

**MODIFIKASI TURUNAN KLOOROFIL 3-PYROPHEOPHORBIDE α
MENGUNAKAN ATOM PUSAT MAGNESIUM SEBAGAI *SENSITIZER*
PADA *DYE SENSITIZED SOLAR CELL* (DSSC) SECARA KOMPUTASI**

**Skripsi
Untuk memenuhi sebagian
Persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia**



**Oleh:
Nadasyifa Mawadha Sasya
19106030022**

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



**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-2222/Un.02/DST/PP.00.9/08/2023

Tugas Akhir dengan judul : "Modifikasi Turunan Klorofil 3- Pyropheophorbide □ Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) secara Komputasi"

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : NADASYIFA MAWADHA SASYA
Nomor Induk Mahasiswa : 19106030022
Telah diujikan pada : Senin, 24 Juli 2023
Nilai ujian Tugas Akhir : A

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

TIM UJIAN TUGAS AKHIR

 Ketua Sidang
Sudarlin, M.Si.
SIGNED
Valid ID: 64e41e7131a69

 Penguji I
Didik Krisdiyanto, S.Si., M.Sc.
SIGNED
Valid ID: 64c882a8cb6e6

 Penguji II
Endangji Sedyadi, M.Sc.
SIGNED
Valid ID: 64e3ff64ac282



 Yogyakarta, 24 Juli 2023
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED
Valid ID: 64e43a73dc1ce



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 : Nadasyifa Mawadha Sasya
NIM : 19106030022
Judul Skripsi : Modifikasi Turunan Klorofil 3-*Pyropheophorbide* α . Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai *Sensitizer* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) secara Komputasi

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 dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 14 Agustus 2023

Pembimbing

Sudarlin, M.Si.

NIP: 19850611 201503 1 002



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 : Nadasyifa Mawadha Sasya

NIM : 19106030022

Judul Skripsi. : Modifikasi Turunan Klorofil 3-*Pyropheophorbide* α Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai *Sensitizer* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) secara Komputasi

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

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

Wassalamu 'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 07 Agustus 2023

Konsultan



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



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 : Nadasyifa Mawadha Sasya

NIM : 19106030022

Judul Skripsi : Modifikasi Turunan Klorofil 3-*Pyropheophorbide* α Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai *Sensitizer* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) secara Komputasi

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

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

Wassalamu 'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 21 Agustus 2023

Konsultan

Endarujil Sedyadi, M.Sc

NIP. 19820205 201503 1 003



SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Nadasyifa Mawadha Sasya
NIM : 19106030022
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul “*Modifikasi Turunan Klorofil 3-Pyropheophorbide α Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) secara Komputasi*” 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



Nadasyifa Mawadha Sasya
NIM. 19106030022

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN MOTTO

“Sesungguhnya Allah tidak akan mengubah keadaan suatu kaum, sebelum mereka mengubah keadaan diri mereka sendiri.”

– QS Ar Rad 11 –

“Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai dengan kesanggupannya.”

– QS Al Baqarah 286 –



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

*Skripsi ini penulis persembahkan untuk
Almamater Program Studi Kimia
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
dan untuk semua yang berjuang dalam Ilmu Pengetahuan*



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

Segala puji bagi Allah SWT yang telah memberikan kesempatan sehingga skripsi yang berjudul “*Modifikasi Turunan Klorofil 3-Pyropheophorbide α Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) secara Komputasi*” dapat diselesaikan sebagai salah satu persyaratan untuk mencapai derajat Sarjana Kimia.

Penulis mengucapkan terimakasih kepada semua pihak yang telah terlibat dalam memberikan dorongan, semangat dan masukan sehingga tahapan penulisan skripsi ini telah selesai. Ucapan terima kasih tersebut secara khusus disampaikan kepada:

1. Ibu Dr. Hj. Khurul Wardati, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga.
2. Ibu Dr. Imelda Fajriati, M.Si., selaku ketua Program Studi Kimia UIN Sunan Kalijaga.
3. Bapak Sudarlin, M.Si., selaku Dosen Pembimbing yang secara ikhlas telah memberikan waktu, tenaga, dan pikirannya untuk mengarahkan penulis dalam menyelesaikan skripsi ini.
4. Bapak dan Ibu dosen Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga yang telah memberikan ilmu yang bermanfaat selama masa studi.
5. Bapak Suyitno, S.T. dan Ibu Herawati selaku kedua orang tua penulis yang selalu memberikan doa, semangat, nasehat, dan dukungan, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.

6. Saudari Annisa Setyantari, S.T. selaku kakak kandung penulis yang bersedia menjadi donatur biaya penelitian.
7. Mas Hidayatullah Putra Hutasoit, S.Si. dan Mba Dinda Latifah Rahmawati, S.Si. selaku Mentor yang telah banyak membantu penelitian ini.
8. Saudara Gokhan, S.Sos. yang telah memberikan saran, masukan, dan sangat memotivasi selama penulisan skripsi.
9. Teman seperbimbingan Arif Rizqillah dan Desi Rekhatul Jannah yang saling memotivasi dalam penulisan skripsi.
10. Teman dekat penulis Alvina, Devi, Hilda, Ahsani, Noor, dan Ayu yang selalu memberikan semangat dan dukungan kepada penulis.
11. Keluarga besar Kimia Angkatan 2019 yang telah mendukung dan membantu selama masa studi dan penulisan skripsi.
12. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu atas bantuannya dalam penulisan skripsi ini.

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

Yogyakarta, 18 Juli 2023
Penulis,

Nadasyifa Mawadha Sasya
NIM. 19106030022

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
PENGESAHAN TUGAS AKHIR.....	ii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR.....	iii
NOTA DINAS KONSULTASI.....	iv
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	vi
HALAMAN MOTTO.....	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	viii
KATA PENGANTAR.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR.....	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiv
ABSTRAK.....	xv
BAB 1 PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang Masalah.....	1
B. Batasan Masalah.....	3
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.....	7
1. Pengertian <i>Dye Sensitized Solar Cell</i> (DSSC).....	8
2. Klorofil.....	10
3. Logam magnesium sebagai atom pusat senyawa kompleks.....	11
4. <i>Pyropheophorbide</i> α	12
5. DFT dan TD-DFT.....	13
6. Basis Set.....	17
C. Hipotesis Penelitian.....	18
BAB III METODE PENELITIAN.....	19
A. Waktu dan Tempat Penelitian.....	19
B. Alat-alat Penelitian.....	19
C. Cara Kerja Penelitian.....	19
1. Merancang molekul menggunakan aplikasi Avogadro.....	20
2. Optimasi Geometri dan Penentuan Sifat Elektronik Menggunakan Aplikasi <i>ORCA 4.2.1</i> dengan Metode DFT dan TD-DFT.....	22
3. Interpretasi sifat elektronik senyawa 3PPhe- α	22
4. Modifikasi senyawa 3PPhe- α	22
5. Parameter perhitungan.....	23
BAB VI HASIL DAN PEMBAHASAN.....	25
A. Energi HOMO dan LUMO.....	25
B. Kerapatan Elektron.....	27
C. <i>Full-Electron Donor-Acceptor Map</i> (FEDAM).....	29
D. Spektra UV-Vis Teoritik.....	30

E. Sifat Transfer Muatan	32
BAB V PENUTUP.....	33
A. Kesimpulan	33
B. Saran.....	33
DAFTAR PUSTAKA	36
LAMPIRAN.....	40
Curriculum Vitae.....	47



DAFTAR GAMBAR DAN TABEL

Gambar 2. 1. Struktur <i>Dye Sensitized Solar Cells</i> (DSSC) (Hardani <i>et al</i> , 2016)..	8
Gambar 2. 2. Struktur Klorofil a dan b (Ai N. S. dan Yunia B., 2011).....	10
Gambar 2. 3. Senyawa <i>Pyropheophorbide α</i>	11
Gambar 3. 1. Struktur <i>3-Pyropheophorbide a</i> , modifikasi atom Mg, dan Klorofil	15
Gambar 4. 1. Optimasi struktur 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil	26
Gambar 4. 2. Tingkat energi HOMO – LUMO senyawa 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil	27
Gambar 4. 3. Analisis FEDAM	30
Gambar 4. 4. Spektra UV-Vis 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil	31
Tabel 4 1. Kerapatan elektron HOMO-LUMO	28
Tabel 4 2. Perhitungan parameter.....	32

DAFTAR LAMPIRAN

Parameter perhitungan	40
a) Parameter $ V_{RP} $	40
b) Parameter ΔG^{inject}	41
c) Parameter τ	42
d) Parameter LHE.....	43
Data Spektra UV-Vis	46



ABSTRAK

Modifikasi Turunan Klorofil 3-*Pyropheophorbide* α Menggunakan Atom Pusat Magnesium sebagai *Sensitizer* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) secara Komputasi

Oleh

Nadasyifa Mawadha Sasya

19106030022

Penelitian komputasi sifat fotoelektrik senyawa modifikasi 3-*Pyropheophorbide* α menggunakan atom pusat Mg sebagai *sensitizer* pada DSSC telah dilakukan. Hasil yang diperoleh dibandingkan dengan senyawa klorofil berdasarkan sifat fotoelektrik dari parameter energi HOMO-LUMO, serapan daerah UV-Vis, $|V_{RP}|$, ΔG^{inject} , τ , LHE, dan FEDAM. Optimasi geometri menggunakan *software Avogadro* dan *Orca 4.2.1* dengan basis set 6-311G** dan basis set LANL2DZ untuk atom pusat Mg. Intrepetasi senyawa menggunakan *software Avogadro*, *Chemissian*, dan *GaussSum*. Optimasi keadaan dasar menggunakan metode DFT-B3LYP dan optimasi keadaan tereksitasi menggunakan metode TD-DFT-B3LYP. Hasil penelitian modifikasi 3PPhe- α menghasilkan perbedaan sifat fotoelektrik yang mempengaruhi performa DSSC. Nilai terbaik untuk parameter serapan UV-Vis, energi HOMO dan τ adalah senyawa klorofil dengan nilai berturut-turut yaitu 559 nm, -5,122 eV dan 1,000 ns, sedangkan untuk parameter LHE adalah senyawa 3PPhe- α dengan nilai 0,873 dan nilai terbaik untuk parameter $|V_{RP}|$ adalah klorofil dengan nilai 0,511. Selain itu, untuk parameter energi LUMO dan ΔG^{inject} yang terbaik adalah senyawa 3-Mg-PPhe- α dengan nilai -2,360 eV dan -3,723. Sementara untuk parameter analisis kualitatif FEDAM diperoleh kemampuan senyawa modifikasi 3-Mg-PPhe- α lebih baik sebagai akseptor maupun donor dibandingkan dengan senyawa 3PPhe- α dan klorofil. Oleh karena itu, senyawa 3-Mg-PPhe- α dapat dijadikan sebagai *sensitizer* pada DSSC karena memiliki performa yang baik.

Kata Kunci: DSSC, DFT, TD-DFT, HOMO-LUMO, UV-Vis, $|V_{RP}|$, ΔG^{inject} , τ , LHE, FEDAM, 3PPhe-a, 3-Mg-PPhe-a, dan klorofil.

BAB I PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Sel surya merupakan energi alternatif yang mampu mengkonversi sinar matahari secara langsung menjadi energi listrik tanpa menghasilkan emisi gas buang. Prinsip kerja sel surya sama dengan proses fotosintesis pada tumbuhan. Energi cahaya dapat digunakan untuk menghasilkan elektron bebas. Kemudian, elektron bebas tersebut dapat digunakan untuk menghasilkan listrik dan menghasilkan energi kimia (Yuwono, 2011). *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) termasuk salah satu sel surya yang menggunakan bahan organik. Susunan pada DSSC terdiri dari dua elektroda yaitu elektroda kerja dan elektroda lawan. Elektroda sangat berperan penting dalam DSSC dan berfungsi sebagai tempat absorpsi *sensitizer* pada elektroda kerja. *sensitizer* DSSC masih bergantung pada *sensitizer* sintesis seperti kompleks ruthenium (Lu, et al., 2012). Kompleks ruthenium memiliki sifat fotoelektrokimia yang sangat baik dengan kemampuan dapat mengkonversi energi cahaya sebesar 11%. Namun, kompleks ruthenium memiliki dampak negatif bagi lingkungan dan tidak ekonomis (O'Regan & Grätzel, 1991).

Sensitizer pada DSSC dapat diperoleh secara sintesis dan alami. *Sensitizer* sintesis dapat memberikan efisiensi yang relatif tinggi. Namun, *sensitizer* sintesis memiliki kelemahan yaitu biaya produksi yang relatif mahal dan proses fabrikasinya yang tidak sederhana (Septina, et al., 2007). *Sensitizer* alami dapat mengatasi kekurangan *sensitizer* sintesis (Andari R., 2017). *Sensitizer* alami diekstrak dari bagian tumbuhan seperti daun, bunga, buah, dan lainnya dengan

biaya yang lebih murah, bahan melimpah, metode persiapan sederhana, dan fabrikasi pemurnian yang mudah (Yahya, *et al.*, 2021). Namun, *sensitizer* alami pada umumnya memiliki nilai efisien yang lebih rendah dibandingkan dengan *sensitizer* sintetis. Oleh karena itu, *sensitizer* alami saat ini terus dikembangkan untuk mendapatkan efisiensi sebaik *sensitizer* sintesis (Setiawan I. N., *et al.*, 2015)

Salah satu jenis *sensitizer* yang digunakan pada DSSC adalah *sensitizer* dari senyawa turunan klorofil yang diekstrak dari tumbuhan hijau. Klorofil merupakan salah satu pigmen yang efektif sebagai fotosensitizer pada proses fotosintesis. Klorofil mengikat ion Mg di tengah dan memiliki cincin isosiklik kelima yang berada dekat dengan cincin pirol ketiga. Namun, klorofil sebagai pigmen alami memiliki biaya produksi yang relatif tinggi untuk digunakan sebagai *sensitizer* pada DSSC. Sumber klorofil yang stabil dan murni untuk aplikasi sel surya dapat mempengaruhi biaya produksi keseluruhan DSSC. Klorofil memiliki senyawa turunan *chlorophyllide*, *pheophytin*, *pheophorbide*, dan *pyrochlorophyll*. *Pyropheophorbide* dihasilkan dari klorofil dengan suasana asam (HCl 30%) atau *chlorophyllide* yang diasamkan (Gross, 1991).

Pyropheophorbide terdiri dari α dan β . *Pyropheophorbide* α merupakan turunan dari klorofil α , sedangkan *pyropheophorbide* β merupakan turunan dari klorofil β . *Pyropheophorbide* α tergolong sebagai fotosensitizer yang baik (Saide A. *et al.*, 2020). *Pyropheophorbide* α merupakan produk dari defitilasi dan demetalasi dari klorofil α , yang terbentuk pada alga dan tumbuhan tingkat tinggi. Spektra UV-Vis dari *pyropheophorbide* α merupakan tipikal dari senyawa tipe klorofil α . Spektrofotometer klorofil α mempunyai serapan yang maksimal pada

panjang gelombang 665 nm, sedangkan klorofil β mempunyai serapan pada panjang gelombang 652 nm (Voet *et al.*, 1990). Akan tetapi, *pyropheophorbide* α sebagai *sensitizer* DSSC memiliki kelemahan karena efisiensi konversi cahaya ke listriknya yang masih relatif rendah. Efisiensi ini penting karena menentukan seberapa besar energi cahaya matahari yang dapat diubah menjadi energi listrik oleh sel surya. Oleh karena itu, senyawa *pyropheophorbide* α terus dikembangkan untuk mendapatkan efisiensi yang lebih baik.

Penelitian yang dilakukan oleh Li, Jiazhu *et. al.* (2017), menunjukkan bahwa *pyropheophorbide* α memiliki empat turunan, yaitu *methyl-5-cyano-6-methoxy pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide* α (1PPhe- α), *methyl-5-acetyl-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide* α (2PPhe- α), *methyl 2-carbethoxy-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide* α (3PPhe- α), dan *methyl-5-cyano-6-methyl pyrido[2,3-n]deoxypyropheophorbide* α (4PPhe- α). Hasil penelitian oleh Hutasoit & Sudarlin (2019), menunjukkan bahwa *band gap* energi sebesar 2.253 eV untuk 1-PPhe- α , 2.286 eV untuk 2-PPhe- α , 2.289 eV untuk 3-PPhe- α , dan 2.277 eV untuk 4-PPhe- α . Turunan 3-PPhe- α memiliki energi HOMO dan LUMO tertinggi dibandingkan turunan *pyropheophorbide* α lainnya dengan nilai HOMO dan LUMO berturut-turut sebesar -4,855 eV dan -2,566 eV. Parameter lainnya yang digunakan adalah $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), dan ΔG^{inject} . Penelitian Hutasoit & Sudarlin (2019), tersebut menghasilkan nilai $|V_{RP}|$ pada 3-PPhe- α sebesar 0.377, menghasilkan nilai LHE pada 3-PPhe- α sebesar 0.487, dan menghasilkan nilai ΔG^{inject} pada 3-PPhe- α sebesar -2.364. Senyawa

3PPhe- α perlu dilakukan modifikasi agar menghasilkan sifat fotoelektrik yang lebih baik dibandingkan senyawa tanpa modifikasi.

Modifikasi 3-PPhe- α dilakukan dengan penambahan atom pusat magnesium, sehingga senyawa tersebut menjadi kompleks. Magnesium berperan langsung menentukan struktur klorofil dengan terikat menjadi atom pusat bersama nitrogen dan hidrokarbon membentuk yang cincin porfirin. Berdasarkan spektra UV-Vis, klorofil menyerap cahaya dengan intensitas kuat terutama pada area gelap (pita Soret) dan cahaya tampak (pita Q). Memasukkan logam ke dalam senyawa klorofil dapat mengubah sifat absorpsi cahaya dengan berubahnya sifat transisi elektronik pada senyawa. Pada penelitian Silalahi I. H. *et al* (2020), modifikasi ion tembaga(II) pada senyawa klorofil menyebabkan perubahan transisi elektronik secara hipsokromik 397 nm pada pita Soret dan menjadi 650 nm di pita Q dengan absorptivitas yang meningkat. Pada penelitian ini, peneliti akan membandingkan sifat fotoelektrik struktur 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil.

Modifikasi struktur tidak hanya dapat mempengaruhi spektra absorpsi, tetapi juga mengatur tingkat energi dari *sensitizer*. Perubahan kecil pada geometri struktur dapat menghasilkan sifat fotofisika dan elektrokimia yang berbeda (Wan *et al.*, 2012). Modifikasi 3-PPhe- α dapat dilakukan secara teoritik maupun eksperimen. Namun, metode eksperimen membutuhkan waktu yang lebih lama dan kurang ekonomis, sehingga penelitian ini dikaji secara teoritis dengan menggunakan metode komputasi. Metode komputasi yang digunakan yaitu *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TD-DFT). Geometri dan orbital molekul dihitung menggunakan metode DFT dan

Spektrum absorpsi dihitung pada geometri keadaan dasar yang dioptimalkan dengan metode TD-DFT dan sering digunakan dalam prediksi interaksi sensor dan anion karena DFT dapat memberikan hasil yang baik untuk perhitungan yang melibatkan interaksi ikatan hidrogen atau *van der Waals* (Zhang *et al.*, 2007). Metode ini meliputi tiga parameter fungsi kerapatan, yang berisi koreksi pertukaran *gradien Beck* dan fungsi korelasi Lee, Yang, Parr (B3LYP) dengan basis set dasar standar 6-311G* (Afolabi, *et al.*, 2021). Metode komputasi didasarkan data yang dibutuhkan 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*).

B. Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini sebagai berikut:

1. Molekul yang dibandingkan adalah 3-PPhe- α , 3-PPhe- α dengan penambahan atom pusat Mg selanjutnya disingkat 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil.
2. Parameter yang digunakan adalah serapan pada daerah UV-Vis, kerapatan elektron, energi HOMO-LUMO, $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} , τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), dan analisis FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*).

C. Rumusan Masalah

Rumusan masalah penelitian ini adalah bagaimana perbedaan sifat fotoelektrik 3-PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, $|V_{RP}|$ (*coupling*

constant), ΔG^{inject} , τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), dan analisis FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*) sebagai *sensitizer* DSSC?

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah menentukan dan menganalisis perbedaan sifat fotoelektrik 3-PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, $|V_{\text{RP}}|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} , τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), dan analisis FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*) 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil sebagai *sensitizer* pada DSSC.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Menghasilkan referensi teoritik mengenai metode yang dapat digunakan untuk mengetahui sifat fotoelektrik pada turunan 3PPhe- α sebagai senyawa *sensitizer* pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC).
2. Mengetahui interaksi antara atom pusat Mg dengan turunan senyawa 3PPhe- α pada *sensitizer*.
3. Memberikan informasi terkait perbandingan sifat fotoelektrik 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan klorofil.

BAB V PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa modifikasi senyawa 3PPhe- α menggunakan atom pusat Mg menghasilkan perbedaan sifat fotoelektrik yang mempengaruhi performa dari DSSC. Nilai terbaik untuk parameter UV-Vis, energi HOMO, dan τ adalah senyawa klorofil dengan nilai berturut-turut yaitu 559 nm, -5,122 eV, dan 1,000 ns. Selanjutnya untuk parameter LHE adalah senyawa 3PPhe- α dengan nilai 0,873365, nilai terbaik untuk parameter $|V_{RP}|$ adalah klorofil dengan nilai 0,511. Selain itu, untuk parameter LUMO dan ΔG^{inject} adalah senyawa 3-Mg-PPhe- α dengan nilai -2,360 eV dan -3,723. Sementara untuk parameter analisis kualitatif FEDAM diperoleh kemampuan senyawa 3-Mg-PPhe- α lebih baik sebagai akseptor maupun donor dibandingkan dengan senyawa 3PPhe- α dan klorofil.

B. Saran

Penelitian selanjutnya diharapkan dapat melakukan modifikasi senyawa 3PPhe- α dengan menggantikan atom pusat dengan periode yang lebih besar agar menghasilkan nilai yang lebih baik.

DAFTAR PUSTAKA

- Ai, N. S. dan Yunia B. (2011). Konsentrasi Klorofil Daun Sebagai Indikator Kekurangan Air Pada Tanaman. *Jurnal Ilmiah Sains*. 11(2): 167-173.
- Agustini, S., Doty D. R., dan Dyah S. (2013). Fabrikasi *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) Berdasarkan Fraksi Volume TiO₂ Anatase-Rutile dengan *Gracia mangostana* dan *Rheo spathacea* sebagai *Dye Fotosensitizer*. *Jurnal Teknik Pomits*. 2(2).
- Andari, Rafika. (2017). Sintesis dan Karakteristik Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) dengan Sensitizer Antosianin dari Bunga Rosella. *Jurnal Fisika dan Aplikasinya*. 13(2): 88-95.
- Amoa Y., Yamada Y., Aoki K. 2003. Preparation And Properties Of Dye Sensitized Solar Cell Using Chlorophyll Derivative Immobilized TiO₂ Film Electrode. *Journal of Photochemistry and Photobiology A : Chemistry* 164, hal 47-51.
- Casida, Mark E. (2009). Time-Dependent Density-Functional Theory for Molecules and Molecular Solids. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 914 (1-3): 3-18.
- 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.
- Dunning Jr., T.H. (1989). "Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen". *Journal of Chemical Physics*. 90 (2): 1007–1023.
- Fiolhais, C. 2002. *A Primer in Density Functional Theory*. German: Springer.
- Hagfeldt A., Boschloo, G., Sun, L., Kloo, L., dan Petterson, H. 1994. Verification of High Efficiencies for The Gratzel-cell a 7-percent Efficient Solar-Cell Based on Dye-sensitizer Colloidal TiO₂ Films. *Sol Energy Sol Cells*; 31(4): 481-488.
- Hagfeldt, A., Boschloo, G., Sun, L., Kloo, L., & Petterson, H., 2010. Dye-sensitized Solar Cells. *Chem Rev*. 110, 6595-6663.
- Hutasoit, H. P. & Sudarlin, 2021. Pyropheophorbide-a Derivates as a Dye Compound for Dye-sensitized Solar Cell (DSSC): Theoretical Investigation. *Journal of Physics: Conference Series*.
- Kacimi, R. et al., 2021. Theoretical design of D- π -A system new dyes candidate for DSSC application. *Heliyon*, 7(6).

- Khatibi, A., Razi Astarai, F., dan Ahmadi, M. H. 2019. Generation and combination of the solar cell: A current model review. *Energy Science and Engineering*; 7(2): 305-322.
- Khosravi, M., et. al. 2019. Evaluation of DFT methods to calculate structure and partial atomic charges for zeolite N. *Computational Material Science*.
- Kumara, Maya SW dan Gontjang P. 2012. Studi Awal Fabrikasi Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC) dengan Menggunakan Ekstraksi Daun Bayam (*Amaranthus Hybridus L.*) sebagai Dye Sensitized dengan Variasi Jarak Sumber Cahaya pada DSSC. Surabaya : ITS
- Li, Jiazhu, Nailiang He, Yang Liu, Ziping Zhang, Xiao Zhang, Xueying Han, Yunyun Gai, Yongming Liu, Jungang Yin, Jinjun Wang. (2017). Synthesis and Photophysical Properties of Novel Pyridine Fused Chlorophyll a Derivatives. *Dyes and Pigments*. 146: 189-198.
- Lu, X. et al., 2012. Molecular Engineering of Quinoxaline-Based Organic Sensitizers for Highly Efficient and Stable Dye-Sensitized Solar Cells. *Chem. Mater*, 24(16), p. 3179–3187.
- N. Puspitasari. (2012). Studi Awal Pembuatan Prototipe Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Menggunakan Ekstraksi Rosela (*Hibiscus sabdariffa*) sebagai Dye Sensitizer dengan Variasi Luas Permukaan Lapisan TiO₂. *Jurnal ITS*.
- Ma T., Akiyana M, Abe E, dan Imai I. 2005. High-efficiency Dye-Sensitized Solar Cell Based on a Nitrogen-doped Nanostructured Titania Elektrode. *Nano Lett*; 5(12): 2543-2547.
- Marschner, H. 2012. Mineral nutrition of higher plants. 3rd Editions. Academic Press, London.
- Mengel K, Kirkby EA, Kosegarten H, Appel T. 2001. Principles of plant nutrition. Kluwer Academic, Dordrecht.
- Mustofa K. A., (2020). Studi Teoritik Fototransformasi Sistem Singlet Porfin ke Klorin. Skripsi. UIN Maulana Malik Ibrahim.
- Oelgemoller, Michael. (2016). Solar Photochemical Synthesis: From the Beginnings of Organic Photochemistry to the Solar Manufacturing of Commodity Chemicals. *ACS Publications*. 9654-9682.
- O'Regan, R. & Grätzel, M., 1991. A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films. *Nature*, Volume 353, p. 737–740.

- Pamungkas, G. & Sanjaya, I., 2013. Kajian Teoritis untuk Menentukan Celah Energi Porifin Terkonjugasi Logam Kalsium Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT). *UNESA Journal of Chemistry*, 2(1).
- Pranowo, H.D., 2003. Pengantar Kimia Komputasi, *Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria*. Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada. Yogyakarta.
- R. Syafinar, N. Gimesh, M. Irwanto, M. Fareq, dan Y. M. Irwan. Chlorophyll Pigments as Nature Based Dye for Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC). *Energy Procedia*. Vol. 79, pp. 896-902, 2015.
- Rahman, Imam Abdul. 2015. "Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS₂," 7.
- Rogers, Donald. 2003. *Computational Chemistry Using the PC*. 3rd ed. Hoboken, N.J: Wiley-Interscience.
- S., Kurniawan, M., A., 2015. Studi Komputasi Metode *Ab Initio* DFT dalam Kajian Struktural dan Sifat Elektronik Senyawa Kalsium Borohidrid-Diamonia sebagai Penyimpan Hidrogen. *Eksakta:Jurnal Ilmu-Ilu MIPA*. P. ISSN: 1411-1047.
- Saide, A, Chiara L., dan Adrianna L. (2020). Pheophorbide α : State of the Art. *Marine Drugs*. 18, 257.
- Santhanamoorthi, N., Lo, C. M, and Jiang, J. C. (2013). Molecular Design of Porphyrins for Dye-Sensitized Solar Cells: A DFT/TDDFT Study. *The Journal of Physical Chemistry Letters* 4, 524-530.
- Seo, D. *et al.*, 2016. DFT Computational Investigation of Tuning The Electron Donating Ability in Metal-Free Organic Dyes Featuring a Thienylethynyl Spacer For Dye Sensitized Solar Cell. *Computational and Theoretical Chemistry*, Volume 108, pp. 30-37.
- Setiadji, S., Atthar Luqman Invansyah, Bio. I. K. (2015). Studi Komputasi Senyawa Dopamin dan Dopamin-Ti(OH)₂ untuk Aplikasi Sel Surya Tersensitasi Zat Warna.
- Silalahi, I. H., Julan, M. Yusprianto, dan Rudiyanayah. (2020). Sintesis dan Transisi Elektronik Kompleks Tembaga (II)-Klorofil. *Indonesian Journal of Pure and Applied Chemistry*. 3(3): pp. 1-9.
- Sukir, 2011. *Simulasi Dinamika Molekuler Hibrida Mekanika Kuantum/Mekanika Molekuler Ion Y²⁺ dalam Amoniak Cair dan Air*, Yogyakarta: Universitas Gadjah Mada.

- Voet, D., dan Voet, J.G. 1990. *Biochemistry*. New York: John Wiley & Sons Inc.
- Wan, Z., Jia, C., Zhang, J., Duan, Y., Lin, Y., & Shi, Y. (2012). Triphenylamine-based starburst dyes with carbazole and phenothiazine antennas for dye-sensitized solar cells. *J. Power Sources* 199, 426-431.
- Yilmaz C, Gokmen V. 2016. *Chlorophyll*. In *Encyclopedia of Food and Health*. Caballero B, Finglas PM, Toldra F. Waltham (US): Academic Press.
- Young, David C. 2001. *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*. New York: Willey. <http://www.dawsonera.com/depp/reader/procted/external/AbstractView/S9780471458432>.
- Yuwono, A. H., Donanta, D., dan Alfian, F., (2011). Sel Surya Tersensitasi Zat Pewarna Berbasis Nanopartikel TiO₂ Hasil Proses sol-Gel dan Perlakuan Pasca-Hidrotermal. *Jurnal Material dan Energi Indonesia*. 1(3):127-140.
- Zhou, H., Wu, L., Gao, Y. & Ma, T., 2011. Dye-sensitized solar cells using 20 Natural Dyes as Sensitizers. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 2019(2-3), pp. 188-194.
- Zhang, Y., Scanlon, L. G., Balbuena, P. B. 2007. Hydrogen Adsorption in Corannulene-Based Materials. *Theo. Comput. Chem.*, 18: 127-166.