energi injeksi ( $\Delta G^{\text{injeksi}}$ ) -1,13-(-2,17) eV dan nilai LHE 0,781-0,993 eV. Feng (2013) menyatakan senyawa VB0-VB5 dihasilkan nilai LHE 0,957-0,997 eV dengan  $\Delta G^{\text{injeksi}}$  pada VB0, VB2 dan VB4 sebesar 1,72, 0,91 dan 0,71 eV. Parameter tersebut menjadi dasar perhitungan LHE dan nilai energi injeksi ( $\Delta G^{\text{injeksi}}$ ), pada senyawa yang akan dimodifikasi.

Kartikeyan (2013) menyebutkan dalam penelitiannya, pada tujuh variasi berbasis Zn-porfirin dengan struktur D-  $\pi$ -A diperoleh nilai energi gap sebesar 1.54–1.89 eV dan LHE yang berada di kisaran 79-97%. Penelitian lainnya oleh Xing,dkk (2015) menggunakan *N-Fused Carbazole-Zinc Porphyrin* (DTBC-TP) yang menghasilkan nilai energi injeksi ( $\Delta G^{\text{injeksi}}$ ) -1,14 eV dan nilai LHE 0,999 eV.

Perbedaan sebaran elektron pada masing-masing modifikasi akan menyebabkan perbedaan nilai pada masing-masing parameter tersebut. Diharapkan modifikasi yang dilakukan akan menunjukkan pengaruh variasi atom pusat pada turunan klorofil alami sehingga dapat dilakukan modifikasi lebih lanjut. Hasil

modifikasi terbaik selanjutnya akan menjadi dasar untuk penelitian di laboratorium basah.

## **B. Batasan Masalah**

Batasan masalah penelitian ini adalah:

1. Jenis feofitin yang digunakan adalah feofitin  $\alpha$  dan feofitin  $\beta$
2. Penelitian ini menghasilkan kesimpulan modifikasi terbaik untuk meningkatkan efisiensi ( $\eta$ ) DSSC, hanya terbatas pada parameter teoritik.
3. Parameter teoritik yang digunakan adalah panjang ikatan sensitizer dengan semikonduktor, spektra, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, LHE (*Light Harvesting Energy*), dan  $\Delta G$  injeksi elektron.

## **C. Rumusan Masalah**

Rumusan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Bagaimana pengaruh penambahan atom pusat Cu, Ni dan Zn terhadap karakteristik fotoelektrik feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  berdasarkan kestabilan senyawa ditinjau dari tingkat energi total?
2. Bagaimana modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan karakteristik terbaik untuk feofitin sebagai senyawa dye pada DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan sensitizer dengan semikonduktor terpendek, serapan spektra terbesar ada daerah UV-Vis, kerapatan molekul tertinggi, energi HOMO-LUMO, nilai LHE tertinggi, dan  $\Delta G$  injeksi terendah ?

#### **D. Tujuan Penelitian**

Tujuan penelitian ini adalah:

1. Merumuskan pengaruh penambahan atom pusat Cu, Ni dan Zn terhadap karakteristik fotoelektrik feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  berdasarkan kestabilan senyawa ditinjau dari tingkat energi total.
2. Menentukan modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan karakteristik terbaik untuk feofitin sebagai senyawa dye pada DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan sensitizer dengan semikonduktor terpendek, serapan spektra terbesar ada daerah UV-Vis, kerapatan molekul tertinggi, energi HOMO-LUMO, nilai LHE tertinggi, dan  $\Delta G$  injeksi terendah.

#### **E. Manfaat Penelitian**

Manfaat penelitian ini adalah:

1. Menghasilkan referensi teoritik mengenai metode yang dapat digunakan dalam meningkatkan efisiensi feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  sebagai senyawa dye dalam DSSC.
2. Mengetahui pengaruh modifikasi atom pusat feofitin terhadap efisiensi fotoelektrik feofitin berdasarkan parameter panjang ikatan sensitizer dengan semikonduktor, spektra, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, LHE, dan  $\Delta G$  injeksi

## **BAB V**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **A. Kesimpulan**

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

1. Pengaruh penambahan atom pusat Cu, Ni dan Zn terhadap efisiensi fotoelektrik feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  memberikan pengaruh yang bervariasi, tergantung jenis atom pusat yang digunakan. Terdapat kekurangan dan kelebihan yang diberikan oleh penambahan atom pusat berdasarkan parameter-parameter yang digunakan. Senyawa yang paling mungkin untuk disintesis berdasarkan kestabilannya adalah atom Zn Feofitin  $\beta$  karena memiliki energi yang paling rendah yaitu -4594,713 kJ/mol.
2. Berdasarkan parameter-parameter yang digunakan parameter-parameter yang digunakan bila ditinjau dari panjang ikatan atom pusat dengan ligan terbaik adalah Ni Feofitin  $\alpha$ ; energi HOMO-LUMO terbaik diperoleh Feofitin  $\alpha$  dengan nilai energi LUMO sebesar -2,6349 eV dan nilai energi HOMO sebesar -4,7282 eV; spektra terbaik diperoleh oleh Zn Feofitin  $\beta$  dengan serapan pada panjang gelombang 386,77 nm dan 536,15 nm; efisiensi penyerapan cahaya (LHE) terbaik adalah Zn Feofitin  $\beta$ ; konstanta kopling ( $V_{rp}$ ) terbaik yaitu Cu Feofitin  $\alpha$ ; dan panjang ikatan *dye* dengan  $TiO_2$  terbaik adalah Feofitin  $\beta$ . Berdasarkan parameter di atas modifikasi terbaik untuk DSSC yaitu Zn Feofitin  $\beta$  > Zn Feofitin  $\alpha$  > Feofitin  $\beta$  > Feofitin  $\alpha$  > Cu Feofitin  $\beta$  > Ni Feofitin  $\alpha$  > Ni Feofitin  $\beta$  > Cu Feofitin  $\alpha$ .

## **B. Saran**

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





## DAFTAR PUSTAKA

- Arifin, Z., Soeparman, S., Widhiyanuriyawan, D., Suyitno, S., and Setyaji, A.T. 2017. *Improving Stability Of Chlorophyll As Natural Dye For Dye-Sensitized Solar Cells*. Jurnal Teknologi 80.
- Ariyanti, Nita., Aininu Nafiunisa dan Fathia Mutiara Wilis., 2016., *Ekstraksi dan Karakterisasi Klorofil dari Daun Suji (Pleomele Angustifolia) sebagai Pewarna Pangan Alami.*, Jurnal Aplikasi Teknologi Pangan 5 (4) 2016
- Barnoy, E., Conley, M., Gan, S., Gafe, Y., Lovell, J., Mann, K., Shuchatowitz, A., Tobin, C., 2011, *The Potential of Natural, Photosynthetic Pigments To Improve the Efficiency of Dye-Sensitized Solar Cells*, PhD Thesis, University of Maryland, Maryland.
- Budiyanto A.W., Notosudarmo S., dan Limantara L., 2008. *Pengaruh Pengasaman Terhadap Fotodegradasi Klorofil a*. JMS. Vol. 13. No.3 Constable,2009
- Deviyanti., 2014., *Studi Komputasi Kompleks Molekul Zat Warna Unggulan Pada DSSC .*, Skripsi., Institut Teknologi Bandung
- Effendy., 2004., *Prespektif Baru Kimia Koordinasi Jilid 1*. Malang: Bayu Media Publishing
- Erge H.S, Karadeniz F, Koca N, Soyer Y., 2008. *Effect Of Heat Treatment On Chlorophyll Degradation And Color Loss In Green Peas*. GIDA. 33 (5) : 225-233
- M. Ernzerhof, , 1998 *Density Functionals: Theory and Applications, Vol. 500of Lecture Notes in Physics*, edited by D. P. Joubert ~Springer Verlag, Berlin.
- Fan, W., Tan, D., and Deng, W.-Q. 2012. *Acene-Modified Triphenylamine Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: A Computational Study*. ChemPhysChem 13, 2051–2060.
- Feng, J., Jiao, Y., Ma, W., Nazeeruddin, M.K., Grätzel, M., and Meng, S. 2013. *First Principles Design of Dye Molecules with Ullazine Donor for Dye Sensitized Solar Cells*. The Journal of Physical Chemistry C 117, 3772–3778.
- Feng, Yanting, Lingyan Meng, Jinfeng Zhao, Yongqing Li, Mengtao Sun, and Jianing Chen. 2014. *Bioorganic Dye-Sensitized Solar Cell of Carotenoid–*

*pheophytin a-TiO<sub>2</sub>*. RSC Adv. 4, no. 108, 63016–24. doi:10.1039/C4RA12465K.

Hafeldt, G. Boschloo, L. C. Sun, L. Kloo and H. Pettersson. 2010. *Dye-Sensitized Solar Cells*, Chem. Rev. 110, 6595-6663.

Jungsuttiwong, S., Tarsang, R., Sudyoadsuk, T., Promarak, V., Khongpracha, P., Namuangruk, S., 2013. *Theoretical Study On Novel Double Donor-Based Dyes Used In High Efficient Dye-Sensitized Solar Cells: The Application Of TDDFT Study To The Electron Injection Process*. Organic Electronics 14, 711 –722. doi:10.1016/j.orgel.2012.12.018

Karthikeyan, S., and Lee, J.Y. 2013. *Zinc-Porphyrin Based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells*. The Journal of Physical Chemistry A 117, 10973–10979.

Kilian, K., Pęgier, M., and Pyrzyńska, K. 2016. *The Fast Method of Cu-Porphyrin Complex Synthesis for Potential Use in Positron Emission Tomography Imaging*. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 159, 123–127.

Koca, Nuray, Feryal Karadeniz, and Hande Selen Burdurlu. 2006. *Effect of pH on Chlorophyll Degradation and Colour Loss in Blanched Green Peas*, Food Chemistry, 100, 609 –615. Kosyachenko, Leonid A. Solar Cells: Dye-Sensitized Devices. Rijeka, Croatia: InTech, 2011.

Lawrance, Geoffrey A. 2010 *Introduction to Coordination Chemistry. Inorganic Chemistry*. Chichester, U.K: Wiley,.

Lee, C.-W., Lu, H.-P., Lan, C.-M., Huang, Y.-L., Liang, Y.-R., Yen, W.-N., Liu, Y.-C., Lin, Y.-S., Diao, E.W.-G., and Yeh, C.-Y. 2009. *Novel Zinc Porphyrin Sensitizers for Dye-Sensitized Solar Cells: Synthesis and Spectral, Electrochemical, and Photovoltaic Properties*. Chemistry - A European Journal 15, 1403–1412.

Lee, Myung Jun, Kang Deuk Seo, Hae Min Song, Min Soo Kang, Yu Kyung Eom, Hong Seok Kang, and Hwan Kyu Kim. 2011. *Novel D- $\pi$ -A System Based on Zinc-Porphyrin Derivatives for Highly Efficient Dye-Sensitized Solar Cells*. Tetrahedron Letters 52, no. 30 (July 2011): 3879 –82. doi:10.1016/j.tetlet.2011.05.074.

Lewars, Errol. 2004. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Boston, MA: Springer US,.

- Linfoot, C.L., Richardson, P., McCall, K.L., Durrant, J.R., Morandeira, A., Robertson, N., 2011. *A Nickel-Complex Sensitiser For Dye-Sensitized Solar Cells*. *Solar Energy* 85, 1195 –1203. doi:10.1016/j.solener.2011.02.023
- Mathew, Simon, Aswani Yella, Peng Gao, Robin Humphry-Baker, Basile F. E. Curchod, Negar Ashari-Astani, Ivano Tavernelli, Ursula Rothlisberger, Md. Khaja Nazeeruddin, and Michael Grätzel. *Dye-Sensitized Solar Cells with 13% Efficiency Achieved through the Molecular Engineering of Porphyrin Sensitizers*. *Nature Chemistry* 6, no. 3 (February 2, 2014): 242 –47. doi:10.1038/nchem.1861.
- Obotowo, I.N., Obot, I.B., Ekpe, U.J., 2016. *Organic Sensitizers For Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC): Properties From Computation, Progress And Future Perspectives*. *Journal of Molecular Structure* 1122, 80 –87. doi:10.1016/j.molstruc.2016.05.080
- O'Regan, Brian, and Michael Grätzel. 1991. *A Low-Cost, High-Efficiency Solar Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO<sub>2</sub> Films*. *Nature* 353, no. 6346 : 737 –40. doi:10.1038/353737a0.
- Parker, S.P, 1986. *Mc Graw-Hill Dictionary for Chemistry*. New York: Mc Graw-Hill Book Company
- Rocca, D., Gebauer, R., De Angelis, F., Nazeeruddin, M.K., Baroni, S., 2009. *Time-Dependent Density Functional Theory Study Of Squaraine Dye-Sensitized Solar Cells*. *Chemical Physics Letters* 475, 49 –53. doi:10.1016/j.cplett.2009.05.019
- Santhanamoorthi, N., Lo, C.-M., and Jiang, J.-C. 2013. *Molecular Design of Porphyrins for Dye-Sensitized Solar Cells: A DFT/TDDFT Study*. *The Journal of Physical Chemistry Letters* 4, 524–530.
- Shalabi, A.S., El Mahdy, A.M., and Taha, H.O. 2013. *Screening of Thiophene-Substituted Metalloporphyrins (Zn, Ni, Fe, Ti) for Use in Dye-Sensitized Solar Cells DFT and TD-DFT Study*. *Journal of Nanoparticle Research* 15.
- Sugiharto., 2014., *Sel Surya Hibrid Nanopartikel Zno/Klorofil Termodifikasi Ion Logam (Zn<sup>2+</sup> Dan Cu<sup>2+</sup>)*. Tesis: Intitut Pertanian Bogor
- Syafinar, R., Gomesh, N., Irwanto, M., Fareq, M., Irwan, Y.M., 2015. *Chlorophyll Pigments As Nature Based Dye For Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)*. *Energy Procedia* 79, 896 –902. doi:10.1016/j.egypro.2015.11.584

- Urbani, Maxence, Michael Grätzel, Mohammad Khaja Nazeeruddin, and Tomás Torres. 2014. *Meso-Substituted Porphyrins for Dye-Sensitized Solar Cells*. Chemical Reviews 114, no. 24: 12330–96. doi:10.1021/cr5001964.
- Vila, Marta M.D.C., Marco V. Chaud, and Victor M. Balção. 2015. *Microencapsulation of Natural Anti-Oxidant Pigments in Microencapsulation and Microspheres for Food Applications*, editor L. M. C. Sagis, Academic Press, London, 369-390.
- Wang, X.-F., Tamiaki, H., 2010. *Cyclic Tetrapyrrole Based Molecules For Dye-Sensitized Solar Cells*. Energy Environ. Sci. 3, 94–106. doi:10.1039/B918464C
- Wang, X.-F., and Kitao, O. 2012. *Natural Chlorophyll-Related Porphyrins and Chlorins for Dye-Sensitized Solar Cells*. Molecules 17, 4484–4497
- Zeng, K., Lu, Y., Tang, W., Zhao, S., Liu, Q., Zhu, W., Tian, H., and Xie, Y. (2019). Efficient solar cells sensitized by a promising new type of porphyrin: dye-aggregation suppressed by double strapping. Chemical Science 10, 2186–2192.



## LAMPIRAN

1. Konfersi energi (eV) dari pangang gelombang (nm) feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  hasil eksperimen.

Panjang gelombang maksimal feofitin  $\alpha = 409,5 \text{ nm} = 3,0277 \text{ eV}$

Panjang gelombang maksimal feofitin  $\beta = 434,5 \text{ nm} = 3,3482 \text{ eV}$

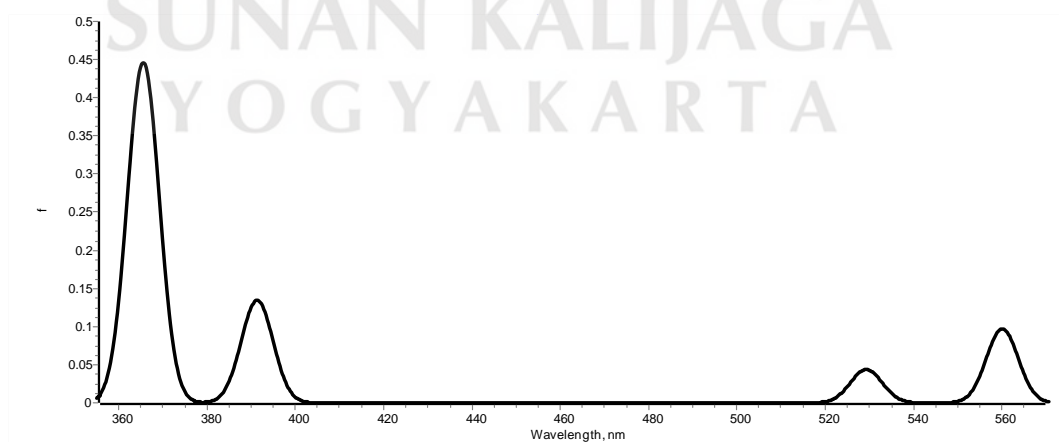
2. Presentase perbandingan amntara feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  hasil eksperimen dan hasil penelitian yang dilakukan.

$$\begin{aligned} \% \text{ perbandingan Feofitin } \beta &= \frac{\text{Hasil Perhitungan}}{\text{Hasil Eksperimen}} \times 100\% \\ &= \frac{3,3915 \text{ eV}}{3,0277 \text{ eV}} \times 100\% \\ &= 112,05\% \end{aligned}$$

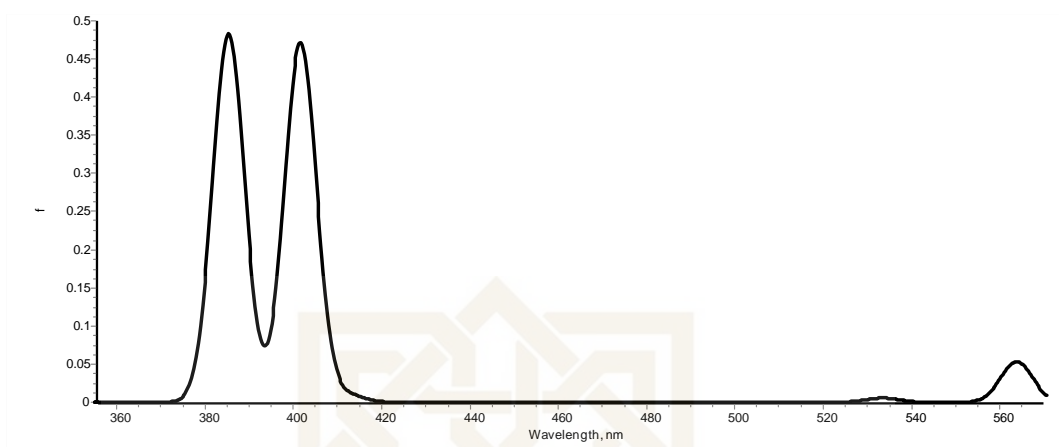
$$\begin{aligned} \% \text{ perbandingan Feofitin } \beta &= \frac{\text{Hasil Perhitungan}}{\text{Hasil Eksperimen}} \times 100\% \\ &= \frac{3,2173 \text{ eV}}{3,3482 \text{ eV}} \times 100\% \\ &= 96,09\% \end{aligned}$$

3. Spektra feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  serta feofitin  $\alpha$  dan  $\beta$  hasil modifikasi

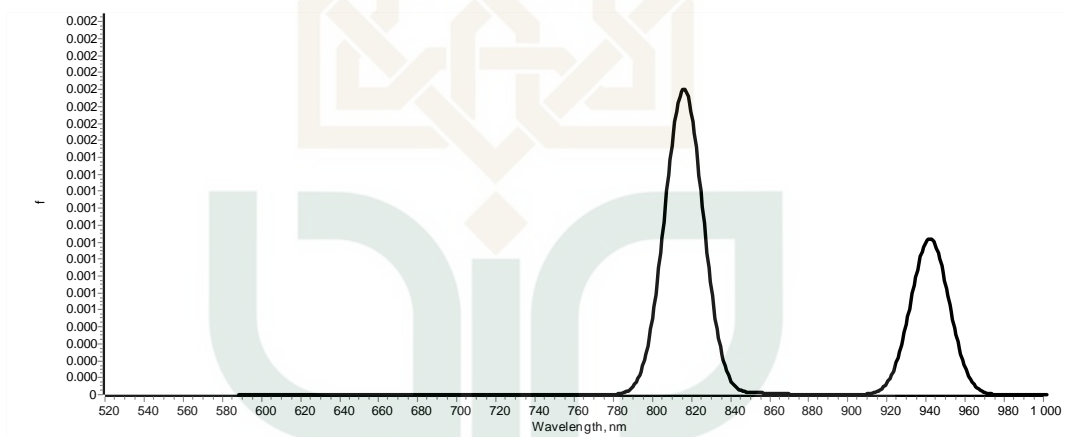
Feofitin  $\alpha$



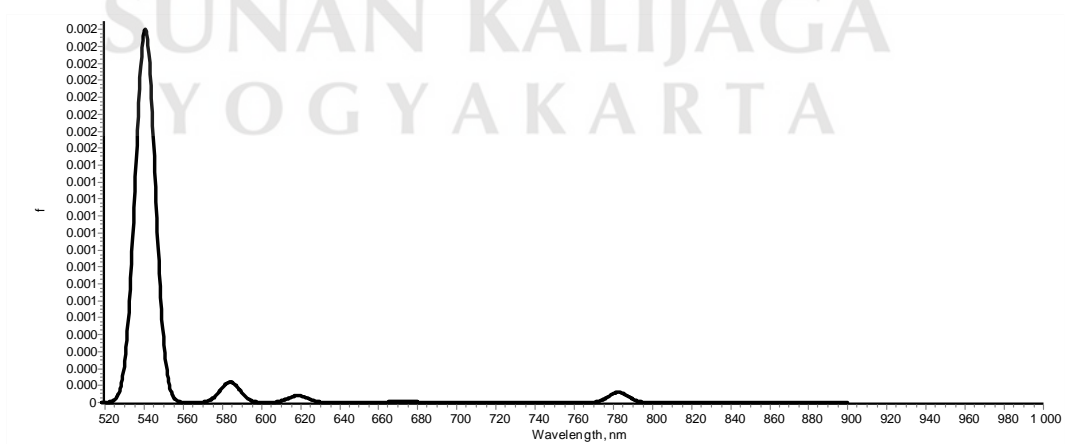
### Feofitin $\beta$



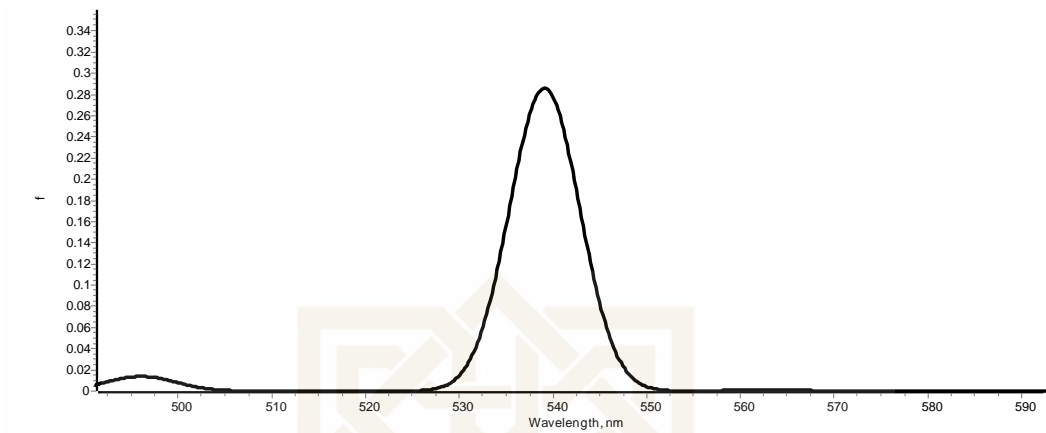
### Cu Feofitin $\alpha$



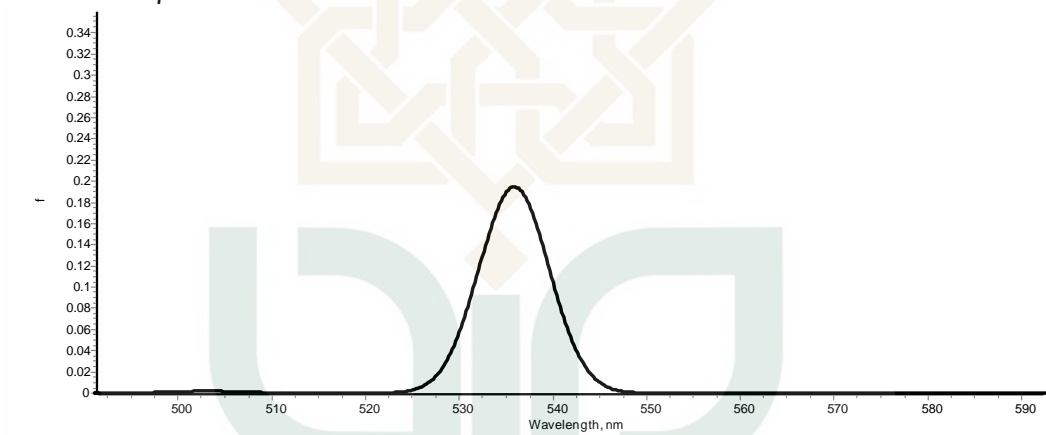
### Cu Feofitin $\beta$



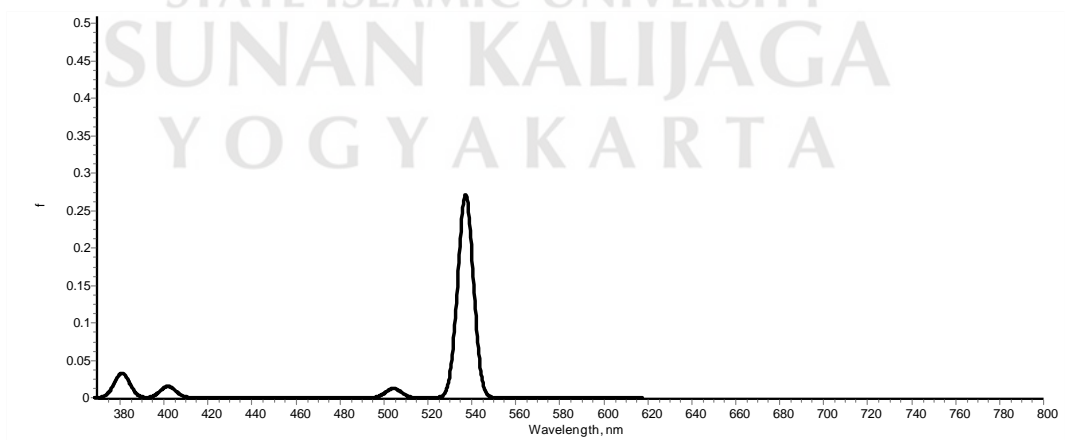
### Ni Feofitin $\alpha$



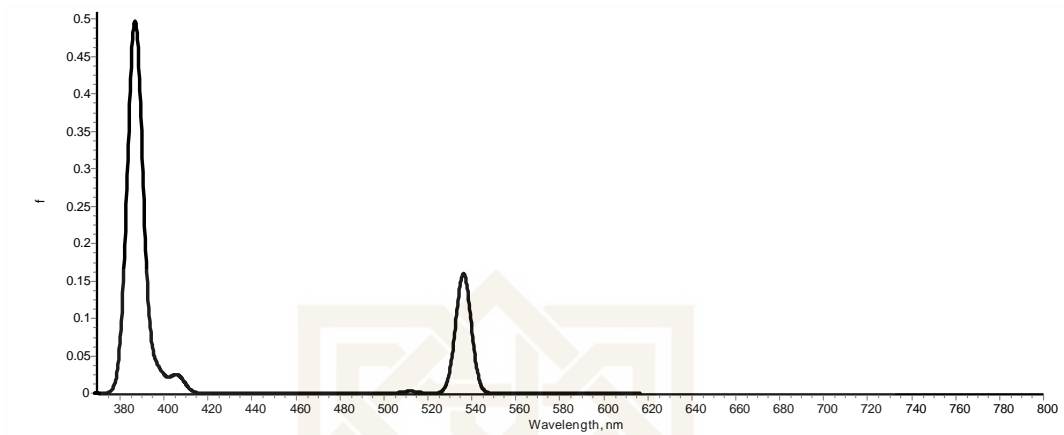
### Ni Feofitin $\beta$



### Zn Feofitin $\alpha$



## Zn Feofitin $\beta$



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA



## CURICULUM VITAE



### A. Biodata Pribadi

Nama Lengkap : Zidni Rahmatika  
Jenis Kelamin : Perempuan  
Tempat Tanggal Lahir : Temanggung, 24 Agustus 1994  
Alamat asal : Dukuh RT.03/RW.02 Ds Mergowati, Kec Kedu,  
Kab Temanggung  
Alamat Tinggal : Demangan Gunungan RT.01 Ds Pleret, Kec  
Pleret, Kab Bantul  
E-mail : [rahmatika.zidni@gmail.com](mailto:rahmatika.zidni@gmail.com)  
No.HP : 08895744358

### B. Latar Belakang Pendidikan Formal

Jenjang	Nama Sekolah	Tahun
TK	TK Islam Izzatul Islam Getasan	1999-2001
SD	SD Muhammadiyah Parakan	2001-2006
SMP	SMPIT Ihsanul Fikri Magelang	2006-2009
SMA	SMKN1 Temanggung	2009-2013
S1	UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta	2014-2019

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA