

**PENGARUH POSISI GUGUS AKSEPTOR ELEKTRON ASAM  
SIANO-3-ASETAT PADA  $\gamma$ -MANGOSTIN SEBAGAI  
*SENSITIZER* PADA *DYE-SENSITIZED SOLAR CELL* (DSSC)  
SECARA KOMPUTASI**

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



**Oleh:  
Zulfa Ahmad Nurkholiq  
17106030032**

**STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
PROGRAM STUDI KIMIA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNANKALIJAGA  
YOGYAKARTA  
2023**



### PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-1193/Un.02/DST/PP.00.9/05/2023

Tugas Akhir dengan judul : Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Siano-3-Asetat pada  $\beta$ -Mangostin Sebagai *Sensitizer* pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) Secara Komputasi

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : ZULFA AHMAD NURKHOLIQ  
Nomor Induk Mahasiswa : 17106030032  
Telah diajukan pada : Senin, 17 April 2023  
Nilai ujian Tugas Akhir : A-

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

#### TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Kenna Sidang

Sudartin, M.Si.  
SIGNED

Valid ID: 846201966881



Penguji I

Dodik Kriadyanto, S.Si., M.Sc.  
SIGNED

Valid ID: 8448c4401612a2



Penguji II

Priyagung Dhemi Widakongko, M.Sc.  
SIGNED

Valid ID: 8061a016c2547



Yogyakarta, 17 April 2023  
UIN Sunan Kalijaga  
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Dr. Drs. Hj. Khairul Washid, M.Si.  
SIGNED

Valid ID: 8401318407983

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA



## **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 perbaikanseperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Zulfa Ahmad Nurkholiq  
NIM : 17106030032  
Judul Skripsi : Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Siano-3-Asetat Pada  $\gamma$ -mangostin Sebagai Sensitizer Pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Secara Komputasi

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan KalijagaYogyakarta 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 dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 11 April 2023

Pembimbing

Sudarin, M.Si  
NIP: 198506112015031002



## 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 : Zulfa Ahmad Nurkholiq  
NIM : 17106030032  
Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Siano-3-Asetat pada  $\gamma$ -Mangostin Sebagai Dye pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)

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

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

*Wassalamu 'alaikum wr. wb.*

Yogyakarta, 11 Mei 2023

Konsultan



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



## SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Zulfa Ahmad Nurkholiq  
NIM : 17106030032  
Jurusan : Kimia  
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul "**Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Siano-3-Asetat pada  $\gamma$ -mangostin Sebagai Sensitizer Pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Secara Komputasi**" merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar sarjana di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 11-04-2023



Zulfa Ahmad Nurkholiq  
NIM 17106030032

STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

## ABSTRAK

### Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Siano-3-Asetat pada $\gamma$ -Mangostin Sebagai *Sensitizer* pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) Secara Komputasi

Oleh:

Zulfa Ahmad Nurkholiq

17106030032

Penelitian pengaruh posisi gugus akseptor elektron asam siano-3-asetat pada  $\gamma$ -mangostin sebagai *sensitizer* pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) secara komputasi telah dilakukan dengan variasi pada posisi atom O-1, O-2, O-3 dan O-4. Sifat fotoelektrik diketahui dari parameter energi HOMO-LUMO, serapan daerah UV-Vis,  $|V_{RP}|$ ,  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\Delta G_{\text{reg}}$ ,  $\tau$ , LHE dan FEDAM. Optimasi geometri menggunakan *Orca 4.2.1* dengan basis set 6-31G\* dan interpretasi menggunakan *Avogadro*, *Chemission* dan *GaussSum*. Optimasi keadaan dasar menggunakan metode DFT-B3LYP dan optimasi keadaan tereksitasi menggunakan metode TD-DFT-B3LYP. Hasil penelitian menunjukkan perbedaan sifat fotoelektrik yang mempengaruhi performa DSSC. Posisi-2 memiliki parameter terbaik pada serapan elektron dan sinar UV-Vis dengan serapan 426 nm. Posisi 3 memiliki nilai terbaik pada parameter *excited state lifetime* ( $\tau$ ) dan konstanta kopling ( $|V_{RP}|$ ). Posisi 3 memiliki kelemahan pada nilai LHE. Nilai LHE pada senyawa tanpa modifikasi memiliki nilai terbaik. Berdasarkan parameter kualitatif *Full-Elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM) diperoleh kemampuan asam siano-3-asetat sebagai akseptor elektron lebih baik pada posisi 2.

**Kata Kunci:** DSSC, DFT, TD-DFT, HOMO-LUMO, UV-Vis,  $|V_{RP}|$ ,  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\Delta G_{\text{reg}}$ ,  $\tau$ , LHE, FEDAM,  $\gamma$ -mangostin dan asam siano-3-asetat.

## HALAMAN MOTTO

“Bahwasannya manusia tidak memperoleh  
selain apa yang ia usahakan” (An-Najm : 39)

”Nomor satukan yang wajib  
nomor duakan yang sunah jangan terbalik”



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA

## **HALAMAN PERSEMBAHAN**

Skripsi ini saya persembahkan untuk  
diri saya sendiri dan semua insan yang tetap mau belajar dan  
mengembangkan diri menjadi lebih baik





## Kata Pengantar

Puji serta syukur sedalam-dalamnya penulis haturkan kepada Allah Swt. Tuhan Yang Maha Pengasih, lagi Maha Penyayang atas berkah limpahan nikmat dan karunia-Nya, penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Siano-3-Asetat Pada  $\gamma$ -Mangostin Sebagai *Sentizer* pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) Secara Komputasi.”

Shalawat dan salam semoga senantiasa tetap tercurahkan kepada pemberi syafaat, suri tauladan umat, baginda Nabi Muhammad saw. yang telah menyinari kehidupan manusia dengan cahaya ilmu pengetahuan atas izin Allah Swt.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini tidak terlepas dari bantuan dan dukungan banyak pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan ucapan terimakasih yang tak terhingga dan penghargaan yang setinggi-tingginya kepada:

1. Orang tua tercinta, Bapak Dawud dan Ibu Siti Khalimah, cinta dan kasihnya yang tak terhingga sepanjang masa. Mereka menyertakan nama penulis dalam setiap lantunan do'a serta mendukung setiap langkah penulis.
2. Guru dan *murobbi ruhi allahuyarham* KH. Asyhari Marzuqi. Jika bukan karena semangat keilmuan yang diajarkan beliau tidak mungkin penulis tetap akan melanjutkan ke jenjang kuliah.
3. Bapak Prof. Dr. Phil. Al Makin, MA. selaku Rektor UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
4. Ibu Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
5. Ibu Dr. Imelda Fajriati selaku Ketua Program Studi Kimia, serta Bapak Sudarlin, M.Si. selaku pembimbing skripsi dengan kesabaran dan ketelitiannya dalam membimbing penulis.
6. Bapak dan Ibu Dosen UIN Sunan Kalijaga, khususnya Dosen Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi yang telah mendidik, membimbing, memberikan motivasi, wawasan ilmu pengetahuan dan pengalaman dalam mewarnai kehidupan serta pola pikir penulis.

7. Ilmiyatun Ainul Qolbi selaku tunangan penulis yang selalu mendoakan serta memberi semangat kepada penulis dalam setiap langkah.
8. Dinda Latifah Rahmawati selaku Mentor yang banyak membantu penulis untuk menyelesaikan penelitian ini
9. Asnal dan Darmawan selaku sahabat yang sudah dianggap saudara oleh penulis. Beliau berdua memberikan dukungan dan motivasi kepada penulis.
10. Saudari Qurotun A'yun yang membantu terkait penulisan skripsi penulis.
11. Agus Mafrudi selaku sahabat ngopi penulis yang selalu siap ngopi untuk menyelesaikan skripsi bersama penulis.
12. Sahabat Agi, Citra dan Asnal yang memberi doa, dukungan dan motivasi penulis untuk menyelesaikan penyusunan skripsi.
13. Sahabat Eka, Ria, Karisma, Indri, Salman dan sahabat- sahabat yang memberi semangat kepada penulis agar segera menyelesaikan penyusunan skripsi.
14. Teman-teman Electron kimia Angkatan 2017 yang memberi dukungan dan semangat kepada penulis.
15. Serta seluruh pihak yang telah berjasa kepada penulis yang tidak bisa disebutkan satu persatu.

Semoga Allah membalas kebaikan kalian dengan balasan yang terbaik. Penulis menyadari bahwa masih terdapat banyak kekurangan dan kesalahan dalam skripsi ini. Oleh karena itu, penulis mohon maaf yang sebesar-besarnya atas segala kesalahan dan kekurangan dalam skripsi ini.

Yogyakarta, 15 Mei 2023

Penulis

Zulfa Ahmad Nurkholiq

NIM. 17106030032

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI .....	iii
NOTA DINAS KONSULTASI .....	iv
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN.....	v
ABSTRAK.....	vi
HALAMAN MOTTO .....	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	viii
KATA PENGANTAR .....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR.....	xiii
DAFTAR TABEL.....	xiv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang.....	1
B. Batasan Masalah .....	3
C. Rumusan Masalah.....	4
D. Tujuan Penelitian .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN DASAR TEORI.....	6
A. Tinjauan Pustaka.....	6
B. Landasan Teori.....	10
C. Hipotesis .....	17
BAB III METODE PENELITIAN.....	19
A. Waktu dan Tempat.....	19
B. Alat-alat Penelitian.....	19
C. Cara Kerja Penelitian .....	19
D. Teknik Analisis Data.....	20
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	22
A. Energi HOMO-LUMO dan Spektra UV-Vis.....	22
B. Kerapatan elektron .....	26
C. Full-Elektron Donor-Acceptor Map (FEDAM).....	29
D. Sifat Transfer Muatan .....	30
BAB V KESIMPULAN.....	35

A. Kesimpulan .....	35
B. Saran .....	35
DAFTAR PUSTAKA .....	36
LAMPIRAN.....	41



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 $\gamma$ -mangostin .....	11
Gambar 4.1 Penomoran atom O senyawa $\gamma$ -mangostin dan modifikasi posisi 1...22	
Gambar 4.2 energi HOMO-LUMO.....	23
Gambar 4.3 Spektrum serapan $\gamma$ -mangostin dan modifikasinya.....	24
Gambar 4.4 <i>Full-Elektron Donor-Acceptor Map</i> (FEDAM).....	29





## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Klasifikasi Fungsional DFT.....	12
Tabel 4.1 Kerapatan elektron senyawa $\gamma$ -mangostin dan modifikasinya.....	23
Tabel 4.2 Data Sifat Transfer Muatan.....	27



# BAB I PENDAHULUAN

## A. Latar Belakang

*Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) adalah sel surya generasi ketiga. Sel surya ini menggunakan *dye*/ zat warna sebagai sensitiser (pemeka). *Dye* dapat berasal dari bahan alami atau buatan. *Dye* buatan yang masih digunakan pada saat ini adalah ruthenium. Ruthenium memiliki sifat fotoelektrokimia yang baik dengan efisiensi 11%. Namun, ruthenium tidak ramah lingkungan dan tidak ekonomis (O'Regan & Gratzel, 1991).

*Dye* alami merupakan *dye* yang ramah terhadap lingkungan karena *dye* alami diekstrak dari bagian tumbuhan seperti bunga, buah, daun dan lainnya (Yahya et al., 2021). Contoh *dye* alami yang digunakan sebagai *dye* adalah xanthon. Senyawa ini dapat diekstrak dari kulit manggis (*Garcinia mangosta L*). Ekstrak kulit manggis sebagai *dye* pada DSSC memiliki nilai efisiensi 1.17% (Zhou, et al.,2011). Berdasarkan penelitian tersebut, nilai efisiensi ekstrak kulit manggis masih rendah dibandingkan dengan *dye* sintesis kompleks ruthenium yang memiliki nilai efisiensi 11.1% (Y Chiba, A. et al, 2006).

Efisiensi ekstrak kulit manggis sebagai *dye* pada DSSC dapat ditingkatkan dengan memodifikasi senyawa utamanya (Alagumalai, et al, 2016). Senyawa utama sebagai *dye* dalam ekstrak kulit manggis adalah mangostin yang meliputi  $\alpha$ -mangostin,  $\beta$ -mangostin dan  $\gamma$ -mangostin (Aizat, et al, 2019).  $\gamma$ -mangostin paling mudah teroksidasi melepaskan elektron (Sang-aroon, et al, 2019). Gugus fungsional

$\gamma$ -mangostin dapat dimodifikasi untuk meningkatkan efisiensinya sebagai *dye* pada DSSC

Asam siano-3-asetat memiliki kemampuan sebagai gugus penarik elektron yang kuat. Seperti pada eksperimen yang dilakukan oleh Tzi-Yi Wu dkk (2010) menggunakan asam siano-3-asetat sebagai penarik elektron pada fenotiazin mampu meningkatkan efisiensi dari 3.88% menjadi 5.53%. Pada dobel donor elektron fenotiazin dan *carbazole* dengan rantai oktil memiliki efisiensi 4.76% menggunakan gugus akseptor elektron asam siano-3-asetat (Zhu, et al 2017). Penelitian oleh Mahmud (2016) menggunakan metode komputasi dengan *dye* sianidin dan gugus akseptor elektron asam siano-3-asetat menunjukkan posisi elektron mengalami pergeseran ke gugus sianoasetat memuat transfer elektron dari *dye* ke semikonduktor menjadi efektif. Penelitian tersebut belum melakukan variasi posisi gugus akseptor elektron.

Pengaruh variasi posisi suatu gugus telah dibuktikan oleh Alagumalai et al (2016), dimana variasi posisi gugus akseptor elektron pada *dye squaraine* memiliki efisiensi 9% saat divariasikan dengan gugus dekana yang ada di posisi luar bidang, yang sebelumnya memiliki efisiensi sebesar 7%. Penelitian lain oleh Hart et al., (2012) memvariasikan gugus asam sianoakrilik pada C-3 cicin aromatik dan N terminal pada *dye* fenotiazin menghasilkan efisiensi 3.21% dan 3.88%. Penelitian oleh Haidong Wang dkk., (2009) yang meneliti pengaruh posisi substituen bromin (Br) terhadap senyawa *polybrominated phenoxazines* (PBPX) pada semua posisi berdasarkan jumlah substituen Br (mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, heksa- dan hepta- dengan metode DFT. Parameter yang digunakan antara lain nilai  $\Delta Hf_0$  (entalpi) dan

$\Delta Gf_0$  (energi Gibbs) untuk menentukan kestabilan dari senyawa yang terbentuk. Semakin kecil nilai  $\Delta Hf_0$  dan  $\Delta Gf_0$  maka semakin stabil isomer yang terbentuk. Hasilnya menunjukkan pada isomer mono-BPX posisi yang stabil adalah 1MBPX; pada di-BPX paling stabil 1,9-DBPX; pada tri-BPX paling stabil 1,3,9-TriBPX; pada tetra-BPX paling stabil 1,3,7,9-TBPX; pada penta-BPX paling stabil 1,2,4,7,9-Penta-BPX; pada Hexa-BPX paling stabil 1,2,3,6,8,9-Hexa-BPX; serta pada Hepta-BPX paling stabil 1,2,3,4,7,8,9-Hepta-BPX.

Berdasarkan uraian di atas, variasi posisi asam siano-3-asetat sebagai gugus akseptor elektron pada  $\gamma$ -mangostin perlu dipelajari. Metode penelitian yang digunakan adalah *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TD- DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G\*. 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-Vis* dengan menambahkan gugus asam *benzothiadiazolybenzoic* pada salah satu gugus hidroksil pada sianidin.

Penelitian ini dikaji dengan metode penelitian *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TD- DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G\*. Penelitian ini menggunakan beberapa parameter, yaitu serapan pada daerah *UV-Vis*, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO,  $|V_{RP}|$  (*coupling constant*),  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\tau$  (*excited state lifetime*) dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*), *Full-elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM).

## **B. Batasan Masalah**

Batasan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Senyawa *dye* yang digunakan adalah  $\gamma$ -mangostin yang dimodifikasi dengan gugus akseptor elektron siano-3-asetat pada posisi O-1, O-2, O-3, dan O-4.
2. Parameter yang digunakan adalah serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO,  $|V_{RP}|$  (*coupling constant*),  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\tau$  (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), *Full-elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM).

### C. Rumusan Masalah

Rumusan masalah pada penelitian ini adalah bagaimana perbedaan nilai serapan UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO,  $|V_{RP}|$  (*coupling constant*),  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\tau$  (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), dan *Full-elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM) *dye*  $\gamma$ -mangostin dengan variasi posisi asam siano-3-asetat pada atom O1, O2, O3 dan O4?

### D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah menentukan dan menganalisis perbedaan serapan UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO,  $|V_{RP}|$  (*coupling constant*),  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\tau$  (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), *Full-elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM) *dye*  $\gamma$ -mangostin dengan variasi posisi asam siano-3-asetat pada atom O1, O2, O3 dan O4

### 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 sianoasetat pada  $\gamma$ -mangostin



sebagai senyawa *dye* dan mengetahui posisi yang paling efisien dari sianoasetat terhadap  $\gamma$ -mangostin berdasarkan parameter UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO,  $|VRP|$  (*coupling constant*),  $\Delta G^{\text{inject}}$ ,  $\tau$  (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*, dan *Full-elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM).



## **BAB V**

### **KESIMPULAN**

#### **A. Kesimpulan**

Berdasarkan hasil penelitian yang telah didapatkan dapat disimpulkan bahwa posisi-2 memiliki parameter terbaik pada sebaran elektron dan sinar UV-Vis dengan serapan 426 nm. Untuk parameter *excited state lifetime* ( $\tau$ ) dan konstanta kopling ( $|V_{RP}|$ ), posisi 3 memiliki nilai terbaik. Posisi 3 memiliki kelemahan pada nilai LHE. Nilai LHE pada senyawa tanpa modifikasi memiliki nilai terbaik. Jika berdasarkan parameter kualitatif *Full-Elektron Donor-Acceptor Map* (FEDAM) diperoleh kemampuan asam siano-3-asetat sebagai akseptor elektron lebih baik pada posisi 2.

#### **B. Saran**

Penelitian selanjutnya dapat melakukan penambahan semikonduktor  $TiO_2$  pada senyawa  $\gamma$ -mangostin dan modifikasinya agar diketahui lebih baik lagi modifikasi pada posisi mana yang memberikan performa terbaik dalam sistem DSSC. Perlu dilakukan uji laboratorium secara praktik untuk memperkuat atau membuktikan hasil data yang didapatkan dari kajian teoritis.

## DAFTAR PUSTAKA

- Ainurraziqin, M., Sudarlin, S., & Artsani, P. (2018). "Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Sianoasetat pada Sianidin sebagai Senyawa Dye Sel Surya Tersensitasi (DSSC). *Indones. J. Mater. Chem*, 1(1).
- Aisha, A. (2012). Quantification of  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -mangostin in *Garcinia mangostana* fruit rind extracts by a reverse phase high performance liquid chromatography. *Medical Plants Research*, 4526-4534.
- Aizat, W., Hashim, F., & jaafar, S. (2019). Valorization of mangosteen, "The Queen of Fruits," and new advances in postharvest and in food and engineering applications: A review. 20(61-70).
- Aizat, W., Jamil, I., Ahmad-Hashim, F., & Noor, N. (january 2019). Recent updates on metabolite composition and medicinal benefits of mangosteen plant. *PeerJ*, 6324.
- Alagumalai, A., & al, e. (2016). Effect of Out-of-Plane Alkyl Group's Position in Dye-Sensitized Solar Cell Efficiency : A Structure-Property Relationship Utilizing Indoline-Based Unsymmetrical Squaraine Dyes. 51(8), 2016.
- Bagheri Novir, S., & Hasemianzadeh, S. M. (2015). Density functional theory study of new azo dyes with different p-spacers for dye-sensitized solar cells. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* , 20-34.
- Britel, O., & et al. (2022). Theoretical design of new carbazole based organic dyes for DSSCs applications. A DFT/TD-DFT insight. 429.
- Casida, M. (2009). Time-Dependent Density-Functional Theory for Molecules and Molecular Solids. *Journal of Molecular Structure : THEOCHEMP* , 914(1-3), 3-18.
- Dreuw, A., & Martin Head-Gordon. (2005). Single-References Ab Initio Methods for the Calculation of Exited States of Large Molecules. *Chemical Reviews*, 105(11).
- Ekanayake, P., Kooh, M., Kumara, N., Lim, A., Petra, M., Yoong, V., & Ming, L. (2013). Combined Experimental and DFT-TDDFT Study of Photoactive Constituents of *Canarium Odontophyllum* dor DSSC Application. *Elsevier. Chemical Physics Letters*, 36, 2484-2488.
- Galano, A. (2016). A first principles investigation on the electron donor ability of synthetic melatonin derivatives: implications for their antioxidant activity. *Springer*, 2.
- Gratzel, & Michael. (2003). Dye-sensitized solar cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology C*, 45-153.

- Hart, A. S., K.C, C. B., Subbaiyan, N. K., Karr, P. A., & D'Souza, F. (2012). Phenithiazine-Sensitized Organic Solar Cells: Effect of Dye Anchor Group Positioning on the Cell Performance. ACS Publications.
- Hutasoit, H., & Sudarlin. (2021). Pyropheophorbide-a derivatives as a dye compound for Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC): Theoretical investigation. *Journal of Physics: Conference Series* .
- Jensen, F. (2007). *Introduction to Computational Chemistry* (2nd uppl.). Chichester, England; Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.
- Khuzairifah, S. (2014). *Karakteristik Absorpsi Ekstrak Krokot (Portulaca Oleracea L.) sebagai Sensitizer Alami untuk Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)*. Yogyakarta: Program Studi Kimia.
- Kim, B.-G., Kyeongwoon Chung, & Jisang Kim. (2013). Molecular Design Principle of All-Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *Chemistry - A European Journal*(19(17)).
- Kirega, P., Mkoma, S. L., Mlowe, S., Msambwa, Y., Kiruri, L. W., Jacob, F. R., . . . Deogratias, G. (2022). Influence of heteroatoms on the optoelectronic properties of triphenylamine-based dyes for DSSCs application: A computational approach. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1210.
- Kumara, M., & Prajitno, G. (2012). Studi Awal Fabrikasi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) dengan Menggunakan Ekstraksi Daun Bayam (Amaranthus Hybridus L.) sebagai Dye Sensitizer dengan Variasi Jarak Sumber Cahaya pada DSSC. *Jurnal Ilmiah. Institut Teknologi Sepuluh Nopember*.
- Kumara, N., Andriy Lim, Chee Ming Lim, Mohammad Iskandar Petra, & Piyasiri Ekanayake. (2017). Recent Progress and Utilization of Natural Pigments in Dye Sensitized Solar Cells: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* , 301(17).
- Lau, K., & Masoud, s. (2019). Overview of Dye-Sensitized Solar. 1-49.
- Law, M. (2005). *Nanowire Dye-Sensitized Solar Cells*.
- Lee, J.-J., Ahammad, A., Lee, J., Rahman, M., Nath, N., & Sarker, S. (2011). *Metal Oxides and Their Composites for The Photoelectrode of Dye Sensitized Solar Cells*. INTACH Open Access Publisher.
- Liu, S., Jiao, Y., Ding, Y., Fan, X., Song, J., Mi, B., & Gao, Z. (2020). Dyes and Pigments Position Engineering of Cyanoacrylic-Acid Anchoring Group in A Dye For DSSC Applications. *180(April)*, 1-11. Hämtat från <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2020.108470>
- Maiangree, W., Lowpa, S., Towannang, M., Rutphonsan, P., Tangtrakarn, A., Pimanpang, S., . . . Amornkitbamrung, V. (2015). A dye sensitized solar cell using natural counter electrode and natural dye derived from mangosteen peel waste. *Scientific Repost*, 10.

- Marques, M., & Gross, E. (2004). TIME DEPENDENT DENSITY FUNCTIONAL THEORY. *Annual Review of Physical Chemistry*, 55(1).
- Maulina, A., Hardeli, & Bahrizal. (2014). Preparasi dye sensitized solar cell menggunakan ekstrak antosianin kulit buah manggis (*Garcinia mangostana* L.). *Jurnal Sainstek*, 6(2), 158-167.
- Mishra, A., Fischer, M., & Bauerle, P. (2009). Metal-free organic dyes for dye-sensitized solar cells: From structure: Property relationships to design rules. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(14), 2474-2499.
- O'Regan, R., & Gratzel, M. (1991). A low-cost, high-efficiency, solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO<sub>2</sub> films. *Nature*, 353, 787-740.
- Patil, D., Keval K, Sonigara, M., Jadhav, K., Avhad, S., Sharma, S., & Nagaiyan Sekar. (2018). Effect of Structural Manipulation in Hetero-Tri-Aryl Amine Donor-Base-D-A'-phi-A Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells. *New Journal of Chemistry*, 61-71.
- Petrisitsch, K. (2000). *Organic Solar Cell Architectures*. Austria: Cambridge and Graz University.
- Pujiarti, H. (2014). *Kajian Karakteristik Fotovoltaik dan Impedansi dari Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) dengan Gel Elektrolit*. Bandung: Departemen Fisika. Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam. Institut Teknologi Bandung.
- Putri, I. P. (2015). *EFFECTIVITY OF XANTHONE OF MANGOSTEEN. J MAJORITY* (Vol. 4).
- Qian, X., & et al. (2015). Triazatruxene-based organic dyes containing a rhodanine-3-acetic acid acceptor for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 113, 737-742.
- Rahman, I. (2015). *Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS<sub>2</sub>*. Bandung: Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung.
- Rogers, D. (2003). *Computational Chemistry Using the PC* (3rd ed uppl.). Hoboken, N.J: Wiley-Interscience.
- Rondonuwu, F., Saputra, F., & Sutresno, A. (2013). Pemanfaatan Ekstrak Antosianin Kol Merah (*Brassica Oleracea* Var) Sebagai Dye Sensitized Dalam Pembuatan Prototipe Solar Cell (Dssc).
- Sanchez-Bojorge, Nora-Aydee, Luz-Maria, Rodriguez-Valdez, Daniel GlossmanMitnik, & Norma Flores-Holguin. (2015). Theoretical Calculation of the Maximum Absorption Wavelength for Cyanidin Molecules with Several Methodologies. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1067(129-34).



- Sang-aroon, W., Tontapha, S., & Amornkitbamrung, V. (2019). Photovoltaic Performance of Natural Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: A Combined Experimental and Theoretical Study. *Computational and Theoretical Chemistry*(203-229).
- Sarikavak, K., Kurtay, G., Sevin, F., & Gullu, M. (2021). Molecular engineering of thienothiophene or dithienopyrrole-based phi-spacers for dye-sensitized solar cells (DSSCs) with D-phi-A architecture: A DFT/TD-DFT study. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1201.
- Sastrohamidjojo, H. (2001). *Spektroskopi* (kedua uppl.). Yogyakarta: Liberty Yogyakarta.
- Schaefer, F. (1970). Nitrile Reactivity. Chichester UK: John Wiley & Sons Ltd. Hämtat från <https://doi.org/10.1002/9780470771242.ch6>
- Shalini, S., R. Balasundaraprabhu, T., Satish Kumar, N., Prabavathy, S., Senthilarasu, & S., P. (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).
- Sharmoukh, W. Z., Hassan, B., Ali, M., Elnagar, R., Abdo, & 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*.
- Sudarlin. (2019). MODIFIKASI TEORITIK SIANIDIN SEBAGAI SENSITISER PADA DYE SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC) MENGGUNAKAN GUGUS PENARIK ELEKTRON ASAM RODANINASETAT. *JKPK (Jurnal Kimia Dan Pendidikan Kimia)*, 4, 40.
- Sudarlin, & Rahmawati, D. L. (2021). Theoretical Modification of  $\gamma$ -Mangosteen as Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Using Rhodanine-3-acetic Acid as Electron Withdrawing Group. *ICCHSE* (s. 4). Yogyakarta: Chemistry Departement of UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
- Wang, H., Hui Liu, Cuicui LI, Zunyao Wang, & Guoying Yang. (2009). DFT Calculation on PBPXs: Their Gas Phase Thermodynamic Function and Implication of Br Substituted Position. *Thermochimica Acta*, 487, 49-53. Hämtat från <https://doi.org/10.1016/j.tca.2008.12.030>
- Wang, Z.-S., Cui, Y., Hara, K., Dan-oh, Y., Kasada, C., & Shinpo, A. (2007). A High-Light-Harvesting-Efficiency Coumarin Dye for Stable Dye-Sensitized Solar Cells. *19*(8).
- Wu, T.-Y., Tsao, M.-H., Chen, F.-L., Su, S.-G., Chang, C.-W., Wang, H.-P., . . . Sun, I.-W. (2010). Synthesis and Characterization of Organic Dyes Containing Various Donors and Acceptors. *International Journal of Molecular Sciences*, 350.

- Y Chiba, A., Islam, Y., Watanabe, R., Komiya, N., & Koide, L. Y. (2006). Dye-sensitized solar cells with conversion efficiency of 11.1%. *J.Appl. Phys*, L638-L640.
- Y. T. Male., I. S. (2015). Studi Komputasi Zat Warna (Dyes) Alami seagai Material Aktif pada Sel Surya Organik Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (Density Functional Theory, Dft). *Ind. J. Chem*, 2, 205-212.
- Young, D. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*. New York: Wiley.
- Zhang, L., & Jacqueline M. Cole. (2015). Anchoring Groups for Dye-Sensitized Solar Cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 7(6).
- Zhou, H., Wu, L., Gao, Y., & Ma, T. (2011). Dye-Sensitized solar cells using 20 natural dyes as sensitizers. *219*(2-3), 188-194.
- Zhu, B.-y., Wu, L., Ye, Q., Gao, J.-r., & Han, L. (2017). Asymmetric double donor-acceptor dyes based on phenothiazine and carbazole donors for dye-sensitized solar cells. *ELSEVIER*.



STATE ISLAMIC UNIVERSITY  
SUNAN KALIJAGA  
YOGYAKARTA