

**SIFAT FOTOELEKTRIK SIANIDIN SEBAGAI *SENSITIZER*  
PADA *DYE SENSITIZED SOLAR CELL* (DSSC)  
BERDASARKAN PERBEDAAN POSISI GUGUS AKSEPTOR  
ELEKTRON SIANO ASETAT MENGGUNAKAN METODE  
DFT-TDDFT**

**Skripsi**  
**Untuk memenuhi persyaratan sarjana S-1**



**Oleh:**  
**Riyadl Awibi**  
**16630021**

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

**PROGRAM STUDI KIMIA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA  
2022**



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
**SUNAN KALIJAGA**  
YOGYAKARTA

# SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-UINSK-BM-05-03/R0

## 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 wr. wb.*

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

Nama : Riyadi Awibi

NIM : 16630021

Judul Skripsi : Kajian Teoritik Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron Siano Asetat.

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

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

*Wassalamu'alaikum wr. wb.*

Yogyakarta, 30 November 2021

Pembimbing

Sularlin, M.Si.

NIP. 19850611 201503 1 003

## NOTA DINAS KONSULTAN



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/RO

### NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir  
Lamp :-

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

*Assalamu'alaikum wr. wb.*

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

Nama : Riyadl Awibi  
NIM : 16630021  
Judul Skripsi : Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai *Sensitizer* Pada *Dye Sensitized Solar Cell* (Dssc) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron Siano Asetat Menggunakan Metode DFT-TDDFT.-

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

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

*Wassalamu'alaikum wr. wb.*

Yogyakarta, 4 Maret 2022



Konsultan



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



## NOTA DINAS KONSULTAN

 Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga  FM-UINSK-BM-05-03/R0

**NOTA DINAS KONSULTASI**

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir  
Lamp : -

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

*Assalamu'alaikum wr. wb.*

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

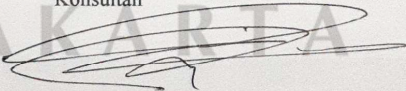
Nama : Riyadl Awibi  
NIM : 16630021  
Judul Skripsi : Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai *Sensitizer* Pada *Dye Sensitized Solar Cell* (Dssc) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron Siano Asetat Menggunakan Metode DFT-TDDFT

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

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

*Wassalamu'alaikum wr. wb.*

Yogyakarta, 4 Maret 2022  
Konsultan



Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.  
NIP. 19900330 201903 1 008

## SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

### SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : Riyadl Awibi  
NIM : 16630021  
Program Studi : Kimia  
Fakultas : Sains dan Teknologi

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi berjudul “**Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai Sensitizer Pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron Siano Asetat Menggunakan Metode DFT-TDDFT**” 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, 16 Januari 2022



Riyadl Awibi  
NIM : 16630021



# 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-556/Un.02/DST/PP.00.9/03/2022

Tugas Akhir dengan judul : Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron Siano Asetat Menggunakan Metode DFT-TDDFT

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : RIYADL AWIBI  
Nomor Induk Mahasiswa : 16630021  
Telah diujikan pada : Senin, 24 Januari 2022  
Nilai ujian Tugas Akhir : A/B

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

## TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang

Sudarlin, M.Si.  
SIGNED

Valid ID: 62217bb1d616c



Penguji I

Didik Krisdiyanto, S.Si., M.Sc  
SIGNED

Valid ID: 6229efdf0759f



Penguji II

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.  
SIGNED

Valid ID: 6218432755f09



Yogyakarta, 24 Januari 2022  
UIN Sunan Kalijaga  
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.  
SIGNED

Valid ID: 622ed19335be1

## **PERSEMBAHAN**

Skripsi ini saya persembahkan  
Untuk semua orang yang sangat peduli kapan saya wisuda,  
Serta  
Untuk semua orang yang berjuang melawan kebodohan.



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
**SUNAN KALIJAGA**  
YOGYAKARTA



## **MOTTO**

**“Risk Comes From Not Knowing What We Are Doing”**

(Warren Buffet)



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
**SUNAN KALIJAGA**  
YOGYAKARTA

## KATA PENGANTAR

Segala puji bagi Allah SWT yang telah memberikan kesempatan sehingga skripsi yang berjudul “*Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai Sensitizer Pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron Siano Asetat Menggunakan Metode DFT-TDDFT*” 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. Dr.Phil. Al Makin, S.Ag., M.A., selaku Rektor Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Bapak Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Ibu Dr. Imelda Fajriati, 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. Seluruh Staf Karyawan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah membantu sehingga penyusunan skripsi ini dapat berjalan dengan lancar.
7. Dr. H. Shofiyullah MZ, S.Ag M.Ag, dan keluarga serta santri-santriwati PPM al-ashfa yang selalu mendampingi selama menempuh studi.

8. Kedua orang tua penyusun, Bapak Sujak dan Ibu Siti Mu'awanah yang selalu memberikan do'a, semangat, nasehat dan dukungan sehingga penyusun dapat menyelesaikan skripsi ini.
9. Keluarga besar Kimia Angkatan 2016 yang telah mendukung dan membantu selama masa studi dan penyusunan skripsi.
10. 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, 11 Maret 2019  
Penyusun,

Riyadl Awibi  
NIM. 16630021

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

## DAFTAR ISI

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR .....	ii
NOTA DINAS KONSULTAN .....	iii
NOTA DINAS KONSULTAN .....	iv
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	v
PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR.....	vi
PERSEMBAHAN .....	vii
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.....	4
C. Rumusan Masalah .....	4
D. Tujuan Penelitian .....	5
E. Manfaat Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN DASAR TEORI.....	6
A. Tinjauan Pustaka .....	6
B. Landasan Teori.....	9
1. DSSC ( <i>Dye Sensitized Solar Cell</i> ).....	9
2. Senyawa <i>dye</i> pada DSSC .....	10
3. Akseptor Elektron .....	13
4. Kimia Komputasi.....	14
C. Hipotesis Penelitian.....	18
BAB III METODE PENELITIAN.....	20
A. Waktu dan Tempat .....	20
B. Alat-alat Penelitian.....	20
C. Cara Kerja Penelitian .....	20
D. Teknik Analisis Data.....	22
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	23



A. Energi HOMO-LUMO .....	23
B. Kerapatan Elektron .....	25
C. Spektra UV-Visible.....	28
D. <i>Light Harvesting Efficiency</i> (LHE) .....	31
E. Konstanta Kopling $ V_{RP} $ .....	32
F. Free Energy Change for Electron Injection ( $\Delta G^{\text{inject}}$ ).....	34
BAB V.....	36
A. Kesimpulan.....	36
B. Saran.....	36
DAFTAR PUSTAKA .....	37
LAMPIRAN.....	41



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Struktur sianidin .....	13
Gambar 2.1. modifikasi sianidin dengan sianoasetat .....	21
Gambar 4.1. Energi HOMO dan LUMO <i>dye</i> sianidin dan sianidin termodifikasi sianoasetat .....	24
Gambar 4.2. Spektrum Absorbansi Sianidin dan Sianidin Termodifikasi Sianoasetat.. .....	29
Gambar 4.7. Grafik nilai LHE sianidin dan sianidin termodifikasi sianoasetat.....	31
Gambar 4.8. Grafik nilai $ V_{RP} $ Sianidin dan Sianidin Termodifikasi Sianoasetat. ....	33
Gambar 4.9. Grafik nilai $\Delta G^{\text{inject}}$ senyawa sianidin dan sianidin termodifikasi sianoasetat.....	35

## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Klasifikasi fungsional pada DFT .....	16
Tabel 4.1. Sebaran elektron pada posisi HOMO-LUMO sianidin dan sianidin termodifikasi sianoasetat .....	26



## ABSTRAK

### SIFAT FOTOELEKTRIK SIANIDIN SEBAGAI *SENSITIZER* PADA *DYE SENSITIZED SOLAR CELL* (DSSC) BERDASARKAN PERBEDAAN POSISI GUGUS AKSEPTOR ELEKTRON SIANO ASETAT MENGGUNAKAN METODE DFT-TDDFT

Oleh :  
Riyadl Awibi

Pembimbing :  
Sudarlin, M.Si,

---

---

Penelitian sifat fotoelektrik sianidin sebagai sensitizer pada *dye sensitized solar cell* (DSSC) berdasarkan perbedaan posisi gugus akseptor elektron sianoasetat telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh perbedaan posisi gugus akseptor elektron sianoasetat terhadap karakteristik sianidin sebagai sensitizer pada DSSC serta posisi terbaik akseptor elektron sianoasetat yang menghasilkan karakteristik fotoelektrik terbaik sianidin sebagai sensitizer pada DSSC dengan menggunakan metode DFT-TDDFT. Gugus akseptor elektron sianoasetat diposisikan pada atom oksigen pada senyawa *dye* sianidin. Parameter elektronik yang digunakan serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO,  $|V_{RP}|$  (*coupling constant*),  $\Delta G^{\text{inject}}$  dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*).

Optimasi geometri senyawa dilakukan dengan metode DFT-B3LYP untuk keadaan dasar dan TD-DFT untuk keadaan tereksitasi pada basis-set 6-31G(d) menggunakan *software NWchem*, serta untuk interpretasi hasil optimasi senyawa menggunakan *software Chemcraft, Chemission dan Spectragryph*. Sianidin-3-O-sianoasetat memiliki nilai energi HOMO-LUMO dan sebaran elektron yang terbaik, untuk parameter spektra dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*) sianidin-5-O-sianoasetat merupakan modifikasi yang paling baik, serta untuk parameter  $V_{RP}$  dan  $\Delta G^{\text{inject}}$  senyawa sianidin-2,3-O-disianoasetat memiliki nilai terbaik. Secara keseluruhan, hasil penelitian menunjukkan bahwa sianidin-3-O-sianoasetat merupakan modifikasi yang menghasilkan sifat fotoelektrik terbaik. Sianidin-3-O-sianoasetat memiliki nilai  $V_{RP}$  yang relatif baik yaitu 0,12 dan nilai  $\Delta G^{\text{inject}}$  sebesar 2,71 eV, diatas nilai minimum 0,20 eV.

---

---

**Kata Kunci** – DSSC, DFT, TD-DFT, sianidin, sianoasetat, HOMO-LUMO, spektra UV, LHE,  $|V_{RP}|$ ,  $\Delta G^{\text{inject}}$



## ABSTRACT

Research on the photoelectric properties of cyanidin as a sensitizer in dye sensitized solar cells (DSSC) based on the different positions of the electron acceptor groups of cyano acetate has been carried out. This study aims to determine the effect of differences in the position of the cyanoacetate electron acceptor group on the characteristics of cyanidin as a sensitizer in DSSC and the best position of cyanoacetate electron acceptor which produces the best photoelectric characteristics of cyanidin as a sensitizer in DSSC using the DFT-TDDFT method. The cyanoacetate electron acceptor group is positioned on the oxygen atom in the cyanidin dye compound. The electronic parameters used are absorption in the UV-Vis region, electron density, HOMO-LUMO energy,  $|V_{RP}|$  (coupling constant),  $\Delta G^{\text{inject}}$  and LHE (Light Harvesting Efficiency).

The geometry optimization of the compound was carried out using the DFT-B3LYP method for the ground state and TD-DFT for the excited state on the base-set 6-31G(d) using the NWchem software, and for the interpretation of the compound optimization results using the Chemcraft, Chemissian and Spectragryph software. Cyanidin-3-O-cyanoacetate has the best HOMO-LUMO energy value and electron distribution, for the spectra and LHE (Light Harvesting Efficiency) parameters cyanidin-5-O-cyanoacetate is the best modification, and for the  $V_{RP}$  and  $\Delta G^{\text{inject}}$  parameters of cyanidin compounds -2,3-O-disyanoacetate has the best value. Overall, the results showed that cyanidin-3-O-cyanoacetate was the modification that produced the best photoelectric properties. Cyanidin-3-O-cyanoacetate has a relatively good VRP value of 0.12 and a  $G_{\text{inject}}$  value of 2.71 eV, above the minimum value of 0.20 eV.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

# BAB I PENDAHULUAN

## A. Latar Belakang

Turunan senyawa antosianin merupakan salah satu golongan senyawa *dye* yang dapat dimanfaatkan sebagai sensitizer pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC). Turunan senyawa antosianin yang dapat digunakan untuk tujuan tersebut antara lain sianidin, pelargonidin, delphinidin, petunidin, dan malvidin (Andersen dan Markham 2006). Sianidin memiliki efisiensi yang lebih baik sebagai *sensitizer* DSSC dibandingkan turunan lainnya. Efisiensi konversi energi matahari menjadi listrik menggunakan *dye* sianidin sebesar 1,25%, pelargonidin sebesar 0,51%, delphinidin sebesar 1,22%, petunidin sebesar 1,18%, dan malvidin sebesar 0,56% (Kimura, 2017). Namun, efisiensi tersebut masih sangat rendah.

Sianidin dapat dimodifikasi dengan penambahan gugus akseptor elektron untuk mendapatkan efisiensi yang lebih baik. Penelitian yang dilakukan M. Nur Mauludin Mahmud (2019) menunjukkan bahwa sianidin dengan gugus akseptor elektron berupa sianoasetat memiliki hasil yang lebih baik berdasarkan parameter lokalisasi elektron, energi HOMO-LUMO, spektra, LHE (*light harvesting energi*), dan panjang ikatan sensitizer dengan semikonduktor, dibanding dengan gugus akseptor elektron lainnya, seperti gugus benzotiazol sianoakrilik, gugus sianovinil, dan gugus sianosinamik. Sianidin dengan modifikasi akseptor elektron sianoasetat memiliki keunggulan pada keadaan LUMO, elektron mengalami pergeseran ke gugus sianoasetat secara merata

yang membuat transfer elektron dari *dye* menuju semikonduktor  $\text{TiO}_2$  menjadi lebih efektif (Mahmud, 2019). Namun, penentuan ikatan antara *dye* sianidin dengan gugus akseptor elektron yang dilakukan tersebut hanya berdasarkan nilai muatan Mulliken yang artinya hanya berdasarkan kecenderungan sebuah atom menarik elektron-elektron yang didasarkan pada perhitungan rata-rata energi ionisasi pertama dan afinitas elektron. Data tersebut kurang untuk dijadikan acuan sebagai posisi sianoasetat dengan sifat fotoelektrik terbaik. Oleh karena itu, penelitian yang mengkaji sifat fotoelektrik yang terjadi pada modifikasi posisi akseptor elektron sianoasetat pada *dye* sianidin perlu dipelajari.

Sianidin memiliki lima gugus hidroksil yang dapat berikatan dengan senyawa lain. Sianoasetat dapat berikatan dengan gugus hidroksil pada sianidin dan membentuk beberapa variasi berdasarkan letak gugus serta sifat fotoelektrik yang berbeda tiap variasinya. Pengaruh variasi posisi suatu senyawa telah diteliti oleh Choufan Sun dkk. (2018) yang meneliti pengaruh posisi gugus siano pada alizarin dan turunannya terhadap proses ESIPT (*excited state intramolecular proton transfer*) menggunakan metode DFT dan TD-DFT. Hasilnya menunjukkan bahwa gugus siano yang berikatan dengan alizarin pada posisi R2 memiliki potensial penghalang paling rendah terhadap proses EISPT. Fakta tersebut menjadi dasar untuk melakukan modifikasi sianidin menggunakan asam sianoasetat sebagai akseptor elektron dengan variasi posisi gugus sianoasetat pada sianidin pada kelima gugus hidroksil ( $-\text{OH}$ ) yaitu O-1, O-2, O-3, O-4, O-5 dan O-2,3 sebagai senyawa *dye* DSSC dengan menggunakan metode DFT-TDDFT.

Metode komputasi DFT/TDDFT (*Density Functional Theory/Time-Dependent Density Functional*) telah sering digunakan dalam berbagai penelitian komputasi, khususnya dalam penelitian terkait dengan DSSC. Penelitian yang menggunakan metode ini salah satunya adalah penelitian yang dilakukan oleh Galapatthi dkk. (2016) tentang modifikasi sianidin untuk mendapatkan serapan yang lebih luas pada daerah *UV-Visible* dengan menambahkan gugus asam *benzothiadiazolylbenzoic* pada salah satu gugus hidroksil pada sianidin dengan basis set B3LYP/6.31G (d). Parameter teoritis yang digunakan dalam penelitian ini antara lain adalah efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semikonduktor ( $V_{RP}$ ), energi HOMO-LUMO,  $\Delta G^{inject}$ , spektra, dan kerapatan elektron. Perbedaan sebaran elektron pada masing-masing modifikasi menjadi dasar perbedaan nilai parameter-parameter tersebut. Parameter tersebut juga pernah digunakan oleh H.P. Hutasoit dan Sudarlin pada tahun 2021 yang mengkaji senyawa turunan *pyropheophorbide a* sebagai *dye sensitized* pada DSSC. Hasilnya menunjukkan bahwa *methyl 5-carbomethoxy-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide a* (3PPhe-a) memiliki karakteristik fotoelektrik yang paling baik dengan HOMO sebesar -4,855 eV dan nilai LUMO sebesar -2,566 eV,  $\Delta G^{inject}$  -2,364. Sementara untuk parameter serapan pada daerah UV-Vis dan kerapatan elektron menunjukkan kesamaan karakter.

Berdasarkan parameter-parameter yang telah digunakan H.P. Hutasoit & Sudarlin (2021), penelitian ini berusaha mengkaji karakteristik fotoelektrik DSSC menggunakan *dye* sianidin yang termodifikasi sianasetat. Penambahan akseptor elektron sianasetat dilakukan dengan variasi posisi pada setiap gugus O pada sianidin.



Sehingga, akan diketahui posisi mana yang akan menghasilkan modifikasi terbaik sebagai *sensitizer* DSSC.

### **B. Batasan Masalah**

1. Senyawa *dye* yang digunakan adalah sianidin yang dimodifikasi menggunakan gugus akseptor elektron sianoasetat pada posisi O-1, O-2, O-3, O-4, O-5, dan O-2,3 sianidin.
2. Parameter yang digunakan adalah kerapatan elektron energi HOMO-LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (LHE),  $\Delta G^{\text{inject}}$ , dan konstanta kopling *dye* pada permukaan semi konduktor ( $V_{RP}$ ).

### **C. Rumusan Masalah**

Rumusan penelitian ini adalah

1. Bagaimana karakteristik fotoelektrik DSSC menggunakan *dye* berupa sianidin termodifikasi sianoasetat pada posisi O-1, O-2, O-3, O-4, O-5, dan O-2,3 berdasarkan parameter kerapatan elektron energi HOMO-LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (LHE),  $\Delta G^{\text{inject}}$ , dan konstanta kopling *dye* pada permukaan semi konduktor ( $V_{RP}$ )?
2. Diposisi manakah gugus akseptor sianoasetat pada modifikasi sianidin yang memberikan hasil fotoelektrik terbaik sebagai sensitizer pada DSSC?

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

Tujuan penelitian ini adalah menentukan karakteristik fotoelektrik DSSC menggunakan *dye* sianidin yang termodifikasi sianoasetat pada posisi O-1, O-2, O-3, O-4, O-5, dan O-2,3 berdasarkan parameter kerapatan elektron energi HOMO-LUMO, spektra, efisiensi penyerapan cahaya (LHE),  $\Delta G^{\text{inject}}$ , dan konstanta kopling *dye* pada permukaan semi konduktor ( $V_{\text{RP}}$ ).

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

Penelitian ini bermanfaat sebagai kajian teoritis dalam pengembangan senyawa *dye* sebagai DSSC (*dye sensitized solar cell*) yang dapat digunakan dalam karakteristik fotoelektrik siano asetat pada sianidin sebagai senyawa *dye* dan mengetahui posisi yang paling efisien dari sianoasetat terhadap sianidin berdasarkan parameter efisiensi penyerapan cahaya (LHE), konstanta kopling *dye* pada permukaan semi konduktor ( $V_{\text{RP}}$ ), energi HOMO-LUMO, spektra, dan kerapatan elektron.

## **BAB V**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **A. Kesimpulan**

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa setiap parameter yang digunakan pada modifikasi variasi posisi memiliki karakter yang berbeda. Jika ditinjau dari parameter energi HOMO-LUMO dan sebaran elektron sianidin-3-O-sianoasetat merupakan modifikasi terbaik. Kemudian, jika ditinjau dari parameter spektra dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*), sianidin-5-O-sianoasetat merupakan modifikasi yang paling baik. Sementara jika ditinjau dari parameter  $V_{RP}$  dan  $\Delta G^{inject}$  adalah senyawa sianidin-2,3-O-disianoasetat. Modifikasi terbaik adalah sianidin-3-O-sianoasetat karena selain memiliki sebaran elektron dan energi HOMO-LUMO terbaik, sianidin-3-O-sianoasetat juga memiliki nilai  $V_{RP}$  yang relatif baik dan nilai  $\Delta G^{inject}$  di atas nilai minimum yang dibutuhkan meskipun bukan yang terbaik. Namun, kelemahan dari senyawa *dye* sianidin-3-O-sianoasetat adalah pada penyerapan sinar matahari yang relatif rendah dibanding modifikasi lain.

#### **B. Saran**

Penelitian selanjutnya dapat melakukan penambahan parameter dalam modifikasi serta penggunaan teori komputasi berupa basis set maupun metode yang lain untuk mendapat detail data yang lebih lengkap. Kemudian perlu dilakukan uji laboratorium secara fisik untuk memperkuat atau membuktikan hasil data yang diperoleh dari *study* teoritis.

## DAFTAR PUSTAKA

- Ainurraziqin, Moh Irfan, dan Pedy Artsanti. t.t. “Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Sianoasetat Pada Sianidin Sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC),” <http://ejournal.uin-suka.ac.id/saintek/IJMC/article/view/1252>.
- Andersen, Øyvind M., dan Kenneth R. Markham, ed. 2006. *Flavonoids: Chemistry, Biochemistry, and Applications*. Boca Raton, FL: CRC, Taylor & Francis.
- Bagheri Novir, Samaneh, dan Seyed Majid Hashemianzadeh. 2015. “Density Functional Theory Study of New Azo Dyes with Different  $\pi$ -Spacers for Dye-Sensitized Solar Cells.” *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 143 (Mei): 20–34. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2015.02.026>.
- Casida, Mark E. 2009. “Time-Dependent Density-Functional Theory for Molecules and Molecular Solids.” *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 914 (1–3): 3–18. <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2009.08.018>.
- Chaiamornnugool, Phrompak, Sarawut Tontapha, Ratchanee Phatchana, Nattawat Ratchapolthavisin, Somdej Kanokmedhakul, Wichien Sang-aroon, dan Vittaya Amornkitbamrung. 2017. “Performance and Stability of Low-Cost Dye-Sensitized Solar Cell Based Crude and Pre-Concentrated Anthocyanins: Combined Experimental and DFT/TDDFT Study.” *Journal of Molecular Structure* 1127 (Januari): 145–55. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.07.086>.
- Cramer, Christopher J. 2004. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. 2nd ed. Chichester, West Sussex, England ; Hoboken, NJ: Wiley.
- Dreuw, Andreas, dan Martin Head-Gordon. 2005. “Single-Reference Ab Initio Methods for the Calculation of Excited States of Large Molecules.” *Chemical Reviews* 105 (11): 4009–37. <https://doi.org/10.1021/cr0505627>.
- Ekanayake, Piyasiri, Muhammad Raziq Rahimi Kooh, N.T.R.N. Kumara, Andery Lim, Mohammad Iskandar Petra, Nyuk Yoong Voo, dan Chee Ming Lim. 2013. “Combined Experimental and DFT–TDDFT Study of Photo-Active Constituents of *Canarium Odontophyllum* for DSSC Application.” *Chemical Physics Letters* 585 (Oktober): 121–27. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2013.08.094>.

- Ferré, Nicolas, Michael Filatov, dan Miquel Huix-Rotllant, ed. 2016. *Density-Functional Methods for Excited States*. Topics in Current Chemistry 368. Cham: Springer.
- Galappaththi, Kalpana, Piyasiri Ekanayake, dan Mohammad Iskandar Petra. 2016. "Computational Study of Modification of Cyanidin as High Efficient Organic Sensitizer for Dye Sensitized Solar Cells," no. 2016: 10.
- Grätzel, Michael. 2003. "Dye-Sensitized Solar Cells." *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* 4 (2): 145–53. [https://doi.org/10.1016/S1389-5567\(03\)00026-1](https://doi.org/10.1016/S1389-5567(03)00026-1).
- Hsu, Chao-Ping. 2009. "The Electronic Couplings in Electron Transfer and Excitation Energy Transfer." *Accounts of Chemical Research* 42 (4): 509–18. <https://doi.org/10.1021/ar800153f>.
- Jensen, Frank. 2007. *Introduction to Computational Chemistry*. 2nd ed. Chichester, England ; Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.
- Kim, Bong-Gi, Kyeongwoon Chung, dan Jinsang Kim. 2013. "Molecular Design Principle of All-Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells." *Chemistry - A European Journal* 19 (17): 5220–30. <https://doi.org/10.1002/chem.201204343>.
- Kumara, N.T.R.N., Andery Lim, Chee Ming Lim, Mohamad Iskandar Petra, dan Piyasiri Ekanayake. 2017. "Recent Progress and Utilization of Natural Pigments in Dye Sensitized Solar Cells: A Review." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 78 (Oktober): 301–17. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.04.075>.
- Lau, Kenneth K.S., dan Masoud Soroush. 2019. "Overview of Dye-Sensitized Solar Cells." Dalam *Dye-Sensitized Solar Cells*, 1–49. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814541-8.00001-X>.
- Marques, M.A.L., dan E.K.U. Gross. 2004. "TIME-DEPENDENT DENSITY FUNCTIONAL THEORY." *Annual Review of Physical Chemistry* 55 (1): 427–55. <https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.55.091602.094449>.
- Obasuyi, Aanuoluwapo Raphael, Daniel Glossman-Mitnik, dan Norma Flores-Holguín. 2019. "Electron Injection in Anthocyanidin and Betalain Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: A DFT Approach." *Journal of Computational Electronics* 18 (2): 396–406. <https://doi.org/10.1007/s10825-019-01331-5>.
- Patil, Dinesh S., Keval K. Sonigara, Manoj M. Jadhav, Kiran C. Avhad, Suryapratap Sharma, Saurabh S. Soni, dan Nagaiyan Sekar. 2018. "Effect of Structural



- Manipulation in Hetero-Tri-Aryl Amine Donor-Based D–A'– $\pi$ –A Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells.” *New Journal of Chemistry* 42 (6): 4361–71. <https://doi.org/10.1039/C7NJ04620K>.
- Prima, E C, B Yulianto, Suyatman, dan H K Dipojono. 2016. “Charge Transfer Dynamics of Highly Efficient Cyanidin-3-O- Glucoside Sensitizer for Dye-Sensitized Solar Cells.” *Journal of Physics: Conference Series* 739 (Agustus): 012031. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/739/1/012031>.
- Rahman, Imam Abdul. 2015. “Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS<sub>2</sub>,” 7.
- Rogers, Donald. 2003. *Computational Chemistry Using the PC*. 3rd ed. Hoboken, N.J: Wiley-Interscience.
- Runge, Erich, dan E. K. U. Gross. 1984. “Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems.” *Physical Review Letters* 52 (12): 997–1000. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.997>.
- Sanchez-Bojorge, Nora-Aydee, Luz-Maria Rodriguez-Valdez, Daniel Glossman-Mitnik, dan Norma Flores-Holguin. 2015. “Theoretical Calculation of the Maximum Absorption Wavelength for Cyanidin Molecules with Several Methodologies.” *Computational and Theoretical Chemistry* 1067 (September): 129–34. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2015.06.002>.
- Sang-aroon, Wichien, Sarawut Tontapha, dan Vittaya Amornkitbamrung. 2019. “Photovoltaic Performance of Natural Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells.” Dalam *Dye-Sensitized Solar Cells*, 203–29. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814541-8.00006-9>.
- Sastrohamidjojo, Hardjono. 2001. 'Spektroskopi.' edisi kedua. Yogyakarta: Liberty Yogyakarta.
- Schaefer, Fred C. 1970. “Nitrile Reactivity.” Dalam *The Cyano Group (1970)*, disunting oleh Zvi Rappoport, 239–305. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/9780470771242.ch6>.
- Shalini, S., R. Balasundaraprabhu, T. Satish Kumar, N. Prabavathy, S. Senthilarasu, dan S. Prasanna. 2016. “Status and Outlook of Sensitizers/Dyes Used in Dye Sensitized Solar Cells (DSSC): A Review: Sensitizers for DSSC.” *International Journal of Energy Research* 40 (10): 1303–20. <https://doi.org/10.1002/er.3538>.

- Sharma, Khushboo, Vinay Sharma, dan S. S. Sharma. 2018. "Dye-Sensitized Solar Cells: Fundamentals and Current Status." *Nanoscale Research Letters* 13 (1): 381. <https://doi.org/10.1186/s11671-018-2760-6>.
- Sharmoukh, Walid, Zeinab M. Hassan, Basant A. Ali, Mohamed M. Elnagar, Rayhan M. Abdo, dan Nageh K. Allam. 2018. "Position of the Anchoring Group Determined the Sensitization Efficiency of Metal-Free D- $\pi$ -A Dyes: Combined Experimental and TD-DFT Insights." *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 367 (Desember): 128–36. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2018.08.034>.
- Sun, Chaofan, Hui Li, Hang Yin, Yuanzuo Li, dan Ying Shi. 2018. "Effects of the Cyano Substitution at Different Positions on the ESIPT Properties of Alizarin: A DFT/TD-DFT Investigation." *Journal of Molecular Liquids* 269 (November): 650–56. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.08.087>.
- Tsai, C. Stan. 2002. *An Introduction to Computational Biochemistry*. New York: J. Wiley.
- Wang, Haidong, Hui Liu, Cuicui Li, Zunyao Wang, dan Guoying Yang. 2009. "DFT Calculation on PBPXs: Their Gas Phase Thermodynamic Function and Implication of Br Substituted Position." *Thermochimica Acta* 487 (1–2): 49–53. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2008.12.030>.
- Wang, Z.-S., Y. Cui, K. Hara, Y. Dan-oh, C. Kasada, dan A. Shinpo. 2007. "A High-Light-Harvesting-Efficiency Coumarin Dye for Stable Dye-Sensitized Solar Cells." *Advanced Materials* 19 (8): 1138–41. <https://doi.org/10.1002/adma.200601020>.
- Young, David C. 2001. *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*. New York: Wiley. <http://www.dawsonera.com/depp/reader/protected/external/AbstractView/S9780471458432>.
- Zhang, Cai-Rong, Li Liu, Jian-Wu Zhe, Neng-Zhi Jin, Yao Ma, Li-Hua Yuan, Mei-Lin Zhang, You-Zhi Wu, Zi-Jiang Liu, dan Hong-Shan Chen. 2013. "The Role of the Conjugate Bridge in Electronic Structures and Related Properties of Tetrahydroquinoline for Dye Sensitized Solar Cells." *International Journal of Molecular Sciences* 14 (3): 5461–81. <https://doi.org/10.3390/ijms14035461>.
- Zhang, Lei, dan Jacqueline M. Cole. 2015. "Anchoring Groups for Dye-Sensitized Solar Cells." *ACS Applied Materials & Interfaces* 7 (6): 3427–55. <https://doi.org/10.1021/am507334m>.