

**KAJIAN TEORITIS PENGARUH POSISI GUGUS AKSEPTOR
ELEKTRON ASAM RODANIN-3-ASETAT PADA SIANIDIN SEBAGAI
*SENSITIZER DYE SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC)***

**Skripsi
Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana S-1**



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Oleh:
Khoirul Agustina
17106030002

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

PENGESAHAN 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-2113/Un.02/DST/PP.00.9/09/2022

Tugas Akhir dengan judul : KAJIAN TEORITIS PENGARUH POSISI GUGUS AKSEPTOR ELEKTRON ASAM RODANIN-3-ASETAT PADA SIANIDIN SEBAGAI SENSITIZER DYE SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC)

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : KHOIRUL AGUSTINA
Nomor Induk Mahasiswa : 17106030002
Telah diujikan pada : Rabu, 31 Agustus 2022
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: 63318f0ca73b



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

Valid ID: 631aac20eda8d



Penguji II
Karmanto, S.Si., M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 633140a42f36d



Yogyakarta, 31 Agustus 2022
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 6332b0d22d343

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Khoirul Agustina
NIM : 17106030002
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul “KAJIAN TEORITIS PENGARUH GUGUS POSISI AKSEPTOR ELEKTRON ASAM RODANIN-3-ASETAT PADA SIANIDIN SEBAGAI *SENSITIZER 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, 29 Agustus 2022



Khoirul Agustina
NIM. 17106030002

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

SURAT PERSETUJUAN 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 : Khoirul Agustina
NIM : 17106030002
Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Posisi Akseptor Elektron Asam Rodanin-3-asetat pada Sianidin sebagai *Sensitizer Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)*

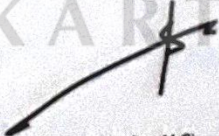
sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam Program Studi Kimia.

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

Wassalamu'alaikum wr. wb.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 26 Agustus 2022
Pembimbing


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

NOTA DINAS KONSULTASI



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 : Khoirul Agustina

NIM : 17106030002

Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Posisi Akseptor Elektron Asam Rodanin-3-asetat pada Sianidin sebagai *Sensitizer 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, 23 September 2022

Konsultan



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

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA



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 : Khoirul Agustina
NIM : 17106030002
Judul Skripsi : Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Posisi Akseptor Elektron Asam Rodanin-3-asetat pada Sianidin sebagai *Sensitizer 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.

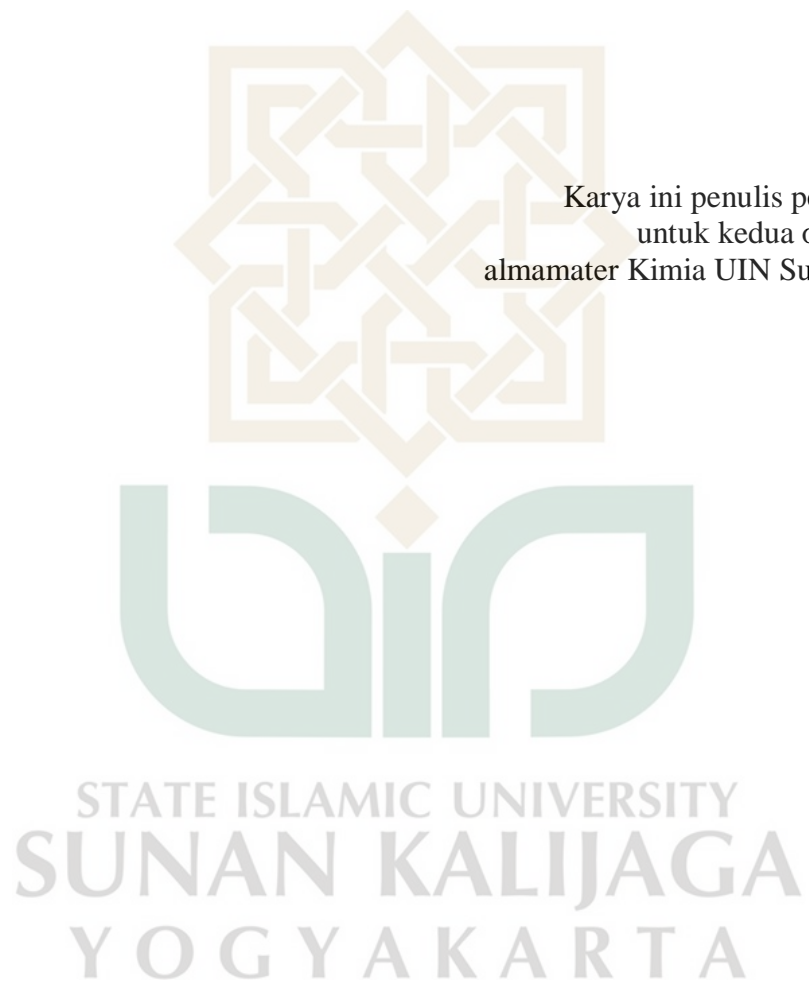
Yogyakarta, 23 September 2022
Konsultan

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Karmanto, S.Si., M.Sc.
NIP. 19820504 200912 1 005

PERSEMBAHAN

Karya ini penulis persembahkan
untuk kedua orang tua dan
almamater Kimia UIN Sunan Kalijaga



MOTTO

Tugas kita bukanlah untuk berhasil. Tugas kita adalah untuk mencoba, karena saat mencoba itulah kita menemukan dan belajar membangun kesempatan untuk berhasil.

~Buya Hamka~



KATA PENGANTAR

Segala puji bagi Allah SWT yang telah memberikan rahmat, hidayah, dan kesempatan sehingga skripsi yang berjudul “Kajian Teoritis Pengaruh Posisi Gugus Akseptor Elektron Asam Rodanin-3-Asetat pada Sianidin sebagai *Sensitizer Dye Sensitizer Solar Cell* (DSSC)” dapat terselesaikan sebagai salah satu syarat mencapai derajat Sarjana Kimia.

Penulis mengucapkan terimakasih kepada semua pihak yang telah memberikan bantuan, semangat, do’a, dukungan, dan motivasi sehingga skripsi ini dapat diselesaikan dengan baik. Ucapan terimakasih secara khusus penulis sampaikan kepada:

1. Ibu Dr. Hj. Khurul Wardati, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Ibu Dr. Imelda Fajriati, M.Si., selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Bapak Sudarlin, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang telah meluangkan waktunya untuk membimbing dan memberikan ilmu serta arahan dalam penyusunan skripsi ini.
4. Bapak A.Wijayanto, S.Si., selaku PLP pendamping di Laboratorium Kimia yang selalu mendampingi dan memberi arahan selama penelitian berlangsung.
5. Segenap Keluarga Besar yang sangat saya cintai dan sayangi terutama kedua orang tua penulis yang selalu memberikan dukungan dan semangat.
6. Ovi, Lia, Mita, Era, MbK Selvi, Ulia, MbK Amin, Sinta, dan Ainoy selaku sahabat kimia penulis yang selalu memberikan semangat.
7. Alin, Tika, Rizki, Fatim, Ratih, dan Khusnul selaku sahabat KKN penulis yang selalu memberikan semangat.
8. Bro Siti dan Dwi Fatma selaku sahabat Madrasah yang selalu menjadi tempat curhat berkeluh kesah dan selalu memberikan semangat penulis.
9. Dinda Kimia 2018 yang sudah banyak membantu memberi informasi terkait penelitian ini.
10. Teman-teman Kimia 2017 yang tidak bisa penulis sebutkan namanya satu per satu.

Yogyakarta, 17 Juli 2022

Khoirul Agustina
NIM. 17106030002

DAFTAR ISI

PENGESAHAN TUGAS AKHIR.....	ii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI	iii
SURAT PERSETUJUAN TUGAS AKHIR	iv
NOTA DINAS KONSULTASI.....	v
PERSEMBAHAN.....	vii
MOTTO.....	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR.....	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	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 LANDASAN TEORI.....	6
A. Tinjauan Pustaka	6
B. Landasan Teori.....	8
1. Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)	8
2. Sianidin	9
3. DFT dan TDDFT	10
4. Basis Set.....	13
C. Hipotesis	13
BAB III METODE PENELITIAN	15
A. Waktu Penelitian	15
B. Alat-alat Penelitian.....	15
C. Cara Kerja Penelitian.....	15

D. Teknik Analisis Data.....	17
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	19
A. Energi HOMO dan LUMO	19
B. Kerapatan Elektron.....	20
C. Spektra UV-Visible Teoritik.....	23
D. Coupling Constant ($ V_{RP} $).....	24
E. <i>The Free Energy for Electron Injection</i> (ΔG^{inject}).....	25
F. <i>Light Harvesting Efficiency</i> (LHE).....	26
G. <i>Excited State Lifetime</i> (τ).....	28
H. <i>Full-Electron Donor-Acceptor Map</i> (FEDAM).....	29
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	31
DAFTAR PUSTAKA	32
LAMPIRAN	37

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1	Skema Dye Sensitized Solar Cell	9
Gambar 2. 2	Struktur Antosianidin	9
Gambar 4. 1	Tingkat Energi HOMO-LUMO Senyawa Modifikasi Sianidin	19
Gambar 4. 2	Spektra Senyawa Modifikasi Sianidin dengan Asam rodanin-3-asetat Posisi O1, O2, O3, O4, dan O5.....	23
Gambar 4. 3	Grafik Coupling Constant $ V_{RP} $ Senyawa Modifikasi Sianidin dengan Asam rodanin-3-asetat.....	24
Gambar 4. 4	Grafik ΔG^{inject} Modifikasi Sianidin dengan Asam rodanin-3-asetat pada Posisi O1, O2, O3, O4, dan O5	26
Gambar 4. 5	Grafik LHE Modifikasi Sianidin dengan Asam rodanin-3-asetat pada Posisi O1, O2, O3, O4, dan O5	27
Gambar 4. 6	Grafik Excited State Lifetime (τ) Modifikasi Sianidin dengan Asam rodanin-3-asetat pada Posisi O1, O2, O3, O4, dan O5.....	28
Gambar 4. 7	Grafik Full Electron Donor-Acceptor Map (FEDAM)	29

DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1	Struktur Utama Antosianidin	10
Tabel 4. 1	Orbital Molekul HOMO dan LUMO Senyawa Modifikasi	21



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Perhitungan Coupling Constant (V_{RP}).....	37
Lampiran 2 Perhitungan ΔG^{inject}	35
Lampiran 3 Perhitungan Light Harvesting Efficiency (LHE).....	36
Lampiran 4 Perhitungan Excited State Lifetime (τ)	37



ABSTRAK

KAJIAN TEORITIS PENGARUH POSISI GUGUS AKSEPTOR ELEKTRON ASAM RODANIN-3-ASETAT PADA SIANIDIN SEBAGAI *SENSITIZER DYE SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC)*

Oleh:

Khoirul Agustina

17106030002

Penelitian mengenai pengaruh posisi gugus akseptor elektron asam rodanin-3-asetat terhadap fotoelektrik sianidin sebagai sensitizer dye sensitized solar cell (DSSC) telah dilakukan. Gugus akseptor elektron asam rodanin-3-asetat diletakkan pada atom oksigen yang terdapat pada sianidin. Parameter elektron yang digunakan yaitu energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan daerah UV-Vis, $|V_{RP}|$, ΔG_{inject} , LHE, dan τ . Metode DFT-B3LYP digunakan untuk optimasi saat keadaan dasar (HOMO) dan metode TDDFT-B3LYP digunakan untuk optimasi saat keadaan tereksitasi (LUMO) pada basis set 6-311G*. Sianidin dengan modifikasi asam rodanin-3-asetat posisi O1, O3, O4, dan O5 yang memenuhi persyaratan DSSC untuk energi HOMO. Sianidin tanpa modifikasi dan sianidin dengan modifikasi asam rodanin-3-asetat semua posisi sudah mencukupi persyaratan DSSC untuk energi LUMO. Kerapatan elektron dan $|V_{RP}|$ terbaik terlihat pada sianidin modifikasi asam rodanin-3-asetat posisi O2. Spektra UV-Vis dan LHE terbaik berada pada sianidin modifikasi asam rodanin-3-asetat posisi O4. Sianidin tanpa modifikasi memperoleh nilai yang terbaik untuk parameter ΔG_{inject} . Nilai terbaik pada *excited state lifetime* terdapat pada sianidin-O1-asam rodanin-3-asetat. Analisis FEDAM *dye* yang diminati terdapat pada kuadran III yaitu sianidin dan sianidin-O2-asam rodanin-3-asetat.

Kata Kunci: DSSC, DFT, TDDFT, sianidin, asam rodanin-3-asetat, HOMO-LUMO, UV-Vis, $|V_{RP}|$, ΔG_{inject} , LHE, τ , FEDAM.

ABSTRACT**THEORETICAL STUDY OF EFFECT POSITION THE RHODANINE-3-ACETIC ACID ELECTRON ACCEPTOR ON CYANIDIN AS A DYE SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC) SENSITIZER**

Khoirul Agustina
17106030002

Research on the effect of the position electron acceptor group of rhodanine-3-acetic acid with photoelectric cyanidin as a dye sensitized solar cell (DSSC) carried out. The electron acceptor group of rhodanine-3-acetic acid is placed on the oxygen atom present in cyanidine. The electron parameters used are HOMO-LUMO energy, electron density, UV-Vis, $|V_{RP}|$, ΔG^{inject} , LHE, τ , and FEDAM. The DFT/TDDFT-B3LYP method is used to optimize the ground state and excited state on the basis set 6-311G*. Cyanidin modified rhodanine-3-acetic acid positions O~1, O~3, O~4, and O~5 which conform the DSSC requirements for HOMO energy. Cyanidin without modification and cyanidine with modified rhodanine-3-acetic acid all positions are sufficient the DSSC requirements for LUMO energy. The best electron density and $|V_{RP}|$ is seen in cyanidin modified rhodanine-3-acetic acid at the O~2 position. The highest position for UV-Vis spectra and LHE was at cyanidin-O~4-rhodanine-3-acetic acid. Cyanidin without modification obtain the best value for ΔG^{inject} parameter. The best value the excited state lifetime parameter is cyanidin-O~1-rhodanine-3-acetic acid. FEDAM analysis the dyes of interest are found in quadrant III, namely cyanidin and cyanidin-O~2-rhodanine-3-acetic acid.

Keywords: DSSC, DFT, TDDFT, cyanidin, rhodanine-3-acetic acid, HOMO-LUMO, UV-Vis, $|V_{RP}|$, ΔG^{inject} , LHE, τ , FEDAM.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) ditemukan oleh O'Regan dan Gratzel pada tahun 1991 yang mengubah cahaya tampak menjadi energi listrik. DSSC terdiri atas elektroda, semikonduktor, perwarna (*dye*) sebagai fotosensitizer, dan elektrolit zat perwarna (*dye*) yang biasa dimanfaatkan untuk DSSC ada dua yaitu *dye* buatan dan *dye* alami. *Dye* buatan pada umumnya dapat menimbulkan pencemaran lingkungan dan harganya cukup mahal, sedangkan *dye* alami mudah didapatkan dari bagian-bagian tumbuhan (Hagfeldt & Vlachopoulos, 2018).

Dye alami yang dapat dimanfaatkan sebagai DSSC yaitu sianidin. Sianidin merupakan senyawa turunan yang terdapat pada antosianin. Sianidin memiliki efisiensi yang baik sebagai *sensitizer* DSSC yaitu 1,43% jika dibandingkan dengan pelargonidin 0,87% dan maritmein 0,60% (Ekanayake et al., 2013). Sianidin mempunyai efisiensi yang baik tetapi masih tergolong rendah, maka sianidin dapat dimodifikasi dengan menambah gugus akseptor elektron untuk memperoleh efisiensi yang lebih baik sebagai senyawa *dye* pada DSSC.

Penelitian yang dilakukan Sudarlin dengan metode komputasi (DFT/B3LYP) menunjukkan bahwa energi LUMO sianidin rodaninasetat lebih tinggi 0,052 eV dari energi LUMO sianidin sehingga secara teori, injeksi elektron ke pita konduksi semikonduktor lebih mudah terjadi. Kerapatan elektron posisi LUMO sianidin termodifikasi dapat terlokalisasi dengan baik pada rodaninasetat sehingga jarak elektron tereksitasi lebih dekat ke semikonduktor yang akan memudahkan injeksi elektron (Sudarlin, 2019). Penelitian tersebut belum melakukan optimasi posisi gugus penarik elektron asam rodanin-3-asetat.

Variasi posisi gugus penarik elektron dapat mempengaruhi efisiensi sianidin sebagai sensitiser DSSC seperti penelitian yang dilakukan oleh Wang et al., 2009. Perbedaan posisi substituen bromin (Br) terhadap senyawa *polybrominated phenoxazines* (PBPX) memberikan efek pada nilai ΔH_f^o (entalpi) dan ΔG_f^o (energi Gibbs). Perhitungan dilakukan menggunakan metode DFT. Hasilnya isomer mono-BPX menunjukkan posisi paling stabil 1-MBPX; pada di-BPX paling stabil 1,9-DBPX; pada tri-BPX paling stabil 1,3,9-Tri-BPX; 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 (Wang et al., 2009).

Pengaruh posisi gugus siano pada alizarin dan turunannya pada bentuk keto dan enol menggunakan proses *excited state intramolecular proton transfer* (ESIPT) dan metode DFT dan TDDFT telah dipelajari oleh Sun et al., 2018. Hasil penelitian menunjukkan gugus siano yang berikatan dengan alizarin pada posisi R-2 memiliki potensial penghalang paling rendah pada S_1 states dan S_0 states yaitu sebesar 5,634 kcal/mol dan 6,920 kcal/mol (Sun et al., 2018).

Penelitian mengenai rekayasa posisi kelompok penahan asam sianoakrilat dengan pewarna untuk aplikasi DSSC pada posisi (*Carbazole phenothiazine*) CBPTZ (orto, meta, dan para) dengan metode DFT dan TDDFT. Hasilnya menunjukkan bahwa perhitungan terbaik terdapat pada CBPTZ posisi para dengan PCE sebesar 6,63%, JSC 12,07 mA cm⁻² dan VOC 0,89 V (Liu et al., 2020).

Berdasarkan uraian di atas, variasi posisi asam rodanin-3-asetat sebagai akseptor elektron pada sianidin dapat mempengaruhi efisiensi yang dihasilkan. Metode yang digunakan untuk mempelajari hal tersebut adalah DFT dan TDDFT dengan basis set 6.311G*. DFT digunakan pada kimia komputasi untuk menyelesaikan perhitungan dengan sistem banyak molekul (Christopher J Cramer, 2003). Perhitungan geometri dari keadaan dasar untuk semua pewarna dapat dioptimalkan menggunakan teori DFT dengan basis set 6-311G*. Perhitungan untuk keadaan tereksitasi dapat menggunakan fungsi TDDFT (Dutta et al., 2020).

Parameter teoritis yang akan digunakan pada penelitian ini adalah energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan UV-Vis, *coupling constant* ($|V_{RP}|$, eV) (Logsdail et al., 2017), *the free energy for electron injection* (ΔG^{inject} , eV), *light harvesting efficiency* (LHE) (Obotowo et al., 2016), dan *excited state lifetime* (τ , ns) (Chaitanya et al., 2014), *Full Electron Donor-Acceptor Map* (FEDAM). Perbedaan sebaran elektron pada variasi posisi gugus penerima elektron akan menjadi dasar perbedaan nilai parameter tersebut.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini sebagai berikut:

1. Variasi posisi asam rodanin-3-asetat pada sianidin yang akan dipelajari adalah O~1, O~2, O~3, O~4, dan O~5.
2. Parameter teoritis yang akan digunakan yaitu, nilai energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan UV-Vis, *coupling constant* ($|V_{RP}|$, eV), *the free energy for electron injection* (ΔG^{inject} , eV), *light harvesting efficiency* (LHE), *excited state lifetime* (τ , ns), dan *Full Electron Donor-Acceptor Map* (FEDAM).
3. Parameter semikonduktor yang digunakan berdasarkan data eksperimen TiO_2 .

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang dan batasan masalah, maka rumusan masalah penelitian ini adalah bagaimana perbedaan nilai energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan UV-Vis, *coupling constant* ($|V_{RP}|$, eV), *the free energy for electron injection* (ΔG^{inject} , eV), *light harvesting efficiency* (LHE), *excited state lifetime* (τ , ns), dan *Full Electron Donor-Acceptor Map* (FEDAM) dye sianidin termodifikasi asam rodanin-3-asetat pada atom O~1, O~2, O~3, O~4, dan O~5.

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah menentukan dan menganalisa nilai energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan UV-Vis, *coupling constant* ($|V_{RP}|$, eV), *the free energy for electron injection* (ΔG^{inject} , eV), *light harvesting efficiency* (LHE), *excited state lifetime* (τ , ns), dan *Full Electron Donor-Acceptor Map* (FEDAM) dye sianidin termodifikasi asam rodanin-3-asetat pada atom O~1, O~2, O~3, O~4, dan O~5.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah menghasilkan kajian teoritis pada perkembangan senyawa *dye* sebagai DSSC (*Dye Sensitized Solar Cell*) yang dapat digunakan dalam karakteristik sianidin sebagai senyawa *dye* dan mengetahui pengaruh variasi posisi rodaninasetat O~1, O~2, O~3, O~4, dan O~5 yang paling efisien pada sianidin berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, serapan UV-Vis, *coupling constant* ($|V_{RP}|$, eV), *the free energy for electron injection* (ΔG^{inject} , eV), *Light Harvesting Efficiency* (LHE), *excited state lifetime* (τ , ns), dan *Full Electron Donor-Acceptor Map* (FEDAM).

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa modifikasi sianidin dengan asam rodanin-3-asetat pada posisi O~1, O~2, O~3, O~4, dan O~5 memiliki karakter yang berbeda. Sianidin dengan modifikasi asam rodanin-3-asetat posisi O~1, O~3, O~4, dan O~5 yang memenuhi persyaratan DSSC untuk energi HOMO. Sianidin tanpa modifikasi dan sianidin dengan modifikasi asam rodanin-3-asetat semua posisi sudah mencukupi persyaratan DSSC untuk energi LUMO. Kerapatan elektron dan $|V_{RP}|$ terbaik terlihat pada sianidin modifikasi asam rodanin-3-asetat posisi O~2. Spektra UV-Vis dan LHE terbaik berada pada sianidin modifikasi asam rodanin-3-asetat posisi O~4. Sianidin tanpa modifikasi memperoleh nilai yang terbaik untuk parameter ΔG^{inject} . Nilai terbaik pada *excited state lifetime* terdapat pada sianidin-O~1-asam rodanin-3-asetat. Analisis FEDAM *dye* yang diminati terdapat pada kuadran III yaitu sianidin dan sianidin-O~2-asam rodanin-3-asetat.

B. Saran

Penelitian selanjutnya dapat melakukan uji laboratorium secara fisik untuk membuktikan hasil data yang diperoleh dalam penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

- Al-Attafi, K., Nattestad, A., Wu, Q., Ide, Y., Yamauchi, Y., Dou, S. X., & Kim, J. H. (2018). The effect of amorphous TiO₂ in P25 on dye-sensitized solar cell performance. *Chemical Communications*, 54(4), 381–384. <https://doi.org/10.1039/c7cc07559f>
- Ardo, S., & Meyer, G. J. (2009). Photodriven heterogeneous charge transfer with transition-metal compounds anchored to TiO₂ semiconductor surfaces. *Chemical Society Reviews*, 38(1), 115–164. <https://doi.org/10.1039/b804321n>
- Bartolotta, A., & Calogero, G. (2020). Dye-sensitized solar cells: from synthetic dyes to natural pigments. In *Solar Cells and Light Management*. Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-102762-2.00004-5>
- Burton-Freeman, B., Sandhu, A., & Edirisinghe, I. (2016). Anthocyanins. *Nutraceuticals: Efficacy, Safety and Toxicity*, 489–500. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802147-7.00035-8>
- Chaitanya, K., Ju, X. H., & Heron, B. M. (2014). Theoretical study on the light harvesting efficiency of zinc porphyrin sensitizers for DSSCs. *RSC Advances*, 4(51), 26621–26634. <https://doi.org/10.1039/c4ra02473g>
- Christopher J Cramer. (2003). *Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models* By Christopher J. Cramer. Wiley: Chichester, England. 2002. 562 pp. ISBN 0-471-48551-9 (hardcover). \$110. ISBN 0-471-48552-7 (paperback). \$45. In *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* (Second, Vol. 43, Issue 5). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1021/ci010445m>
- Deogratias, G., Seriani, N., Pogrebnya, T., & Pogrebnoi, A. (2020). Tuning optoelectronic properties of triphenylamine based dyes through variation of pi-conjugated units and anchoring groups: A DFT/TD-DFT investigation. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 94, 107480. <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2019.107480>
- Dutta, R., Ahmed, S., & Kalita, D. J. (2020). Theoretical design of new triphenylamine based dyes for the fabrication of DSSCs: A DFT/TD-DFT study. *Materials Today Communications*, 22, 100731. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2019.100731>
- Ekanayake, P., Kooh, M. R. R., Kumara, N. T. R. N., Lim, A., Petra, M. I., Yoong, V. N., & Ming, L. C. (2013). Combined experimental and DFT-TDDFT study of photo-active constituents of *Canarium odontophyllum* for DSSC application. *Chemical Physics Letters*, 585, 121–127. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2013.08.094>
- Fernando, T., Ridwan, & dkk. (2013). Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Berbasis Nanopori TiO₂ Menggunakan Antosianin dari Berbagai Sumber Alami. *Semirata FMIPA Universitas Lampung*, 155–162.

- Gupta, V. P. (2016). Density Functional Theory (DFT) and Time Dependent DFT (TDDFT). In *Principles and Applications of Quantum Chemistry*. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-803478-1.00005-4>
- Hagfeldt, A., & Vlachopoulos, N. (2018). Dye-Sensitized Solar Cells. In *The Future of Semiconductor Oxides in Next-Generation Solar Cells*. Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811165-9.00006-5>
- Hastiawan, J. (2013). *Density Functional Theory Untuk Penentuan Geometri dan Karakteristik Ikatan Dari Kompleks Ni (Ii) -Dibutilditiokarbamat dan Co (ii)-Dibutilditiokarbamat. Ii*, 197–202.
- Kacimi, R., Raftani, M., Abram, T., Azaid, A., Ziyat, H., Bejjit, L., Bennani, M. N., & Bouachrine, M. (2021). Theoretical design of D- π -A system new dyes candidate for DSSC application. *Heliyon*, 7(6), e07171. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e07171>
- Kandregula, G. R., Mandal, S., Prince, G., Yadav, S. K., & Ramanujam, K. (2020). A computational study on boron dipyrromethene ancillary acceptor-based dyes for dye-sensitized solar cells. *New Journal of Chemistry*, 44(12), 4877–4886. <https://doi.org/10.1039/c9nj05334d>
- 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. *Dyes and Pigments*, 180(April), 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2020.108470>
- Logsdail, A. J., Downing, C. A., Catlow, C. R. A., & Sokol, A. A. (2017). Magnetic coupling constants for MnO as calculated using hybrid density functional theory. *Chemical Physics Letters*, 690, 47–53. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.10.027>
- Mahmud, S. (2019). *Theoretical Study of the Use of Cyano Acid Derivatives as Electron Acceptors in Cyanidin as Compounds of Dye Sensitized Solar Cells (DSSC)* (pp. 1–6). *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi* 22. <https://doi.org/https://doi.org/10.14710/jksa.22.1.1-6>
- Male, Y. T., Sutapa, I. W., & Ranglalin, O. M. (2015). *Computational Study Natural Color Essence (Dyes) As Active Material On Organic Solar Cell With Density Functional Theory (DFT) Studi Komputasi Zat Warna (Dyes) Alami sebagai Material Aktif pada Sel Surya Organik Menggunakan Teori Fungsional Kerapata*. 205–212.
- Mandal, S., Kandregula, G. R., & Tokala, V. N. B. (2020). A Computational Investigation Of The Influence Of Acceptor Moieties On Photovoltaic Performances And Adsorption Onto The Tio2 Surface In Triphenylamine-Based Dyes For DSSC Application. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 401, 112745. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2020.112745>

- Nurul Fadhillah Agdisti, Lasmi Yunita, Rahmaneta Luli, Indri Panca Novita, H. (2019). Peningkatan Performansi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) dengan Ekstrak Kulit Jengkol sebagai Zat Warna Melalui Elektrodeposisi Zn pada TiO₂. *RESIDU*, 3, 1–33.
- Obotowo, I. N., Obot, I. B., & Ekpe, U. J. (2016). Organic sensitizers for dye-sensitized solar cell (DSSC): Properties from computation, progress and future perspectives. *Journal of Molecular Structure*, 1122, 80–87. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.05.080>
- 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.
- Rahman, H, P. . (2013). Pengaruh Pemberian *Space* (Bantalan) Untuk Mendapatkan Kestabilan Arus dan Tegangan Prototipe DSSC Dengan Ekstraksi Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana L.*) sebagai *Dye Sensitizer*. *Jurnal Sains Dan Seni Pom Its*, 1(2, (2013) 2301-928X).
- Roohi, H., & Mohtamadifar, N. (2022). The Role Of The Donor Group And Electron-Accepting Substitutions Inserted In π -Linkers In Tuning The Optoelectronic Properties Of D- π -A Dye-Sensitized Solar Cells: a DFT/TDDFT Study. *RSC Advances*, 12(18), 11557–11573. <https://doi.org/10.1039/d2ra00906d>
- Soni Setiadji, Atthar Luqman Ivansyah, B. I. A. (2015). *Studi Komputasi Senyawa Dopamin dan Dopamin-Ti(OH) 2 Untuk Aplikasi Sel Surya Tersensitasi Zat Warna*. IX(2).
- Sudarlin. (2019). Theoretical Modification of Cyanidin as Sensitizers in Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Using Rhodanine Acetic. *Jkpk (Jurnal Kimia Dan Pendidikan Kimia)*, 4(1), 34–41.
- Sun, C., Li, H., Yin, H., Li, Y., & Shi, Y. (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, 650–656. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.08.087>
- Ünlü, B., & Özacar, M. (2020). Effect of Cu and Mn Amounts Doped To TiO₂ On The Performance Of DSSCs. *Solar Energy*, 196(October 2019), 448–456. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.12.043>
- Wang, H., Liu, H., Li, C., Wang, Z., & Yang, G. (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>