

**KAJIAN TEORITIS TURUNAN *PYROPHEOPHORBIDE* α
SEBAGAI SENYAWA *DYE* PADA *DYE-SENSITIZED*
SOLAR CELL (DSSC)**

Skripsi
Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana S-1



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Disusun Oleh:
Hidayatullah Putra Hutasoit
15630014

PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2019



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-4495/Un.02/DST/PP.00.9/10/2019

Tugas Akhir dengan judul : Kajian Teoritis Turunan Pyropheophorbide α Sebagai Senyawa Dye pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : HIDAYATULLAH PUTRA HUTASOIT
Nomor Induk Mahasiswa : 15630014
Telah diujikan pada : Jumat, 27 September 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

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

Penguji II

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.
NIP. 19760621 199903 2 005

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 27 September 2019

UIN Sunan Kalijaga
Fakultas Sains dan Teknologi



[Signature]
[Name]
[NIP. 1971212 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 : Hidayatullah Putra Hutasoit
NIM : 15630014
Judul Skripsi : Kajian Teoritis Turunan *Pyropheophorbide a* sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitisasi (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 berharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqsyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu 'alaikum warahmatullahi wabarakatuh

Yogyakarta, 19 Agustus 2019
Pembimbing,

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



NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp : -

Kepada

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

Assalamu 'alaikumwarahmatullahiwabarakatuh

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

Nama : Hidayatullah Putra Hutasoit

NIM : 15630014

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Turunan *Pyropheophorbide a* Sebagai Senyawa Dye pada *Dye-Sensitized Solar Cell (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 'alaikumwarahmatullahiwabarakatuh

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 23 Oktober 2019
Konsultan,

Dr. Imelda Fajriati, M.Si.

NIP. 19750725 200003 2 001



NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp : -

Kepada

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

Assalamu 'alaikumwarahmatullahiwabarakatuh

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

Nama : Hidayatullah Putra Hutasoit

NIM : 15630014

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Turunan *Pyropheophorbide a* Sebagai Senyawa *Dye* pada *Dye-Sensitized Solar Cell (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 'alaikumwarahmatullahiwabarakatuh

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 23 Oktober 2019
Konsultan,

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.
NIP. 19760621 199903 2 005

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Hidayatullah Putra Hutasoit
NIM : 15630014
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “*Kajian Teoritis Turunan Pyropheophorbide a Sebagai Senyawa Dye pada Dye-Sensitized Solar Cell (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, 27 September 2019



Hidayatullah Putra Hutasoit
NIM. 15630014

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

*Skripsi ini saya persembahkan untuk
Almamater tercinta Program Studi Kimia
UIN Sunan Kalijaga*



HALAMAN MOTTO

Ever tried. Ever failed. No matter. Try again. Fail again. Fail better.
- Samuel Beckett -

I am, and always have been, passionately curious.
- Ada Yonath -



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

Segala puji bagi Allah SWT yang telah memberikan kesempatan sehingga skripsi yang berjudul “*Kajian Teoritis Turunan Pyropheophorbide a Sebagai Senyawa Dye Pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)*” dapat diselesaikan sebagai salah satu persyaratan untuk mencapai derajat Sarjana Kimia.

Penyusun mengucapkan terimakasih kepada semua pihak yang telah terlibat dengan memberikan dorongan, semangat dan masukan sehingga tahapan penyusunan skripsi ini telah selesai. Ucapan terimakasih tersebut secara khusus disampaikan kepada:

1. Bapak Prof. Drs. Yudian Wahyudi Ph.D, selaku Rektor Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Bapak Dr. Murtono, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Ibu Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si., selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Sunan Kalijaga Yogyakarta.
4. Bapak Sudarlin, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang telah secara ikhlas dan sabar meluangkan waktu untuk membimbing dan mengarahkan serta memberikan motivasi dalam menyusun skripsi ini.
5. Bapak dan Ibu dosen Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membagi ilmu yang bermanfaat.

6. Laboran Laboratorium Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu dan memberi saran selama penelitian.
7. Seluruh Staf Karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu sehingga penyusunan skripsi ini dapat berjalan dengan lancar.
8. Kedua orang tua penyusun, Mathrios Zulhidayat Hutasoit Amd.IP, S.H dan Desi Handayani yang selalu memberikan do'a, semangat, nasehat dan dukungan sehingga penyusun dapat menyelesaikan skripsi ini.
9. Keluarga besar Kimia Angkatan 2015 yang telah mendukung dan membantu selama masa studi dan penyusunan skripsi.
10. Teman-teman kelompok bimbingan, Andika, Fikri, Anggit dan Dhea yang telah memberikan saran serta masukan selama penyusunan skripsi.
11. Semua pihak yang tidak dapat penyusun sebutkan satu persatu atas bantuannya dalam penyusunan skripsi ini.

Demi kesempurnaan skripsi ini, kritik dan saran sangat diharapkan. Penyusun berharap skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan secara umum serta secara khusus bagi perkembangan ilmu pengetahuan di bidang kimia.

Yogyakarta, 27 September 2019
Penyusun,

Hidayatullah Putra Hutasoit
NIM. 15630014

DAFTAR ISI

| | |
|---|-----------|
| HALAMAN PENGESAHAN..... | ii |
| SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR | iii |
| NOTA DINAS KONSULTAN | iv |
| SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI..... | vi |
| HALAMAN PERSEMBAHAN | vii |
| HALAMAN MOTTO | viii |
| KATA PENGANTAR | ix |
| DAFTAR ISI..... | xi |
| DAFTAR GAMBAR | xiii |
| DAFTAR TABEL..... | xiv |
| ABSTRAK | xv |
| BAB I PENDAHULUAN | 1 |
| A. Latar Belakang | 1 |
| B. Batasan Masalah | 5 |
| C. Rumusan Masalah..... | 6 |
| D. Tujuan Penelitian | 6 |
| E. Manfaat Penelitian | 7 |
| BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI | 8 |
| A. Tinjauan Pustaka..... | 8 |
| B. Landasan Teori..... | 9 |
| C. Hipotesis | 19 |
| BAB III METODE PENELITIAN..... | 21 |
| A. Waktu dan Tempat Penelitian..... | 21 |
| B. Alat-alat Penelitian..... | 21 |
| C. Cara Kerja Penelitian | 21 |
| BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN | 27 |
| A. Energi HOMO dan LUMO Senyawa Turunan PPhe-a..... | 27 |
| B. Kerapatan Elektron | 30 |
| C. Spektra UV-Visible Teoritik | 32 |
| D. <i>Coupling Constant</i> ($ V_{RP} $)..... | 35 |
| E. <i>The Free Energy for Electron Injection</i> (ΔG^{inject})..... | 36 |
| F. <i>Light Harvesting Efficiency</i> (LHE)..... | 37 |
| G. Hasil Optimasi Senyawa Turunan PPhe-a dengan Penambahan Atom Pusat Ni, Zn, Ba dan Pt..... | 38 |
| BAB V KESIMPULAN DAN SARAN..... | 43 |
| A. Kesimpulan | 43 |
| B. Saran | 44 |



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

DAFTAR GAMBAR

| | Halaman |
|---|---------|
| Gambar 2. 1. Skema proses pada DSSC (Kosyachenko, L.A., 2011). | 10 |
| Gambar 2. 2. Rumus struktur klorofil (Andarwulan, N., 2012)..... | 12 |
| Gambar 2. 3. Bagan reaksi degradasi klorofil menjadi Piropeoforbid (Andarwulan, N., 2012). | 13 |
| Gambar 4. 1. Tingkat energi HOMO-LUMO senyawa turunan PPhe-a..... | 28 |
| Gambar 4. 2. Orbital Molekul HOMO dan LUMO Senyawa Turunan PPhe-a.... | 32 |
| Gambar 4. 3. Spektrum Serapan Senyawa Turunan PPhe-a pada Panjang Gelombang Maksimal..... | 33 |
| Gambar 4. 4. Tingkat Energi HOMO-LUMO Senyawa 3PPhe-a dengan Penambahan Atom Pusat..... | 41 |

DAFTAR TABEL

| | Halaman |
|--|---------|
| Tabel 4. 1. Panjang gelombang (λ) serapan senyawa turunan PPhe-a..... | 35 |
| Tabel 4. 2. Karakteristik <i>coupling constant</i> senyawa turunan PPhe-a..... | 36 |
| Tabel 4. 3. Karakteristik ΔG^{inject} senyawa turunan PPhe-a..... | 37 |
| Tabel 4. 4. Karakteristik <i>Light Harvesting Efficiency</i> (LHE) Senyawa Turunan PPhe-a..... | 38 |
| Tabel 4. 5. Panjang ikatan antara atom pusat dengan atom nitrogen ligan (Keterangan: + = terbentuk ikatan, - = tidak terbentuk ikatan)..... | 40 |



ABSTRAK

Kajian Teoritis Turunan *Pyropheophorbide α* Sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitisasi (DSSC).

Oleh:

Hidayatullah Putra Hutasoit

15630014

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

Penelitian kajian teoritis turunan *pyropheophorbide α* (PPhe-a) sebagai senyawa *dye* sel surya tersensitisasi (DSSC) telah dilakukan. Parameter teoritis yang digunakan adalah serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, panjang ikatan atom pusat dengan *dye*, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*). Senyawa turunan PPhe-a berdasarkan parameter tingkat energi LUMO optimum ditambahkan logam Zn, Ni, Ba dan Pt sebagai atom pusat. Keberhasilan modifikasi dilihat dari parameter panjang ikatan atom pusat dengan atom N pada cincin pirol senyawa turunan PPhe-a dan energi HOMO-LUMO.

Optimasi geometri menggunakan software *NwChem* dengan basis set 6-31G* untuk atom C, H, O, N dan Zn. Atom Ni, Ba dan Pt menggunakan basis set LANL2DZ, serta interpretasi hasil optimasi menggunakan software *Chemmission* dan *ChemCraft*. Optimasi keadaan dasar menggunakan metode DFT-B3LYP dan optimasi keadaan tereksitasi menggunakan metode TD-DFT. Hasil penelitian menunjukkan senyawa turunan PPhe-a dapat digunakan sebagai senyawa *dye* DSSC. Berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, senyawa 3PPhe-a memiliki energi HOMO dan LUMO optimum. Parameter $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), senyawa 4PPhe-a memiliki nilai konstanta optimum. Parameter ΔG^{inject} , senyawa 3PPhe-a memiliki nilai optimum Parameter LHE (*Light Harvesting Efficiency*), senyawa 1PPhe-a memiliki nilai optimum. Parameter serapan pada daerah UV-Vis dan kerapatan elektron menunjukkan kesamaan karakter. Modifikasi dengan penambahan atom pusat pada senyawa 3PPhe-a menunjukkan terbentuknya ikatan dengan atom logam Ni, Ba dan Pt sedangkan atom Zn tidak membentuk ikatan. Berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO terjadi penurunan tingkat energi dari senyawa 3PPhe-a termodifikasi dibandingkan dengan senyawa 3PPhe-a sebelum modifikasi, sehingga tidak dapat digunakan sebagai senyawa *dye* sel surya DSSC.

Kata Kunci – DSSC, DFT, TD-DFT, HOMO-LUMO, UV-Vis, LHE, $|V_{RP}|$, ΔG^{inject} dan *pyropheophorbide α*.

BAB I PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Energi merupakan kebutuhan yang penting bagi kelangsungan hidup manusia. Energi yang sering digunakan masih bersumber pada minyak, gas bumi, dan berbagai sumber bahan bakar fosil lainnya (Hardeli *et al*, 2013). Ketergantungan manusia terhadap energi fosil menyebabkan semakin tipis sumber dari energi fosil (Ardianto *et al*, 2015). Sumber daya fosil membutuhkan waktu ribuan tahun untuk terbentuk kembali dan tidak dapat diganti secepat sumber energi fosil ini digunakan. Sumber energi fosil yang semakin berkurang membuat perlunya dicari sumber energi alternatif untuk menggantikan sumber energi fosil (Rahayu, 2011).

Energi surya merupakan salah satu energi alternatif yang sedang dikembangkan saat ini (Iwantono *et al*, 2015). Pengaplikasian energi surya dalam konversi energi cahaya menjadi energi listrik melalui sel surya (Prasatya dan Diah, 2013). Sinar matahari yang diserap oleh sel surya akan membentuk pasangan elektron-hole yang dapat menghasilkan listrik (Rahayu, 2011).

Sel surya saat ini telah sampai pada generasi ketiga. Sel surya generasi ketiga merupakan sel surya yang tujuan dalam pembuatannya menghasilkan energi listrik yang besar dan efisiensi yang tinggi dengan biaya produksi yang murah melalui pembuatan sel surya polimer atau disebut dengan sel surya organik (Ludin *et al*, 2014).

Sel surya organik menggunakan senyawa organik sebagai senyawa pemeka yang akan mengubah sinar matahari menjadi energi listrik. Syarat senyawa organik yang dapat digunakan sebagai pemeka adalah mampu menyerap seluruh warna cahaya tampak, memiliki tingkat energi eksitasi yang bersesuaian dengan pita konduksi material celah lebar tidak terlalu jauh, memiliki potensial redoks yang cukup besar sehingga dapat diregenerasi melalui donasi elektron dan elektrolit redoks serta mempunyai stabilitas kimia dan fisika khususnya terhadap panas. Contoh senyawa organik yang memenuhi syarat tersebut adalah turunan klorofil yaitu *pyropheophorbide a*. Salah satu turunan *pyropheophorbide a* yang telah berhasil disintesis oleh Li, Jiazhu *et al* (2017) adalah *methyl-5-cyano-6-methoxy pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide a*, *methyl 5-acetyl-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide a*, *methyl 5-carbethoxy-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide a*, dan *methyl 5-cyano-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide a*. Keempat senyawa tersebut akan dipelajari secara teoritik potensinya sebagai senyawa *dye* DSSC.

Senyawa turunan *pyropheophorbide a* yang telah dipelajari sebagai senyawa *dye* pada sel surya tersensitisasi adalah *hexyl 3-devinyl-3-hydroxymethylpyropheophorbide-a*, *dodecyl 3-devinyl-3-hydroxymethylpyropheophorbide-a*, *octadecyl 3-devinyl-3-hydroxymethylpyropheophorbide-a* dan *methyl 3-devinyl-3-methylhydroxymethylpyropheophorbide-a*. Penelitian dilakukan oleh Ela *et al* (2015) menggunakan atom Zn untuk modifikasi turunan *pyropheophorbide a* tersebut sebagai senyawa kompleks. Hasil penelitiannya menunjukkan *band gap*

energi sebesar 1.85 eV untuk ZnChl-C6, 1.88 eV untuk ZnChl-C18, 1.91 eV untuk ZnChl-C12, dan 1.86 eV untuk ZnChl-OH serta menghasilkan efisiensi sebesar 0.15% untuk ZnChl-OH, 0.76% untuk ZnChl-C12, 0.44% untuk ZnChl-C18, dan 0.35% untuk ZnChl-C6. Zn(II)

Seiring perkembangan teknologi, sel surya generasi terbaru telah ditemukan oleh Gratzel dan O'Regan pada tahun 1991 yaitu *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) (O'Regan & Gratzel, 1991). Sel surya generasi terbaru ini mempunyai kelebihan dalam biaya pembuatannya yang murah dan *dye* yang digunakan mudah ditemukan di alam (Lahsmin, 2016). Namun, DSSC masih memiliki efisiensi lebih rendah dibandingkan dengan sel surya berbasis silikon yang memiliki efisiensi mencapai 15-25% (Susanti *et al*, 2014).

Modifikasi yang dilakukan adalah penambahan atom pusat pada senyawa organik sehingga menjadi senyawa kompleks. Beberapa diantaranya yang sudah dilakukan adalah Seo *et al* (2012) dan Zhang *et al* (2015). Seo *et al* (2012) telah menambahkan atom pusat Zn pada senyawa porfirin dimana berhasil disintesis senyawa 5,15-Bisphenyl-15-triphenylamino(4-carboxylphenyl)porphyrinatozinc (HKK-Por 3), 5,15-Bis(2,4,6-trimethylphenyl)-15-triphenylamino(4-carboxylphenyl) porphyrinatozinc (HKK-Por 4) dan 5,15-Bis(2,4,6-trimethylphenyl)-15-{4-[Bis-[4-(2-ethylhexyloxy)-phenyl]-amino]}-(4-carboxylphenyl) porphyrinatozinc (HKK-Por 5). Senyawa hasil sintesis Seo *et al*, (2012) memiliki daerah serapan pada 424,5 nm sampai 426,5 nm, 554,5 nm sampai 558 nm dan 598,5 nm sampai 601,0 nm serta memiliki potensial oksidasi *dye* pada TiO₂ yang diukur dalam asetonitril dengan 0,1 M TBAPF₆

berturut-turut sebesar 1,03; 1,05 dan 1,37. Zhang *et al* (2015) juga telah menambahkan atom pusat Zn pada senyawa porfirin dimana berhasil disintesis senyawa *Zn(II)-5,15-bis(2,6-dihexoxyphenyl)-10-(4-carbonylphenyl)-porphyrin* (N-1) dan *Zn(II)-5,15-bis(2,6-dihexoxyphenyl)-10,20-bis(4-carbonylphenyl)-porphyrin* (N-2). Senyawa hasil sintesis Zhang *et al*, (2015) memiliki daerah serapan pada 421,2; 551,6 dan 590,7 nm untuk senyawa N-1 dan 427,7; 557,5 dan 594 nm untuk senyawa N-2 dengan potensial oksidasi sebesar 0,29 untuk N-1 dan 0,32 untuk N-2.

Penelitian pemanfaatan *pyropheophorbide a* sebagai *dye* pada DSSC dapat dilakukan secara teoritik dan eksperimen. Namun, metode eksperimen membutuhkan waktu yang lebih lama. Sehingga pada penelitian ini, akan dikaji pemanfaatan turunan *pyropheophorbide a* menggunakan metode komputasi yang membutuhkan waktu yang lebih lama. Metode komputasi yang digunakan dalam penelitian ini adalah DFT/TD-DFT. Metode komputasi yang digunakan didasarkan data yang dibutuhkan yaitu serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, LHE (*Light Harvesting Efficiency*), ΔG^{inject} dan $|V_{\text{RP}}|$ (*coupling constant*).

Ma *et al* (2010) menggunakan metode DFT dan TDDFT dengan fungsi B3LYP dan basis set 6-31G(d), untuk perhitungan lebih lanjut digunakan basis set LANL2DZ untuk DSSC berbasis Zn porfirin berbasis pendonor elektron. Hasil dari penelitian ini didapat energi gap sebesar 2.740 eV untuk ZnTPP, 2.567 eV untuk ZnTPPF, 2.345 eV untuk ZnTPPD, dan 2.321 eV untuk ZnTPPB serta menghasilkan η sebesar 5.2% untuk ZnTPPB, 5.1% untuk ZnTPPD, dan 4.11%

untuk ZnTPPF. Novir *et al* (2015) menggunakan metode DFT dengan fungsi B3LYP hybrid dan basis set 6-311+G** serta metode TDDFT dengan fungsi B3LYP hybrid dan fungsi CAM-B3LYP dengan basis set 6-311+G** untuk menghitung energi eksitasi dan kekuatan osilator. Hasil dari penelitian ini didapat ΔG^{inject} sebesar -0.94 eV untuk carbazol, -0.93 eV untuk fluorine, dan -0.64 eV untuk pyrrole.

Parameter lainnya yang dapat digunakan adalah |VRP| (*coupling constant*) dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*). Parameter di atas pernah digunakan oleh Novir *et al* (2017), dimana menggunakan senyawa trans- dan cis- pewarna azo menghasilkan |VRP| sebesar 0.83 untuk 1-trans, 0.85 untuk 1-cis, 0.82 untuk 2-trans, 0.99 untuk 2-cis, 0.83 untuk 3-trans, dan 0.98 untuk 3-cis serta menghasilkan LHE sebesar 0.7738 eV untuk 1-trans, 0.4800 eV untuk 1-cis, 0.8000 eV untuk 2-trans, 0.8817 eV untuk 2-cis, 0.8837 eV untuk 3-trans, dan 0.8921 eV untuk 3-cis.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah penelitian ini adalah:

1. Jenis *pyropheophorbide* yang digunakan adalah *pyropheophorbide* α , selanjutnya disingkat PPhe-a.
2. Jenis turunan PPhe-a yang digunakan adalah *methyl-5-cyano-6-methoxy pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide* α (1PPhe-a), *methyl 5-acetyl-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide* α (2PPhe-a), *methyl 5-carbethoxy-6-*

methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide α (3PPhe-a), dan *methyl 5-cyano-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide α* (4PPhe-a).

3. Atom pusat yang digunakan adalah Ni, Zn, Ba dan Pt.
4. Parameter yang digunakan adalah serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, panjang ikatan atom pusat dengan *dye*, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*).

C. Rumusan Masalah

Rumusan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Apakah senyawa turunan *pyropheophorbide α* dapat digunakan sebagai senyawa *dye* pada sel surya tersensitisasi berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*)?
2. Apakah atom Ni, Zn, Ba dan Pt dapat digunakan sebagai atom pusat PPhe-a sebagai *dye* DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan dan energi HOMO-LUMO secara teoritik?

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah:

1. Menentukan karakteristik fotoelektrik turunan PPhe- α sebagai *dye* pada sel surya DSSC berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*).

2. Menentukan potensi logam Ni, Zn, Ba dan Pt sebagai atom pusat PPhe- α sebagai senyawa *dye* DSSC berdasarkan parameter panjang ikatan dan energi HOMO-LUMO secara teoritik.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah:

1. Menghasilkan referensi teoritik mengenai metode yang dapat digunakan untuk meningkatkan karakteristik fotoelektrik PPhe- α sebagai senyawa *dye* dalam DSSC.
2. Mengetahui interaksi antara atom pusat Ni, Zn, Ba dan Pt dengan atom N pada *dye*.

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil dari penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa:

1. Senyawa turunan PPhe-a dapat digunakan sebagai *dye* sel surya DSSC berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*). Nilai terbaik untuk parameter energi HOMO-LUMO adalah senyawa 3PPhe-a dengan nilai HOMO sebesar -4,855 eV dan nilai LUMO sebesar -2,566 eV, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*) adalah senyawa 4PPhe-a dengan nilai $|V_{RP}|$ sebesar 0,465; ΔG^{inject} adalah senyawa 3PPhe-a sebesar -2,364 dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*) adalah senyawa 1PPhe-a sebesar 0,577. Sementara untuk parameter serapan pada daerah UV-Vis dan kerapatan elektron menunjukkan kesamaan karakter.
2. Senyawa 3PPhe-a berpotensi dapat dijadikan senyawa kompleks dengan penambahan atom pusat Ni, Ba dan Pt berdasarkan parameter panjang ikatan antara atom pusat dan ligan. Namun, berdasarkan energi HOMO-LUMO teoritik menghasilkan tingkat energi HOMO dan LUMO lebih kecil dari tingkat energi CB TiO₂ serta tingkat energi Γ/I_3^- sehingga senyawa 3PPhe-a yang termodifikasi penambahan atom pusat tidak dapat digunakan sebagai senyawa *dye* sel surya DSSC.

B. Saran

Penelitian selanjutnya diharapkan melakukan modifikasi dengan penambahan gugus penarik elektron serta penambahan atom pusat yang berbeda agar diperoleh hasil yang lebih baik. Penggunaan teori atau basis set yang lebih mampu dalam menghitung senyawa turunan PPhe-a termodifikasi sehingga data yang diperoleh lebih baik dan akurat.



DAFTAR PUSTAKA

- Agustini, S., Doty Dewi Risanti dan Dyah Sawitri. 2013. Fabrikasi *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) Berdasarkan Fraksi Volume TiO₂ Anatase-Rutile dengan *Gracia Mangostana* dan *Rhoeo Spathacea* sebagai *Dye Fotosensitizer*. *Jurnal Teknik Pomits*, Vol. 2 No. 2.
- Akbar, Bio Insan. 2013. Studi Komputasi Senyawa Dopamine dan Metil Katekol sebagai Dye untuk Aplikasi Dye Sensitized Solar Cell: “Software Benchmarking”.
- Andarwulan, Nuri, dan R.H. Fitri Faradilla. 2012. *Pewarna Alami Untuk Pangan*. Bogor: South East Asian Food and Agricultural Science and Technology (SEAFAST) Center, Institut Pertanian Bogor.
- Apriliani, Annisa Tria. 2017. Studi Komputasi Sifat Elektronik Senyawa Turunan Carbazole sebagai Sensitizer pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC).
- Ardianto, R., Wahyunanto Agung Nugroho, dan Sandra Malin Sutan. Uji Kinerja Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Menggunakan Lapisan Capacitive Touchscreen Sebagai Substrat dan Ekstrak Klorofil *Nannochloropsis Sp.* Sebagai Dye Sensitizer dengan Variasi Ketebalan Pasta TiO₂. *Jurnal Keteknikan Pertanian Tropis dan Biosistem*, Vol. 3 No. 3 (Oktober 2015): 325-337.
- Bachrach, Steven M., 2007. *Computational Organic Chemistry*. England: Jhon Wiley and Sons.
- Cari, Agus Supriyanto, Muh. Iman Darmawan, Hardani, Hendra Darmaja. 2014. Fabrikasi *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) Menggunakan Ekstraksi Bahan-bahan Organik Alam *Celosia Argentums* dan *Lagerstromia sp.* Universitas Sebelas Maret.
- Chang, Raymond. 2005. *Chemistry*. England : Jhon Wiley & Sons.
- Cheng, K.L., K. Ueno and T. Imamura. 1982. *Handbook of Organic Analytical Reagents*. Florida : CRC Press, Boca Raton.
- Clydesdale, F.M., dan Francis F.J., 1976. *Pigments In: Fennema OR (ed). Principles of Food Science*. New York: Marcel Dekker, Inc.
- Cotton, F.A. dan Geoffrey Wilkinson. 1988. *Advanced Inorganic Chemistry*. New York : Jhon Wiley & Sons.
- Ela, Sule Erten, Kasim Ocakoglu, Anna Tarnowska, Olena Vakuliuk, Daniel L. Gryko. 2015. Performance of Zinc Chlorophyll Based Molecules for Dye

- Sensitized Solar Cell. *Dyes and Pigments*, 114, 129-137. doi:10.1016/j.dyepig.2014.11.008.
- Grenn, Martin A., 1982. *Solar Cell Operating Principles Technology and Sistem Application*. Prenticell Hall, Inc Evylewood Cliffs N,J.
- Gross, J., 1991. *Pigments in Vegetable, Chlorophylls and Carotenoids*. New York: Van Nostrand Reinhold.
- Hafeldt, G. Boschloo, L. C. Sun, L. Kloo and H. Pettersson. 2010. Dye-Sensitized Solar Cells, *Chem. Rev.* 110, 6595-6663.
- Hardeli, Suwardani, Riky, Fernando T., Maulidis, Silvia Ridwan., 2013. Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Berbasis Nanopori TiO₂ Menggunakan Antosianin dari Berbagai Sumber Alami. Padang : FMIPA Universitas Lampung. Prosiding Semirata FMIPA Universitas Lampung.
- Hermawati, E.S., Suhartana, dan Taslimah. Sintesis dan Karakterisasi Senyawa Kompleks Zn(II)-8-Hidroksikuinolin. *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi*, Vol. 19 No. 3 (2006): 94-98.
- Idris, Firdaus. 2012. Studi Komputasi Senyawa Organik Indole Phenyl dan Carbazole Phenyl dengan Penambahan Oligo-n-hexylthiophene sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cells (DSSC).
- Iwantono, I., N. Damayanti, F. Anggelina, F. Y. Naumar, A. A. Umar. Efek Co-Doping Al-Ga pada Nanorods ZnO Terhadap Efisiensi Dye Sensitized Solar Cells (DSSC). *Jurnal Material dan Energy Indonesia*, Vol. 05 No. 02 (2015): 8-16.
- Kang, Sung H., In Taek Choi, Min Soo Kang, Yu Kyung Eom, Myong Jong Ju, Ji Yeoun Hong, Hong Seok Kang, Hwan Kyu Kim. Novel D- π -A Structured Porphyrin Dyes with Diphenylamine Derived Electron-Donating Substituensts for Highly Efficient Dye-Sensitized Solar Cells. 2013. *Journal of Materials Chemistry A*. doi:10.1039/c3ta01128c.
- Kang, Sung H., Seung Young Jung, Yeon Wook Kim, Yu Kyung Eom, Hwang Kyu Kim. 2018. Exploratory Synthesis and Photovoltaic Performance Comparison of D- π -A Structured Zn-Porphyrins for Dye-Sensitized Solar Cells. *Dyes and Pigments*, 149, 341-347. doi:10.1016/j.dyepig.2017.10.011.
- Kosyachenko, Leonid A., 2011. *Solar Cells – Dye-Sensitized Devices*. Croatia: InTech.
- Kyzlink, V., 1990. *Principles of Food Preservation*. Tokyo: Elsevier.

- Lahsmin, Yulia Kirana. 2016. Pengaruh Konsentrasi Pigmen Warna dari Daun Pacar Kuku (*Lawsonia inermis* L.) terhadap Efisiensi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC).
- Lewars, Errol. 2004. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Boston, MA: Springer US,.
- Li, Jiazhu, Nailiang He, Yang Liu, Ziping Zhang, Xiao Zhang, Xueying Han, Yunyun Gai, Yongming Liu, Jungang Yin, Jinjun Wang. 2017. Synthesis and Photophysical Properties of Novel Pyridine Fused Chlorophyll a Derivatives. *Dyes and Pigments*, 146, 189-198. doi:10.1016/j.dyepig.2017.07.005.
- Ludin, Norasikin A., A.M. Al-Alwani Mahmoud, Abu Bakar Mohamad, Abd. Amir H. Kadhum, Kamaruzzaman Sopian, Nor Shazlinah Abdul Karim. Review on The development of Natural Dye Photosensitizer for Dye-Sensitized Solar Cells. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 31 (2014), 386-396. doi:10.1016/j.rser.2013.12.001.
- Ma, R., Ping Guo, Linlin Yang, Lianshun Guo, Qinghua Zheng, Guoqun Liu, Xianxi Zhang. 2010. A Theoretical Interpretation and Screening of Porphyrin Sensitizer Candidates with Anticipated Good Photo-to-Electric Conversion Performances for Dye-Sensitized Solar Cells. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 942, 131-136. doi:10.1016/j.theochem.2009.12.011.
- Novir, Samaneh Bagheri dan Sayed Majid Hashemianzadeh. 2015. Density Functional Theory Study of New Azo Dyes with Different π -spacers for Dye-Sensitized Solar Cells. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 143, 20-34. doi:10.1016/j.saa.2015.02.026.
- Novir, Samaneh Bagheri dan Sayed Majid Hashemianzadeh. 2017. Quantum Chemical Investigation of Structural and Electronic Properties of Trans- and Cis-Structure of Some Azo Dyes for Dye-Sensitized Solar Cell. *Computational and Theoretical Chemistry* 1102, 87-97. doi:10.1016/j.comptc.2017.01.009.
- O'Regan, Brian, and Michael Grätzel. 1991. A Low-Cost, High-Efficiency Solar Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO₂ Films. *Nature* 353, no. 6346 : 737–40. doi:10.1038/353737a0.
- Paulsen, H. dan A.X. Trautwein. Calculation of The Electronic Energy Differences of Spin Crossover Complexes. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 65 Issue 4 (April 2004), (793-798). doi:10.1016/j.jpcs.2003.11.017.

- Pranowo, H., 2011. Pengantar Kimia Komputasi. Austrian Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC). Jurusan Kimia Fakultas MIPA UGM Yogyakarta.
- Prasatya, Akbar Nur dan Diah Susanti. 2015. Pengaruh Temperatur Kalsinasi pada Kaca FTO yang di-coating ZnO terhadap Efisiensi DSSC (Dye Sensitized Solar Cell) yang Menggunakan Dye dari Buah Terung Belanda (*Solanum betaceum*). *Jurnal Teknik Pomits*, Vol. 2 No. 2.
- Rahayu, D., Adhitya Bagitaningtyas, Arif Hidayat, dan Atin Suci P. Pengaruh Sel Surya Berpewarna Tersensitisasi (Dye Sensitized Solar Cell) dengan Senyawa Morin dari Kayu Nangka (*Artocarpus Heterophyllus L.*). *Jurnal Penelitian Mahasiswa UNY*, Vol. 6 No. 1 (April 2011).
- Ramachandran, K.I., G. Deepa dan K. Namboori. 2008. Computational Chemistry and Molecular Modeling : Principles and Applications. Verlag Berlin Heidelberg : Springer.
- Rizkiaditama, D., 2017. Analisis Kadar Klorofil Pohon Angsana (*Pterocarpus indicus Willd.*) di Kawasan Ngoro Industri Persada Kecamatan Ngoro Kabupaten Mojokerto (Di Kembangkan Sebagai Sumber Belajar Biologi).
- Runge, Erich dan E.K.U. Gross. Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems. *Physical Review Letters*, Vol. 52 (19 Maret 1984), (12-19). doi:10.1103/PhysRevLett.52.997.
- Sanjaya, Ali Fadhli Indra. 2012. Studi Komputasi Senyawa N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe, N-Indoline-PhOMe sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) menggunakan Density Functional Theory (DFT) dan Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT) dalam Fasa Gas dan Pelarut Toluena.
- Seo, Kang deuk, Myung Jun Lee, Hae Min Song, Hong Seok Kang, Hwan Kyu Kim. Novel D- π -A Sistem based on Zinc Porphyrin Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: Synthesis, Electrochemical, and Photovoltaic Properties. *Dyes and Pigments*, Vol. 94 Issue 1 (Juli 2012), 143-149. doi:10.1016/j.dyepig.2011.12.006.
- Setiadji, S., Atthar Luqman Ivansyah, Bio Insan Akbar. 2015. Studi Komputasi Senyawa Dopamin dan Dopamin-Ti(OH)₂ untuk Aplikasi Sel Surya Tersensitisasi Zat Warna.
- Shah, Rutuja S., Rutuja R. Shah, Rajashri B. Pawar, Pranit P. Gayakar. 2015. UV-Visible Spectroscopy – A Review. *International Journal of Institutional Pharmacy and Life Sciences*. Vol. 05, 490-505.

- Suhartati, Tati. 2017. Dasar-Dasar Spektrofotometri UV-Vis dan Spektrometri Massa Untuk Penentuan Struktur Senyawa Organik. Bandar Lampung: Anugrah Utama Raharja.
- Susanti, D., Maula Nafi, Hariyati Purwaningsih, Rindang Fajarin, George Endri Kusuma. 2014. The Preparation of Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) from TiO_2 and Tamarilli Extract. *Procedia Chemistry* 9, 3-10.
- Wang, X-F., Kitao, O., 2012. Natural Chlorophyll-Related Porphyrins and Clorins for Dye-Sensitized Solar Cells. *Molecules*, Vol. 17, 4484-4497.
- Wulandari, Henni Eka dan Drs. Gontjang Prajitno. 2012. Studi Awal Fabrikasi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Menggunakan Ekstraksi Bunga Sepatu (*Hibiscus Rosa Sinensis L.*) Sebagai Dye Sensitizer Dengan Variasi Lama Absorpsi Dye. Jurusan Fisika FMIPA Institut Teknologi Sepuluh November.

CURRICULUM VITAE

A. Biodata Pribadi

Nama Lengkap : Hidayatullah Putra Hutasoit
Jenis Kelamin : Laki-laki
Tempat, Tanggal Lahir : Jambi, 17 November 1997
Alamat Asal : Jl. Garu Iia No 10 Medan Amplas
Alamat Tinggal : Jl. Bimokurdo No 64f Sapeh
Email : putra.hutasoit@outlook.co.id
No. HP : 082304007469



B. Latar Belakang Pendidikan Formal

| Jenjang | Nama Sekolah | Tahun |
|---------|---------------------|-----------|
| TK | TK IQRA Tuah Sakato | 2002-2003 |
| SD | SDN 112/I Perumnas | 2003-2006 |
| | SDN 2 Kalianda | 2006-2009 |
| | SDN 5 Kelapa Tujuh | 2009 |
| SMP | SMP N 10 Kotabumi | 2009-2010 |
| | SMP N 2 Kota Metro | 2010-2011 |
| | SMP N 2 Kota Medan | 2011-2012 |
| SMA | SMA N 2 Kota Medan | 2012-2015 |
| S1 | UIN Sunan Kalijaga | 2015-2019 |