

**MODIFIKASI *b* 3-Pyropheophorbide *a* MENGGUNAKAN
ATOM PUSAT Mg dan Ca SEBAGAI SENSITIZER PADA DYE
SENSITIZED SOLAR CELL (DSSC) DENGAN METODE
KOMPUTASI**

Skripsi
Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana Kimia



Oleh:
Sekar Dian Fitriyani
20106030043

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2025

PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-293/Un.02/DST/PP.00.9/02/2025

Tugas Akhir dengan judul : Modifikasi 3-Pyropheophorbide $\square$ Menggunakan Atom Pusat Mg dan Ca sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Dengan Metode Komputasi

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : SEKAR DIAN FITRIYANI
Nomor Induk Mahasiswa : 20106030043
Telah diujikan pada : Kamis, 30 Januari 2025
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: 67b2b8b56498



Penguji I
Endaruji Sedyadi, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 67b2f355e6906



Penguji II
Priyagung Dhemi Widiangkoko, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 67baf8f85d3dad



Yogyakarta, 30 Januari 2025
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.St.
SIGNED

Valid ID: 67b3eff8be624f

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/ TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Lamp :

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

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

Nama : Sekar Dian Fitriyani

NIM : 20105030043

Judul Skripsi : Modifikasi 1-Pyrophosphoribide *a* Menggunakan Atom Pusat Mg dan Ca sebagai Sensitizer pada *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) Dengan Metode 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 dimuncayakan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, Januari 2025

Pembimbing

Sudarlin, M.Si

NIP. 19850611 201503 1 002

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

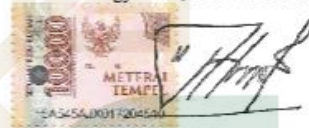
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Sekar Dian Fitriyani
NIM : 2010603004
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul "**Modifikasi 3-Pyropheophorbide a Menggunakan Atom Pusat Mg dan Ca sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Dengan Metode 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, 22 Januari 2025



Sekar Dian Fitriyani
NIM. 20106030043

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

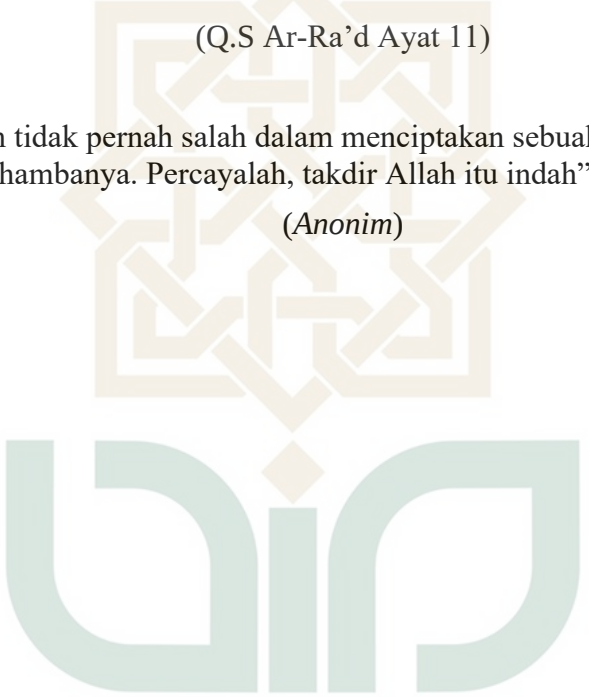
HALAMAN MOTO

“Bagi manusia ada malaikat-malaikat yang selalu mengikutinya bergiliran, di muka dan di belakangnya, mereka menjaganya atas perintah Allah. Sesungguhnya Allah tidak merubah keadaan sesuatu kaum sehingga mereka merubah keadaan yang ada pada diri mereka sendiri. Dan apabila Allah menghendaki keburukan terhadap suatu kaum, maka tak ada yang dapat menolaknya; dan sekali-kali tak ada pelindung bagi mereka selain Dia.”

(Q.S Ar-Ra'd Ayat 11)

“Allah tidak pernah salah dalam menciptakan sebuah takdir untuk hambanya. Percayalah, takdir Allah itu indah”

(Anonim)



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk Ibu, Bapak dan Adik dan semua Keluarga yang sudah mendukung saya selama menjalani masa perkuliahan.

Teman- teman berproses di keluarga Hydroxyl, Korp Sapphire, dan PMII.

Serta untuk Almamater Program Studi Kimia UIN Sunan Kalijaga.



KATA PENGANTAR

Segala Alhamdulillah kehadiran Allah SWT yang telah memberikan kesempatan sehingga skripsi yang berjudul “Modifikasi 3-Pyropheophorbide α Menggunakan Atom Pusat Mg dan Ca sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Dengan Metode 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 Hj. Dr. Khurul Wardati, M.Si selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga.
2. Ibu Prof. Dr. Maya Rahmayanti, M.Si selaku ketua Program Studi Kimia UIN Sunan Kalijaga.
3. Bapak Sudarlin, M.Si., selaku Dosen Pembimbing yang telah memberikan waktu, tenaga, motivasi dan dukungannya untuk mengarahkan penulis dalam menyelesaikan skripsi ini.
4. Bapak Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan arahan dan dukungannya selama masa studi.
5. Bapak Muhammad Zainuri dan Ibu Roichah selaku kedua orang tua penulis yang tak pernah lelah memberikan doa, semangat, nasehat, dan dukungan, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dan mendapat gelar sarjana.
6. Saudara Ahmad Suryadi yang telah memberikan saran, masukan, dan sangat memotivasi selama penulisan skripsi
7. Keluarga Korp Sapphire yang telah mewarnai hari-hari selama menjalani dunia perkuliahan.
8. Tamen-Tamen Organisasi PMII Rayon Aufklärung, HM-PS Kimia, DEMA FST, serta DEMA-U atas ruang untuk berproses dan memperoleh pengalaman dan ilmu yang berharga.
9. Keluarga besar Kimia Angkatan 2020 (Hydroxyl) yang telah mendukung dan membantu selama masa studi dan penulisan skripsi.

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, 21 Januari 2025

Penulis

DAFTAR ISI

PENGESAHAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	ii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	iii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	iv
HALAMAN MOTTO	v
HALAMAN PERSEMBAHAN	vi
KATA PENGANTAR	vii
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL.....	ix
ABSTRAK	x
ABSTRACT.....	xi
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.....	7
A. Tinjauan Pustaka.....	7
B. Landasan teori.....	12
C. Hipotesis Penelitian	22
BAB III METODE PENELITIAN	24
A. Waktu dan Tempat Penelitian.....	24
B. Alat-alat Penelitian	24
C. Cara Kerja Penelitian.....	24
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	29
A. Energi HOMO dan LUMO.....	29
B. Kerapatan Elektron	31
C. <i>Full-Electron Donor-Acceptor Map</i> (FEDAM)	34
D. Spektra UV-Vis	36
E. Sistem Transfer Muatan.....	37
BAB V PENUTUP.....	43
A. Kesimpulan	43
B. Saran.....	43
DAFTAR PUSTAKA	44
LAMPIRAN.....	48

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur <i>Dye Sensitized Solar Cells</i> (DSSC).....	10
Gambar 2.2 Struktur Pyropheophorbide α	16
Gambar 3.1 Struktur Senyawa 3-PPhe- α	24
Gambar 3.2 Struktur 3-Mg-PPhe- α	25
Gambar 3.3 Struktur 3-Ca-PPhe- α	25
Gambar 4.1 Tingkat energi HOMO – LUMO senyawa 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan 3-Ca-PPhe- α	30
Gambar 4.2 Analisis FEDAM.....	35
Gambar 4.3 Spektra UV-Vis.....	36

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Kerapatan Elektron HOMO-LUMO	32
Tabel 4.2 Hasil Perhitungan Parameter.....	38

ABSTRAK

Modifikasi 3-Pyropheophorbide α Menggunakan Atom Pusat Mg dan Ca sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Dengan Metode Komputasi

Oleh

Sekar Dian Fitriyani

20106030043

Efisiensi pewarna alami sebagai sensitizer pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) seperti *pyropheophorbide α* masih terbatas. Penelitian ini bertujuan untuk meningkatkan sifat fotoelektrik senyawa 3-*Pyropheophorbide α* (3-PPhe- α) yang dimodifikasi dengan penambahan atom pusat Magnesium (Mg) dan Kalsium (Ca) sebagai sensitizer pada *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC). Hasil penelitian dibandingkan dengan senyawa 3-PPhe- α tanpa modifikasi berdasarkan parameter sifat fotoelektrik, meliputi energi HOMO-LUMO, serapan UV-Vis, |VRP|, ΔG^{inject} , τ , LHE, dan analisis FEDAM. Optimasi geometri dilakukan menggunakan perangkat lunak Avogadro dan Orca 4.2.1 dengan basis set 6-311G** serta LANL2DZ untuk atom pusat Mg dan Ca. Interpretasi hasil dilakukan menggunakan perangkat lunak Avogadro, Chemissian, dan GaussSum. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa modifikasi dengan Mg dan Ca meningkatkan spontanitas injeksi elektron dengan nilai ΔG^{inject} paling negatif (-3,776 eV), sedangkan Ca memperpanjang *excited state lifetime* hingga 0,180 ns. Analisis spektrum UV-Vis menunjukkan pergeseran hipsokromik dan batokromik pada kedua molekul hasil modifikasi. Pergeseran hipsokromik menyebabkan nilai LHE 3-Mg-PPhe- α dan 3-Ca-PPhe- α lebih rendah dibandingkan 3-PPhe- α .

Kata kunci: 3-Pyropheophorbide α , DSSC, DFT, TD-DFT, Mg, Ca, sensitizer.

ABSTRACT

Modification of 3-Pyropheophorbide α Using Mg and Ca Central Atoms as Sensitizers in *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) Using Computational Methods

By :

Sekar Dian Fitriyani

20106030043

The efficiency of natural dyes as sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC) such as pyropheophorbide α is still limited. This study aims to improve the photoelectric properties of the compound 3-Pyropheophorbide α (3-PPhe- α) modified by the addition of Magnesium (Mg) and Calcium (Ca) central atoms as sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC). The results of the study were compared with the 3-PPhe- α compound without modification based on photoelectric property parameters, including HOMO-LUMO energy, UV-Vis absorption, |VRP|, ΔG_{inject} , τ , LHE, and FEDAM analysis. Geometry optimization was performed using Avogadro and Orca 4.2.1 software with a 6-311G** basis set and LANL2DZ for Mg and Ca central atoms. Interpretation of the results was performed using Avogadro, Chemissian, and GaussSum software. The calculation results show that modification with Mg and Ca increases the spontaneity of electron injection with the most negative ΔG_{inject} value (-3.776 eV), while Ca extends the excited state lifetime to 0.180 ns. UV-Vis spectrum analysis shows hypsochromic and bathochromic shifts in both modified molecules. The hypsochromic shift causes the LHE values of 3-Mg-PPhe- α and 3-Ca-PPhe- α to be lower than 3-PPhe- α .

Keywords: 3-Pyropheophorbide α , DSSC, DFT, TD-DFT, Mg, Ca, sensitizer.

BAB I PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Hingga saat ini, *sensitizer* pada sel surya DSSC (*Dye Sensitized Solar Cell*) dapat dikelompokkan menjadi dua jenis, yakni dye sintetis dan dye alami. Efisiensi konversi daya tertinggi DSSC dilaporkan sekitar 11%-12% menggunakan dye sintesis kompleks ruthenium (N_{719}). Akan tetapi, kompleks ruthenium bersifat beracun, mahal, dan sulit diproduksi (Pramananda et al., 2021). Sementara itu, dye alami dapat dengan mudah ditemukan dan berasal dari komponen tumbuhan yang dapat diekstrak, seperti buah, bunga, akar, dan daun (Yuniawati & Tamrin, 2021). Salah satu dye alami yang digunakan adalah turunan klorofil yang diperoleh melalui ekstraksi tanaman berdaun hijau.

Klorofil adalah salah satu pigmen yang dapat digunakan sebagai dye dalam pembuatan DSSC. Salah satu turunan klorofil yang dapat digunakan sebagai *sensitizer* alami adalah *pyropheophorbide*. *Pyropheophorbide* terbentuk dari klorofil dengan mengasamkannya dalam lingkungan asam (HCl 30%) atau dengan mengasamkan *chlorophyllide*. *Pyropheophorbide* terbagi menjadi 2 yaitu *pyropheophorbide* α dan β . *Pyropheophorbide* α adalah hasil dari proses penghilangan gugus etil dan logam dari klorofil yang terbentuk dalam alga dan tumbuhan tingkat tinggi (Saide et al., 2020). Turunan *pyropheophorbide* α yang telah berhasil disintesis adalah *methyl-5-cyano-6-methoxy pyrido [2,3-n] deoxypyropheophorbide* α , *methyl 5-acetyl-6-methyl pyrido [2,3-n] deoxypyropheophorbide* α , *methyl 5-carbethoxy-6-methyl pyrido[2,3-*

n]deoxypyropheophorbide α , dan *methyl 5-cyano-6-methyl pyrido*[2,3-*n*]deoxypyropheophorbide α (Li Jiazhu et al., 2017). *Pyropheophorbide* α merupakan fotosensitizer yang baik karena memiliki serapan yang kuat pada panjang gelombang 650–700 nm (Saide et al., 2020). Meskipun demikian, senyawa ini memiliki kekurangan dimana efisiensi konversi cahaya menjadi listriknya masih cukup rendah yaitu $< 11\%$ (Saide et al., 2020). Efisiensi konversi cahaya memiliki peran penting karena menentukan sejauh mana energi cahaya matahari dapat diubah menjadi energi listrik oleh DSSC. Oleh karena itu, upaya pengembangan senyawa terus dilakukan untuk mencapai tingkat efisiensi yang lebih tinggi.

Beberapa penelitian terkait *pyropheophorbide* α sebagai dye untuk DSSC telah dilakukan secara komputasi diantaranya penelitian Hutasoit & Sudarlin, (2021) yang menemukan bahwa turunan *pyropheophorbide* α yakni 3-PPhe- α memiliki potensi sebagai dye pada DSSC. Hal tersebut berdasarkan parameter energi HOMO dan LUMO tertinggi dibandingkan turunan *pyropheophorbide* α lainnya. Selain itu, parameter lainnya yang digunakan antara lain $|VRP|$ pada 3-PPhe- α memiliki nilai sebesar 0.377, LHE pada 3-PPhe- α sebesar 0.487, dan ΔG^{inject} pada 3-PPhe- α sebesar -2.364. Namun pada penelitian ini memiliki keterbatasan, dimana senyawa 3-PPhe- α yang dimodifikasi dengan menambahkan atom pusat (Ni, Ba, Pt dan Zn) yang bertujuan untuk meningkatkan efektifitas injeksi elektron dan stabilitas struktur, hasilnya menunjukkan bahwa tingkat energi HOMO dan LUMO menurun. Penurunan ini berpotensi menghambat injeksi elektron ke pita konduksi (CB) TiO_2 .

Parameter tersebut juga digunakan dalam penelitian Nadasyifa dan Sudarlin (Sasya & Sudarlin, 2024) yang meneliti tentang modifikasi senyawa 3-PPhe- α dengan menambahkan atom pusat Mg sehingga senyawa tersebut menjadi kompleks. Hasilnya menunjukkan bahwa jika senyawa 3-PPhe- α dimodifikasi dengan atom pusat Mg, maka kerapatan elektron tertarik ke bagian gugus -COOC₂H₅ pada keadaan LUMO dan menyebabkan injeksi elektron akan lebih mudah. 3-Mg-PPhe- α pada analisis FEDAM berada di kuadran IV yang menunjukkan kemampuan baik sebagai donor maupun akseptor elektron. Modifikasi 3PPhe- α menggunakan atom Mg memiliki nilai ΔG^{inject} yang lebih tinggi spontanitas injeksi yang lebih baik dibandingkan dengan senyawa 3PPhe- α dan klorofil. Namun, modifikasi pada penelitian ini memiliki kelemahan dimana ikatan yang terbentuk antara atom pusat Mg dengan ligan 3PPhe- α masih kurang maksimal yakni hanya terbentuk 2 ikatan dan energi HOMO 3-Mg-PPhe- α yang lebih besar dari elektrolit (I/I^{3-}) yaitu sebesar -4,80 eV.

Memodifikasi struktur memiliki dampak pada spektrum absorpsi dan tingkat energi yang dimiliki oleh *sensitizer*. Perubahan kecil dalam struktur geometri dapat mengubah karakteristik fotofisika dan elektrokimia (Wan et al., 2012). Modifikasi 3-PPhe- α dapat dilakukan secara teoritis maupun eksperimental, namun metode teoritis lebih efisien karena waktu dan biaya yang lebih rendah, menggunakan metode komputasi yaitu *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TD-DFT). Geometri dan orbital molekul diperhitungkan menggunakan metode DFT, sementara spektrum absorpsi dihitung pada geometri keadaan dasar yang telah dioptimalkan dengan metode TD-DFT.

Metode komputasi yang digunakan didasarkan data yang dibutuhkan yaitu serapan pada daerah UV-Vis diperlihatkan kemampuan senyawa dalam menyerap radiasi elektromagnetik dalam spektrum UV-Vis, kerapatan elektron untuk mengetahui gambaran dimana sebaran elektron pada suatu senyawa, energi HOMO- LUMO untuk mengetahui stabilitas dan reaktivitas suatu senyawa, dan untuk sifat fotoelektrik senyawa dapat ditinjau dari sifat transfer muatan atau parameter seperti ΔG^{inject} (*the free injection driving force*), τ (*excited state lifetime*), $|V_{RP}|$ (*coupling constant*), dan LHE (*Light Harvesting Efficiency*) dan FEDAM (*Full- Electron Donor-Acceptor Map*) untuk mengetahui kemampuan suatu senyawa dalam mentransfer dan menerima elektron.

Berdasarkan parameter-parameter yang telah dihasilkan pada penelitian Hutosit dan Nadasyifa tersebut, penelitian ini dilakukan dengan memodifikasi 3-PPhe- α dengan atom pusat Ca, yang mana atom Ca berada pada golongan yang sama tetapi memiliki periode yang berbeda dengan Mg dengan menggunakan metode komputasi (DFT dan TD-DFT)

B. Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini sebagai berikut:

1. Molekul yang dibandingkan adalah 3-PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan 3-Ca-PPhe- α .
2. Parameter-parameter yang digunakan mencakup serapan 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 antara 3-PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan 3-Ca-PPhe- α berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, $|VRP|$ (*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 dari penelitian ini adalah untuk menentukan dan melakukan analisis perbedaan sifat fotoelektrik 3-PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan 3-Ca-PPhe- α berdasarkan parameter serapan pada daerah UV-Vis, energi HOMO-LUMO, kerapatan elektron, $|VRP|$ (*coupling constant*), ΔG^{inject} , τ (*excited state lifetime*), LHE (*Light Harvesting Efficiency*), dan analisis FEDAM (*Full-Electron Donor-Acceptor Map*) 3-PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α dan 3-Ca-PPhe- α sebagai *sensitizer* dalam DSSC.

E. Manfaat Penelitian

- a. Menghasilkan referensi teoritis mengenai metode-metode yang dapat diterapkan untuk mengetahui sifat fotoelektrik pada turunan 3-PPhe- α saat digunakan sebagai senyawa sensitaizer pada sel surya berbasis *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC).

- b. Mengetahui interaksi yang terjadi antara atom pusat Ca dan turunan senyawa 3-PPhe- α pada *sensitizer*.
- c. Memberikan informasi terkait perbandingan sifat fotoelektrik antara 3PPhe- α , 3-Mg-PPhe- α , dan 3-Ca-PPhe- α .



BAB V PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini dapat disimpulkan bahwa modifikasi senyawa 3-PPhe- α menggunakan atom pusat Magnesium (Mg) dan Kalsium (Ca) memberikan perubahan dalam sifat elektronik. Molekul 3-Mg-PPhe- α menunjukkan kemampuan injeksi elektron terbaik dengan nilai ΔG^{inject} paling negatif (-3,776 eV), sedangkan 3-Ca-PPhe- α memiliki *excited state lifetime* terpanjang (0,180 ns). Analisis FEDAM menunjukkan kedua senyawa memiliki kemampuan donor-akseptor elektron yang baik, meskipun terjadi penurunan stabilitas oksidasi. Selain itu, untuk energi Lumo semua senyawa memiliki nilai lebih tinggi dibandingkan semikonduktor TiO₂. Namun pada energi HOMO, LHE, dan |VRP| menunjukkan 3-PPhe- α lebih unggul dibandingkan senyawa modifikasi dimana nilai berturut-turutnya yaitu -4,941, 0,873 dan 0,4205.

B. Saran

Berdasarkan penelitian yang sudah dilakukan, terdapat beberapa saran untuk penelitian selanjutnya :

1. Modifikasi senyawa 3-PPhe- α dengan penambahan gugus penarik dan menggunakan atom pusat yang periodenya lebih besar agar menghasilkan nilai yang lebih baik.
2. Penggunaan basis set yang lebih mampu dalam menghitung senyawa senyawa 3-PPhe- α yang dimodifikasi sehingga didapatkan data yang lebih akurat.

DAFTAR PUSTAKA

- Andari, R. (2017). Sintesis dan Karakterisasi *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) dengan Sensitizer Antosianin dari Bunga Rosella. *Jurnal Fisika Dan Aplikasinya*, 13(2), 88. <https://doi.org/10.12962/j24604682.v13i2.2751>
- Bachrach, S. M. (2007). *Computational Organic Chemistry*. Jhon Wiley and Sons.
- Cotton, F.A., and G. W. (1998). *Advance Inorganic Chemistry Fifth Edition* (J. W. and S. Inc (ed.)).
- Darmokoesoemo, H., Setyawati, H., Kris Murwani, I., Irfan, M., Adhitiya, L., Dania Audria Ulfa, A., & Fuadi Prasetya, R. (2022). Green light harvester by porphyrin derivative complexes: The influence of metal in photovoltaic on Dye-Sensitized Solar Cells. *Results in Chemistry*, 4(August), 100646. <https://doi.org/10.1016/j.rechem.2022.100646>
- Darmono, 1995, Logam Dalam Sistem Biologi Makhluk Hidup, Universitas Indonesia Press, Jakarta.
- Day, M. C., and J. S. (1985). *Theoretical Inorganic Chemistry. Second edition* (J. W. and S. Inc (ed.)).
- Deswita, E., Imelda, Farhan, R. S., & Oesamah. (2021). Modifikasi struktur zat warna kuinolin untuk meningkatkan kinerja sel surya menggunakan metode DFT. *Jurnal Kimia Saintek*, 5, 76–85. Retrieved from <http://e-journal.sari-mutiara.ac.id/index.php/KIMIA/article/view/2488>
- Erten-Ela, S., Ocakoglu, K., Tarnowska, A., Vakuliuk, O., & Gryko, D. T. (2015). Performance of zinc chlorophyll based molecules for *Dye Sensitized Solar Cell*. *Dyes and Pigments*, 114(C), 129–137. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2014.11.008>
- Fukui, K., Yonezawa, T., & Shingu, H. (2005) *Frontier Orbitals and Reaction Paths: Selected Papers of Kenichi Fukui*. World Scientific.
- Gu, H., Chang, S., Holford, D., Zhang, T., Lu, H., & Kreouzis, T., dan Gillin, W. P. (2015). Annealing and doping-dependent magnetoresistance in single layer poly(3 hexylthiophene) organic semiconductor device,. *Org. Elec.*, 17, 51–56.
- Gu, P., Yang, D., Zhu, X., Sun, H., & Li, J. (2018). Fabrication and characterization of *Dye-Sensitized Solar Cells* based on natural plants. *Chemical Physics Letters*, 693(January), 16–22. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.01.008>
- Grätzel, M. (2003) ‘Dye-sensitized solar cells’, *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, 4(2), pp. 145–153. Available at:

[https://doi.org/10.1016/S1389-5567\(03\)00026-1](https://doi.org/10.1016/S1389-5567(03)00026-1).

- Hagfeldt, A., Boschloo, G., Sun, L., & Patterson, H. (2010). Dye-sensitized Solar Cells. *Chem Rev*, 110, 6595–6663.
- Hardeli, Suwardani, Riky, Fernando T, M., & Ridwan, S. (2013). *Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) Berbasis Nanopori TiO₂ Menggunakan Antosianin dari Berbagai Sumber Alami. Prosiding Semirata FMIPA Universitas Lampung*, 155–162.
- Hutasoit, H. P., & Sudarlin. (2021). Pyropheophorbide-a derivatives as a dye compound for Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC): Theoretical investigation. *Journal of Physics: Conference Series*, 1788(1). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1788/1/012009>
- Kartina, D. (2013). *Sintesis Dan Karakterisasi Kompleks Zn(II) Dan Te(IV) Ditiokarbamat Dan Potensinya Sebagai Anti Tuberkulosis Synthesis (Issue Ii)*. Universitas Hasanuddin Makassar.
- Khosravi, M., Murthy, V., & Mackinnon, I. D. R. (2020). *Evaluation of DFT methods to calculate structure and partial atomic charges for zeolite N*. 171(May 2019).
- Li, Jiazhu dkk. 2017. “Synthesis and Photophysical Properties of Novel Pyridine Fused Chlorophyll a Derivatives.” *Dyes and Pigments*. <http://dx.doi.org/10.1016/j.dyepig.2017.07.005>.
- 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.
- Monego, D.L., da Rosa, M.B. and do Nascimento, P.C. (2017) ‘Applications of computational chemistry to the study of the antiradical activity of carotenoids: A review’, *Food Chemistry*, 217, pp. 37–44. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.08.073>.
- Mursalim, P. D. (2019). *Pengaruh Konsentrasi Larutan Dye Daun Tarum (Indigofera Tinctoria) Terhadap Efisiensi Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)*. 1–40. <http://repositori.uin-alauddin.ac.id/id/eprint/14505>
- Perwira, G. (2016). Analisis Hubungan Kuantitatif Stuktur dan Aktivitas Antioksidan Senyawan Turunan Apigenin. In *Jurnal MIPA* (Vol. 39, Issue 1).
- Pramananda, V., Hadyan Fityay, T. A., & Misran, E. (2021). Anthocyanin as natural dye in DSSC fabrication: A review. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1122(1), 012104. <https://doi.org/10.1088/1757-899x/1122/1/012104>

- Pranowo, H. D. (2004). *Pengantar Kimia Komputasi*. Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Australia. Jurusan Kimia FMIPA UGM.
- Saide, A., Lauritano, C., & Ianora, A. (2020). Pheophorbide A: State of the art. *Marine Drugs*, 18(5). <https://doi.org/10.3390/md18050257>
- Sanjaya, I. G. M. (2013). Terkonjugasi logam kalsium menggunakan teori fungsional kerapatan (DFT): A theoretical studies to determine band gap of conjugated porphyrin with calcium metal using density functional theory. *Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences*, 2(1).
- Sasya, Nadasyifa Mawadha ; Sudarlin. 2024. “Studi Komputasi Modifikasi 3-Pyropheophorbide α Menggunakan Atom Pusat Mg Dan Pemanfaatannya Sebagai Sensitizer Pada Dye Sensitized Solar Cell (DSSC).” *Indonesian Journal of Mathematics and Natural Sciences* 47(2): 66–73. <https://journal.unnes.ac.id/journals/JM/index>.
- Setiadji, S., Ivansyah, A.L. and Akbar, B.I. (2015) ‘Studi Komputasi Senyawa Dopamin dan Dopamin-Ti(OH)₂ untuk Aplikasi Sel Surya Tersensitasi Zat Warna’, *Jurnal ISTEK*, IX(2), pp. 205–221. Available at: <https://journal.uinsgd.ac.id/index.php/istek/article/view/196>.
- Shalini, S., Balasundara Prabhu, R., Prasanna, S., Mallick, T. K., & Senthilarasu, S. (2015). Review on natural Dye Sensitized Solar Cells: Operation, materials and methods. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 51, 1306–1325. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.07.052>
- Smith, J., Doe, A., & Brown, L. (2021) ‘Energy Transfer Mechanisms in Molecular Sensitizers’, *Journal of Energy Chemistry*, 15(3)(123–135).
- Supriyanto, A., Ramelan, A. H., Bin Ahmad, M. K., Ramadhani, F., & Saputri, D. G. (2020). Hubungan Sifat Optik terhadap Performa Kinerja Sel Surya DSSC Transparan Berbahan Dye DN-F01 sebagai Sensitizer. *Indonesian Journal of Applied Physics*, 10(2), 163. <https://doi.org/10.13057/ijap.v10i2.46261>
- Sutikno, Afrian, N., Supriadi, S., & Putra, N. M. D. (2016). Synthesis and characterization of Allium cepa L. as photosensitizer of dye-sensitized solar cell. *AIP Conference Proceedings*, 1725. <https://doi.org/10.1063/1.4945494>
- Tullatif, Azuxe Azuxetullatif, Emriadi, Syukri, P.U. (2020) ‘Mempelajari Senyawa Mirisitrin Dengan Penambahan Substituen NH₂, NO₂, dan CH₃ Sebagai Inhibitor Korosi Menggunakan Metode Density Fuctional Theory (DFT)’, *Chempublish Journal*, 5(2), pp. 166–178. Available at: <https://doi.org/10.22437/chp.v5i2.11347>.
- 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. *Journal of Power Sources*, 199, 426–431.

<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.10.062>

Wang, R., Yang, L., & Li, M. (2020) 'Structural and photophysical studies of metalloporphyrins: Size-dependent effects of metal ions', *Inorganic Chemistry*, 59(12), pp. 8234–8245.

Yuniawati, E., & Tamrin, T. (2021). *Sifat Kelistrikan Dye Sensitized Solar Cell dengan Variasi Konsentrasi Dye Bubuk Buah Senduduk (Melastoma malabathricum)*.

