

**STUDI KOMPUTASI SIFAT FOTOELEKTRIK TERNATIN
TERMODIFIKASI GUGUS ASAM SIANO ASETAT DAN ASAM
RODANIN ASETAT SEBAGAI *DYE* PADA *DYE-SENSITIZED*
SOLAR CELL (DSSC)**

**Skripsi
Untuk Memenuhi Sebagian
Persyaratan Mencapai S-1**



**Oleh:
Arif Rizqillah
19106030049**

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2023**

PENGESAHAN SKRIPSI ATAU 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-2204/Un.02/DST/PP.00.9/08/2023

Tugas Akhir dengan judul : Studi Komputasi Sifat Fotoelektrik Ternatin Termodifikasi Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodamin Asetat Sebagai Dye Pada Dye Sensitized Solar Cell

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : ARIF RIZQILLAH
Nomor Induk Mahasiswa : 19106030049
Telah ditujikan pada : Rabu, 02 Agustus 2023
Nilai ujian Tugas Akhir : A-

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

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketan Solang

Suhartin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 968390261



Penguji I

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 66c5bc598247



Penguji II

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

Valid ID: 64-5c3077376



Yogyakarta, 02 Agustus 2023
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Prof. Dr. Dra. Hj. Kusrol Warliati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 64011608267

NOTA DINAS PEMBIMBINGAN I



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 : Arif Rizqillah
NIM : 19106030049
Judul Skripsi : Studi Komputasi Sifat Fotoelektrik Ternatin Termodifikasi Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodanin Asetat 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, 21 Agustus 2023

Konsultan

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA


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

NOTA DINAS PEMBIMBINGAN II



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 : Arif Rizqillah

NIM : 19106030049

Judul Skripsi : Studi Komputasi Sifat Fotoelektrik Ternatin Termodifikasi Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodanin Asetat 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, 21 Agustus 2023

Konsultan

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA


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

SURAT PERSETUJUAN TUGAS 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 : Arif Rizqillah

NIM : 19106030049

Judul Skripsi : Studi Komputasi Sifat Fotoelektrik Ternatin Termodifikasi Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodanin Asetat Sebagai Dye Pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)

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 mengharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 24 Juli 2023

Pembimbing

Sudarlin, M.Si.

NIP: 19850611 201503 1 002

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Arif Rizqillah
NIM : 19106030049
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul "**Studi Komputasi Sifat Fotoelektrik Ternatin Termodifikasi Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodanin Asetat Sebagai Dye Pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)**" merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjana 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, 21 Agustus 2023



Arif Rizqillah
NIM 19106030049

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN MOTTO

وما اللذة إلا بعد التعب

“Tidak ada kenikmatan kecuali setelah kepayahan”.

(Anonim)

“Asak Kawa Ge Pacak”

(Anonim”

“Hidup adalah skenario dari sang ilahi yang harus diperjuangkan”

(Anonim)

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ، أَلْحَمْدُ لِلَّهِ رَبِّ الْعَالَمِينَ وَالصَّلَاةُ وَالسَّلَامُ عَلَى أَشْرَفِ الْأَنْبِيَاءِ وَالْمُرْسَلِينَ سَيِّدِنَا
وَمَوْلَانَا مُحَمَّدٍ وَعَلَى آلِهِ وَصَحْبِهِ أَجْمَعِينَ، أَمَّا بَعْدُ

Puji syukur senantiasa terucapkan kepada Allah Swt. atas nikmatnya sehingga skripsi yang berjudul “*Studi Komputasi Sifat Fotoelektrik Ternatin Termodifikasi Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodanin Asetat Sebagai Dye Pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)*” dapat diselesaikan guna memperoleh gelar Sarjana Kimia. Teriring lantunan sholawat kepada Rasulullah Saw. Semoga dapat meneladani akhlak mulia dari beliau.

Penulis mengucapkan terima kasih atas ide-ide kreatif, saran, kritik, dan semangat dari seluruh pihak, hingga skripsi ini selesai ditulis. Terkhusus ucapan-ucapan terima kasih kepada:

1. Ibu Dr. Hj. Khurul Wardati, M.Si. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta beserta jajarannya.
2. Ibu Dr. Imelda Fajriyati, M.Si. selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga beserta jajaran staf dan dosen-dosen Program Studi Kimia.
3. Bapak Sudarlin, M.Si. selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang telah berkenan memberikan bimbingan, motivasi, dan pengarahan terhadap penulis dalam melalui masa studi hingga skripsi ini selesai disusun.
4. Ibu Eliya dan Bapak Busri serta segenap keluarga di Bangka yang telah berkenan memberi doa restu selama menuntut ilmu hingga terselesaikannya penulisan skripsi ini.
5. Ahsani, Rifkhi, Nadasyifa, Desi serta teman-teman “Ekuivalen 19” Kimia angkatan 2019 dan juga seluruh keluarga kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta atas bantuan dan dukungan hingga terselesaikannya penulisan skripsi ini.
6. Mas Zulfah dan Mbak Dinda atas bantuannya dalam melakukan penelitian

7. Rekan-rekan Organisasi Korp Sirius, PMII Rayon Aufklarung, HM-PS Kimia, DEMA FST, dan juga ISBA Yogyakarta atas ruang untuk memperoleh inspirasi dan pengalaman yang berharga.
8. Seluruh pihak yang telah turut serta membantu penyelesaian skripsi ini tanpa terkecuali.

Kesempurnaan hanyalah milik sang *khaliq* semata. Oleh karena itu, penulis membuka pintu selebar-lebarnya untuk kritik dan saran. Semoga ide-ide yang tertulis dalam skripsi ini dapat turut serta memberi sumbangsih terhadap khazanah ilmu pengetahuan terkhusus dalam bidang ilmu kimia.

Yogyakarta, 21 Agustus 2023

Penulis



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
PENGESAHAN SKRIPSI ATAU TUGAS AKHIR.....	ii
NOTA DINAS PEMBIMBINGAN I.....	iii
NOTA DINAS PEMBIMBINGAN II.....	iv
SURAT PERSETUJUAN TUGAS SKRIPSI/TUGAS AKHIR.....	v
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	vi
HALAMAN MOTTO.....	vii
KATA PENGANTAR.....	viii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR GAMBAR.....	xii
DAFTAR TABEL.....	xiii
ABSTRAK.....	xiv
ABSTRACT.....	xv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang Masalah.....	1
B. Batasan Masalah.....	4
C. Rumusan Masalah.....	4
D. Tujuan Penelitian.....	5
E. Manfaat Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI.....	6
A. Tinjauan Pustaka.....	6
B. Landasan Teori.....	8
1. <i>Dye-Sensitized Solar Cell</i> (DSSC).....	8
2. Ternatin.....	9
3. Gugus Asetat Sebagai Gugus Penarik Elektron.....	9
4. Metode Komputasi.....	10
5. <i>Density Functional Theory</i> (DFT) dan <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TD-DFT).....	11
6. Basis Set.....	14
C. Hipotesis.....	15
BAB III METODE PENELITIAN.....	16

A. Waktu dan Tempat Penelitian	16
B. Alat-alat Penelitian.....	16
C. Cara Kerja	16
1. Menggambar molekul menggunakan <i>Chem3D Pro12.0</i>	16
2. <i>Auto Optimization</i> molekul menggunakan aplikasi <i>Avogadro</i>	21
3. Optimasi geometri dan penentuan sifat elektronik molekul.....	21
4. Penentuan Parameter	21
BAB IV PEMBAHASAN.....	23
A. Energi HOMO-LUMO.....	23
B. Kerapatan Elektron.....	25
C. Spektra UV-Vis.....	27
D. <i>Full Electron-Donor Acceptor Map</i> (FEDAM).....	28
E. Sifat Transfer Muatan	29
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	33
A. Kesimpulan	33
B. Saran.....	33
DAFTAR PUSTAKA	34
LAMPIRAN.....	39
CURICULUM VITAE.....	44

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Mekanisme Kerja dari <i>Dye Sensitized Solar Cell</i>	8
Gambar 2.2 Senyawa Ternatin.....	9
Gambar 2.3 Gugus Asam Siano Asetat dan Asam Rodanin-3-Asetat	10
Gambar 3.1 Senyawa Ternatin.....	16
Gambar 3.2 Senyawa Ternatin + Asam Siano Asetat posisi 1 (TSA 1)	17
Gambar 3.3 Mekanisme Reaksi Senyawa Ternatin + Asam Siano Asetat posisi 1 (TSA 1).....	17
Gambar 3.4 Senyawa Ternatin + Asam Siano Asetat posisi 2 (TSA 2)	18
Gambar 3.5 Mekanisme Reaksi Senyawa Ternatin + Asam Siano Asetat posisi 2 (TSA 2).....	18
Gambar 3.6 Senyawa Ternatin + Asam Rodanin Asetat posisi 1 (TRA 1).....	19
Gambar 3.7 Mekanisme Reaksi Senyawa Ternatin + Asam Rodanin Asetat posisi 1 (TRA 1)	19
Gambar 3.8 Senyawa Ternatin + Asam Rodanin Asetat posisi 2 (TRA 2).....	20
Gambar 3.9 Mekanisme Reaksi Senyawa Ternatin + Asam Rodanin Asetat posisi 2 (TRA 2)	20
Gambar 4.1 Molekul Ternatin Teroptimasi	23
Gambar 4.2 Energi HOMO-LUMO Senyawa Ternatin dan Modifikasinya.....	24
Gambar 4.3 Panjang Gelombang Senyawa Ternatin dan Modifikasinya	27
Gambar 4.4 Grafik Full Electron-Donor Acceptor Map Senyawa Ternatin dan Modifikasinya.....	28

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Sebaran Elektron Senyawa Ternatin dan Modifikasinya.....	25
Tabel 4.2 Sifat Transfer Muatan Senyawa Ternatin dan Modifikasinya	29



ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI SIFAT FOTOELEKTRIK TERNATIN TERMODIFIKASI GUGUS ASAM SIANO ASETAT DAN ASAM RODANIN ASETAT SEBAGAI *DYE* PADA *DYE-SENSITIZED SOLAR CELL* (DSSC)

Oleh:

Arif Rizqillah
19106030049

Penelitian secara komputasi mengenai penambahan gugus akseptor elektron asam siano asetat dan asam rodanin asetat pada senyawa ternatin sebagai *dye* pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) telah dilakukan. Gugus akseptor elektron asam siano asetat dan asam rodanin asetat diletakkan pada gugus hidroksi atom O1 dan O2 ternatin (TSA 1, TSA 2, TRA 1, dan TRA 2). Parameter yang digunakan pada penelitian ini ialah energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan daerah UV-Vis, $|VRP|$, ΔG_{inject} , LHE, dan τ . Metode yang digunakan pada penelitian ini ialah metode DFT-B3LYP untuk menghitung keadaan dasar dan metode TDDFT-B3LYP untuk menghitung keadaan tereksitasi dengan basis set 6-311G*. Ternatin, TSA 1, TSA 2, TRA 1, dan TRA 2 telah mencukupi persyaratan sebagai *dye* pada DSSC. Senyawa yang paling baik jika dilihat dari semua parameter (HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan daerah UV-Vis, $|VRP|$, ΔG_{inject} , LHE, τ dan FEDAM) ialah TRA2 .

Kata Kunci: *DSSC, DFT, TDDFT, Ternatin, Asam Rodanin Asetat, Asam Siano Asetat, TSA 1, TSA 2, TRA 1, TRA 2, HOMO-LUMO, UV-Vis, |VRP|, ΔG_{inject} , LHE, τ , FEDAM*

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF THE PHOTOELECTRIC PROPERTIES OF MODIFIED TERNATINE OF CYANO ACETIC ACID AND RODANIN ACETIC ACID AS DYE IN DYE-SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC)

By:

Arif Rizqillah
19106030049

Computational research on the addition of electron acceptor groups of cyanoacetic acid and rhodamine acetate acid to ternatine compounds as dyes in Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC) has been carried out. The electron acceptor groups of cyanoacetic acid and rhodamine acetate acid are placed on the hydroxy groups of ternatine O1 and O2 atoms (TSA 1, TSA 2, TRA 1, and TRA 2). The parameters used in this study are HOMO-LUMO energy, electron density, UV-Vis absorption, $|VRP|$, ΔG_{inject} , LHE, and τ . The method used in this study is the DFT-B3LYP method to calculate the ground state and the TDDFT-B3LYP method to calculate the excited state with a 6-311G* basis set. Ternatin, TSA 1, TSA 2, TRA 1, and TRA 2 have fulfilled the requirements as dyes for DSSC. The best compound in terms of all parameters (HOMO-LUMO, electron density, UV-Vis absorption, $|VRP|$, ΔG_{inject} , LHE, τ and FEDAM) is TRA2.

Kata Kunci: *DSSC, DFT, TDDFT, Ternatin, rhodamine acetate, cyanoacetic acid, TSA 1, TSA 2, TRA 1, TRA 2, HOMO-LUMO, UV-Vis, $|VRP|$, ΔG_{inject} , LHE, τ , FEDAM*

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) merupakan salah satu energi alternatif yang telah banyak dikembangkan. Hal itu dikarenakan dalam proses pembuatannya menggunakan bahan organik yang ramah lingkungan dan tidak membutuhkan biaya yang mahal (Bendall, et al., 2013). *Dye-sensitized Solar Cell* merupakan energi alternatif yang memanfaatkan energi matahari dan dikonversikan menjadi listrik. *Dye-sensitized solar cell* pertama kali dikembangkan oleh O'regan dan Gratzel pada tahun 1991 (Putra, 2022).

Dye-Sensitized Solar Cell tersusun atas elektroda kerja, semikonduktor, *dye*, dan elektroda lawan. Salah satu komponen yang paling penting dalam DSSC ialah *dye*. *Dye* berfungsi sebagai penyerap energi sinar matahari. Pada saat ini, *dye* yang mempunyai efisiensi paling tinggi ialah kompleks ruthenium sebesar 9,2% (Prayogo, et al., 2014). Akan tetapi, kekurangan *dye* kompleks ruthenium ialah tidak ramah lingkungan dan juga sangat sukar untuk disintesis (Andari, 2017).

Oleh karena itu, banyak ilmuwan mencoba untuk mencari *dye* alternatif yang lebih ramah lingkungan dibandingkan kompleks ruthenium. Salah satu alternatif pengganti *dye* kompleks ruthenium ialah zat warna dari tumbuhan (Pratiwi, 2016). Seperti halnya penelitian yang telah dilakukan oleh Nirmalasari, dkk (2022) yang memanfaatkan kandungan zat warna dari kulit manggis sebagai sensitizer dengan efisiensi sebesar 0,0190%. Penelitian terkait pengembangan *dye* dari zat warna tumbuhan juga pernah dilakukan oleh (Adu, et al., 2022) yang

memanfaatkan zat warna dari kulit bawang merah dengan efisiensi sebesar 0,0491%.

Tumbuhan yang saat ini banyak digunakan sebagai *dye* ialah tumbuhan yang mengandung zat warna turunan dari antosianin. Hal tersebut dikarenakan antosianin mempunyai gugus karbonil dan hidroksil yang dapat terikat pada permukaan semikonduktor TiO₂ (Sova, et al., 2021). Beberapa zat warna turunan antosianin yang pernah dijadikan sebagai *dye* pada *dye-sensitized solar cell* diantaranya, sianidin, peonidin, pelargonodin, delphinidin, petunidin, dan malvidin (Andersen, et al., 2006).

Salah satu tumbuhan yang mengandung zat warna turunan dari antosianin ialah bunga telang. Bunga telang mempunyai zat warna yang bernama khusus yakni ternatin (Karimah, et al., 2019). Pemanfaatan bunga telang sebagai DSSC telah diteliti oleh Azwar Hayat, dkk (2019) yang menghasilkan efisiensi sebesar 0.182%. Selain itu, Ludin, dkk (2019) menyebutkan bahwa DSSC yang menggunakan *dye* dari bunga telang menghasilkan efisiensi sebesar 0,13%. Efisiensi tersebut masih sangat kecil jika dibandingkan dengan *dye* sintesis yang mempunyai efisiensi sebesar 9,2%. Oleh karena itu, perlunya dilakukan modifikasi senyawa agar menghasilkan efisiensi yang lebih baik.

Penelitian terkait modifikasi struktur zat warna pernah dilakukan oleh M. Nur Mauludin Mahmud (2019) yang memanfaatkan beberapa senyawa gugus penarik elektron dengan menggunakan metode komputasi DFT/TD-DFT. Sianidin termodifikasi gugus penarik elektron siano asetat mempunyai efisiensi yang lebih baik daripada sianidin termodifikasi gugus benzotiadiazol sianoakrilik, sianovinil,

dan sianosinamik. Selain itu, modifikasi senyawa menggunakan gugus akseptor elektron juga pernah dilakukan oleh Pei, dkk (2009) dengan menambahkan gugus asam rodanin asetat pada senyawa *triphenylamine*. Hasilnya menunjukkan bahwa *triphenylamine* yang ditambahkan gugus akseptor rodanin asetat memiliki efisiensi sebesar 6,27%.

Metode DFT dan TD-DFT seringkali digunakan dalam penelitian terkait komputasi. Salah satu penelitian yang menggunakan metode DFT/TD-DFT ialah (Sudarlin, 2019) yang menambahkan gugus asam rodanin asetat pada senyawa sianidin dengan basis set 6-311G*. Penelitian lainnya yang memanfaatkan metode DFT/TD-DFT ialah penelitian yang dilakukan oleh (Awibi, 2021) tentang modifikasi sianidin menggunakan gugus penarik elektron asam siano asetat dengan variasi perbedaan posisi gugus asam siano asetat.

Pada penelitian ini, metode yang digunakan ialah metode komputasi. Metode komputasi yang digunakan yaitu meliputi *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TDDFT). Adapun parameter yang akan digunakan yaitu serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} (*the free injection driving force*), τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*) dan FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*).

Parameter tersebut juga sudah digunakan dalam penelitian Dinda Latifah Rahmawati (Rahmawati, 2022) yang meneliti tentang senyawa γ -mangostin termodifikasi asam rodanin-3-asetat sebagai *dye* pada DSSC Hasilnya menunjukkan bahwa terdapat perbedaan sifat fotoelektrik di setiap posisi gugus penarik elektron.

Berdasarkan parameter-parameter yang telah digunakan Dinda Latifah Rahmawati (2022), penelitian ini berusaha mengkaji karakteristik fotoelektrik DSSC menggunakan *dye* ternatin yang termodifikasi siano asetat dan rodanin asetat. Penambahan akseptor elektron sianosetat dan rodanin asetat dilakukan dengan variasi posisi pada setiap gugus hidroksi pada ternatin.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah penelitian ini adalah:

1. Gugus akseptor yang digunakan ialah asam siano asetat dan asam rodanin asetat.
2. Posisi akseptor elektron berada pada atom O1 dan O2 ternatin, selanjutnya disimbol TSA 1 untuk ternatin siano asetat pada posisi atom O1, TSA 2 untuk ternatin siano asetat pada posisi atom O2, TRA 1 untuk ternatin rodanin asetat pada posisi atom O1, TRO 2 untuk ternatin rodanin asetat pada posisi atom O2.
3. Parameter yang digunakan adalah serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*Coupling Constant*), ΔG^{inject} (*Free Injection Driving Force*), ΔG_{reg} (*Electron Regeneration Energy*), τ (*Excited State Lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*) dan FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*).

C. Rumusan Masalah

Rumusan masalah penelitian ini adalah bagaimana perbedaan nilai serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} (*the free injection driving force*), τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*) dan FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*) *dye* Ternatin, TSA 1, TSA 2, TRA 1, dan TRA 2.

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah menentukan dan menganalisis perbedaan serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} (*the free injection driving force*), τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*) dan FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*) dye ternatin, ternatin termodifikasi siano asetat, dan ternatin termodifikasi rodanin asetat pada atom O1 dan O2.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah:

1. Menghasilkan referensi teoritik mengenai metode yang dapat digunakan untuk meningkatkan efisiensi senyawa dye ternatin yang dipengaruhi oleh gugus penarik elektron siano asetat dan rodanin asetat pada DSSC.
2. Mengetahui posisi gugus penarik elektron yang menghasilkan sifat fotoelektrik terbaik DSSC.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang sudah dilaksanakan, senyawa ternatin dan modifikasinya memiliki sifat fotoelektrik yang berbeda-beda. TRA 2 memiliki nilai yang paling baik jika dilihat dari parameter HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan panjang gelombang, FEEDAM, dan *Excited State Lifetime* (τ). Senyawa terbaik jika dilihat dari parameter *Coupling Constant* ($|V_{RP}|$) ialah senyawa TSA 2. Jika dilihat dari parameter ΔG^{inject} dan *Light Harvesting Efficiency* (LHE), senyawa terbaik ialah senyawa TSA 1. Jika dilihat dari semua parameter, senyawa terbaik ialah senyawa TRA 2.

B. Saran

Penelitian ini sudah memberikan informasi teoritik terhadap modifikasi terbaik senyawa ternatin. Untuk mendapatkan hasil yang lebih valid, peneliti selanjutnya dapat mencoba melakukan uji eksperimen di laboratorium.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

DAFTAR PUSTAKA

- Abubakari, I., Babu, S., Vuai, S., & Makangara, J. (2021). 2-Hexylthiophene-substituted alizarin-based (D- π -A) organic dyes for dye-sensitized solar cell applications: density functional theory and UV-Vis studies. *Journal of Chemical Research*, 45(1-2), 13-20.
- Andari, R. (2017). Sintesis dan Karakterisasi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) dengan Sensitizer Antosianin dari Bunga Rosella (Hibiscus Sabdariffa). *JIIF (Jurnal Ilmu dan Inovasi Fisika)*, 1(2), 140-150.
- Andersen, O. M., & Markham, K. R. (Eds.). (2005). *Flavonoids: chemistry, biochemistry and applications*. CRC press.
- Avhad, K., Jadhav, M., Patil, D., Chowdhury, T. H., Islam, A., Bedja, I., & Sekar, N. (2019). Rhodanine-3-acetic acid containing D- π -A push-pull chromophores: Effect of methoxy group on the performance of dye-sensitized solar cells. *Organic Electronics*, 65, 386-393.
- Awibi, R. (2021). Kajian Teoritik Sifat Fotoelektrik Sianidin Sebagai Sensitizer Pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Berdasarkan Perbedaan Posisi Gugus Akseptor Elektron
- Bendall, J. S., Etgar, L., Tan, S. C., Cai, N., Wang, P., Zakeeruddin, S. M., ... & Welland, M. E. (2011). An efficient DSSC based on ZnO nanowire photoanodes and a new D- π -A organic dye. *Energy & Environmental Science*, 4(8), 2903-2908.
- Casida, M. E. (2009). Time-dependent density-functional theory for molecules and molecular solids. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 914(1-3), 3-18.
- Comba, P., & Lienke, A. (2001). Bispidine copper (II) compounds: effects of the rigid ligand backbone. *Inorganic Chemistry*, 40(20), 5206-5209.
- Damayanti, R., Hardeli, H., & Sanjaya, H. (2016). Preparasi Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Menggunakan Ekstrak Antosianin Ubi Jalar Ungu (Ipomoea batatas L.). *Sainstek: Jurnal Sains dan Teknologi*, 6(2), 148-157.
- Ferré, N., Filatov, M., Huix-Rotllant, M., & Adamo, C. (Eds.). (2016). *Density-functional methods for excited states* (Vol. 368). Switzerland: Springer.
- Galappaththi, K., Ekanayake, P., & Petra, M. I. (2018). A rational design of high efficient and low-cost dye sensitizer with exceptional absorptions: Computational study of cyanidin based organic sensitizer. *Solar Energy*, 161, 83-89.

- Hartarto, F. D. (2019). *Rancang Bangun Monitoring Dan Kontrol Pertumbuhan Tanaman Pada Sistem Hidroponik DFT Menggunakan Metode Fuzzy Logic* (Doctoral dissertation, Politeknik Perkapalan Negeri Surabaya).
- Hayat, A., Putra, A. E. E., Amaliyah, N., & Pandey, S. S. (2019, October). Clitoria ternatea flower as natural dyes for Dye-sensitized solar cells. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 619, No. 1, p. 012049). IOP Publishing.
- Hutasoit, H. P. (2021, February). Pyropheophorbide-a derivatives as a dye compound for Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC): Theoretical investigation. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1788, No. 1, p. 012009). IOP Publishing.
- Imelda, I., & Aziz, H. (2022). Modifikasi Struktur Zat Warna Berbasis Trifenilamin Untuk Meningkatkan Kinerja Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs): Metode Komputasi. *Journal of Research and Education Chemistry*, 4(1), 34-34.
- Jadhav, M. M., Chowdhury, T. H., Bedja, I., Patil, D., Islam, A., & Sekar, N. (2019). Near IR emitting novel rhodanine-3-acetic acid based two donor- π -acceptor sensitizers for DSSC: Synthesis and application. *Dyes and Pigments*, 165, 391-399.
- Jensen, F. (2017). *Introduction to computational chemistry*. John Wiley & sons.
- Kacimi, R., Raftani, M., Abram, T., Azaid, A., Ziyat, H., Bejjit, L., ... & Bouachrine, M. (2021). Theoretical design of D- π -A system new dyes candidate for DSSC application. *Heliyon*, 7(6), e07171.
- Karimah, H., Ismail, W. M. I. W., & Ali, A. (2019, February). The electrical conductivity properties of Morus Nigra L. sp., Clitoria ternatea sp., and Melastoma malabathricum L. sp. as natural photo-sensitizers. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 2068, No. 1, p. 020051). AIP Publishing LLC.
- Li, R., Xie, L., Feng, H., & Liu, B. (2018). Molecular engineering of rhodanine dyes for highly efficient D- π -A organic sensitizer. *Dyes and Pigments*, 156, 53-60.
- Litvinyuk, I. V., Young, J. B., Zheng, Y., Cooper, G., & Brion, C. E. (2001). An investigation of the frontier orbital electron density of the antibacterial agent urotropine by electron momentum spectroscopy. *Chemical Physics*, 263(1), 195-201.

- Ludin, N. A., Al-Alwani, M. A., Mohamad, A. B., Kadhum, A. A. H., Hamid, N. H., Ibrahim, M. A., & Sopian, K. (2018). Utilization of natural dyes from zingiber officinale leaves and clitoria ternatea flowers to prepare new photosensitisers for dye-sensitized solar cells. *Int. J. Electrochem. Sci*, 13(8), 7451-7465.
- Ludin, N. A., Mahmoud, A. A. A., Mohamad, A. B., Kadhum, A. A. H., Sopian, K., & Karim, N. S. A. (2014). Review on the development of natural dye photosensitizer for dye-sensitized solar cells. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 31, 386-396.
- Mahmud, M. N. M., & Sudarlin, S. (2019). Theoretical Study of the Use of Cyano Acid Derivatives as Electron Acceptors in Cyanidin as Compounds of Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC). *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi*, 22(1), 1-6.
- Nirmalasari, I., Nugrahani, R. A., & Budiyanto, B. (2022). Peningkatan Efisiensi Dye Sentsitized Solar Cell (DSSC) dari Antosianin Kulit Manggis (*Garcinia mangostana* L) Menggunakan Papain. *Chimica et Natura Acta*, 10(2), 88-93.
- Novir, S. B., & Hashemianzadeh, S. M. (2014). Computational investigation of low band gap dyes based on 2-styryl-5-phenylazo-pyrrole for dye-sensitized solar cells. *Current Applied Physics*, 14(10), 1401-1410.
- Oelgemoller, M. (2016). Solar photochemical synthesis: from the beginnings of organic photochemistry to the solar manufacturing of commodity chemicals. *Chemical Reviews*, 116(17), 9664-9682.
- Ortega, D., Pandiyan, T., Cruz, J., & Garcia-Ochoa, E. (2007). Interaction of imidazoline compounds with Feⁿ (n= 1-4 ATOMS) as a model for corrosion inhibition: DFT and electrochemical studies. *The Journal of Physical Chemistry C*, 111(27), 9853-9866.
- Pamungkas, G., & Sanjaya, I. G. M. (2013). Kajian Teoritis Untuk Menentukan Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam Kalsium Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT). *UNESA Journal of Chemistry*, 2(1), 54-61.
- Paramita, S., YD, E. V., Nasrokhah, N., & Iswanto, P. (2020). Pemilihan Metode Perhitungan Kimia Komputasi Semi-empiris untuk Pengembangan 1, 3, 4-Thiadiazole. *Indonesian Journal of Chemical Research*, 8(1), 51-56.
- Pei, J., Peng, S., Shi, J., Liang, Y., Tao, Z., Liang, J., & Chen, J. (2009). Triphenylamine-based organic dye containing the diphenylvinyl and rhodanine-3-acetic acid moieties for efficient dye-sensitized solar cells. *Journal of Power Sources*, 187(2), 620-626.

- Pratiwi, D. D., Suryana, R., & Nuryoshid, F. (2016). Pemanfaatan Antosianin dari Ekstrak Kol Merah (*Brassica oleracea* var) sebagai Pewarna Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC). *Indonesian Journal of Applied Physics*, 6(01), 6-12.
- Prianto, B. (2010). Pemodelan kimia komputasi. *Berita Dirgantara*, 8(1).
- Putra, M. P. (2022). Pengaruh Variasi Dye Tunggal dan Campuran di Dalam Dye Antosianin Kulit Terong Ungu Dan Dye Klorofil Daun Pandan Terhadap Efisiensi DSSC. *STATOR: Jurnal Ilmiah Teknik Mesin*, 2(1), 27-30.
- Rahmawati, D. L. (2022). Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Akseptor Elektron Asam Rodanin-3Asetat Pada γ -Mangostin Sebagai Dye pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC).
- Ramachandran, K. I., Deepa, G., & Namboori, K. (2008). *Computational chemistry and molecular modeling: principles and applications*. Springer Science & Business Media.
- Ramle, A. Q., Khaledi, H., Hashim, A. H., Mingsukang, M. A., Arof, A. K. M., Ali, H. M., & Basirun, W. J. (2019). Indolenine–dibenzotetraaza [14] annulene Ni (II) complexes as sensitizers for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 164, 112-118.
- Rinkevicius, Z., Vahtras, O., & Ågren, H. (2009). Time-dependent closed and open-shell density functional theory from the perspective of partitioning techniques and projections. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 914(1-3), 50-59.
- Saputra, R. M., Yang, C., Zhao, D., Zheng, X., & Li, Y. (2022). Electronic and photovoltaic properties of triphenylamine-based molecules with D- π -AA structures. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1207, 113467.
- Seo, D., Park, K. W., Kim, J., Hong, J., & Kwak, K. (2016). DFT computational investigation of tuning the electron donating ability in metal-free organic dyes featuring a thienylethynyl spacer for dye-sensitized solar cells. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1081, 30-37.
- Sova, R. R., & Setiarso, P. (2021). Studi Elektrokimia Klorofil dan Antosianin Sebagai Fotosensitizer DSSC (Dye-Sensitized Solar Cell) Electrochemical Study of Chlorophyll and Anthocyanin as DSSC (Dye-Sensitized Solar Cell) Photosensitizer.
- Sudarlin, S. (2019). Theoretical Modification of Cyanidin as Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Using Rhodanine Acetic Acid as Electron Withdrawing Group. *JKPK (Jurnal Kimia dan Pendidikan Kimia)*, 4(1), 34-41.