

# STUDI KOMPUTASI KARAKTERISTIK OPTIK CYANIDIN SEBAGAI SENSITISER DENGAN PELARUT ETHANOL, AIR, DAN ACETONITRILE

Elvan Yuniarti<sup>1\*</sup>, Ai Nurlaela<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Fisika FST Universitas Islam Negeri Sultan Syarif Hidayatullah Jakarta

<sup>2</sup>Program Studi Fisika Tarbiyah FITK Universitas Islam Negeri Sultan Syarif Hidayatullah Jakarta

\*E-mail korespondensi: [elvan.yuniarti@uinjkt.ac.id](mailto:elvan.yuniarti@uinjkt.ac.id)

## ABSTRACT

Cyanidin molecule is a type of anthocyanin that has the potential as a sensitizer for dye sensitiser solar cell (DSSC). This molecule is contained in blueberries, grapes, raspberries, and others. This study aims to determine cyanidin molecules' molecular orbitals and HOMO-LUMO energy levels with ethanol, water, and acetonitrile. In addition, this study aims to determine the optical properties of cyanidin dye with ethanol, water, and acetonitrile as solvents. The method used in this research is density functional theory (DFT) and TD-DFT/UB3LYP using Orca.2.02 and quantum espresso applications. The results obtained in the molecular orbitals of cyanidin with various solvents (ethanol, water, acetonitrile) obtained energy gap: 2.8 eV, 2.4 eV, and 3.2 eV. The results of UV-Vis absorption spectra (ethanol, water, acetonitrile) have the same wavelength (158.80 nm – 271.10 nm, 362.10 nm, 453.60 nm) but the intensity is different. Likewise the results of the infra red spectra (1138  $\text{cm}^{-1}$  – 1486  $\text{cm}^{-1}$ ), and the Raman spectra (1141  $\text{cm}^{-1}$  – 1606  $\text{cm}^{-1}$ ) for different solvents have almost the same wave number.

**Keywords:** Cyanidin, DFT-TDDFT, Energy Gap, Infrared, Raman, UV-Vis.

## ABSTRAK

Molekul cyanidin merupakan salah satu jenis anthocyanin yang memiliki potensi sebagai sensitiser untuk dye sensitiser solar cell (DSSC). Molekul ini banyak terkandung di dalam blueberry, anggur, raspberry dan lain-lain. Penelitian ini bertujuan mengetahui molekular orbital dan tingkat energi HOMO-LUMO dari molekul cyanidin dengan ethanol, air dan acetonitrile. Selain itu, penelitian ini bertujuan mengetahui sifat optik dye cyanidin dengan pelarut ethanol, air dan acetonitrile. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah menggunakan density functional theory (DFT) dan TD-DFT/UB3LYP menggunakan aplikasi quantum espresso dan Orca.2.02. Hasil yang diperoleh pada molekular orbital pada cyanidin dengan berbagai pelarut (ethanol, air, acetonitril) memperoleh energi gap: 2,8 eV, 2,4 eV dan 3,2 eV. Hasil spektra absorpsi UV-Vis (ethanol, air, acetonitrile) memiliki panjang gelombang (158,80 nm – 271,10 nm, 362,10 nm, 453,60 nm) yang sama hanya intensitasnya berbeda. Begitu juga untuk hasil spektra infra red (1138  $\text{cm}^{-1}$  – 1486  $\text{cm}^{-1}$ ), dan spektra raman (1141  $\text{cm}^{-1}$  – 1606  $\text{cm}^{-1}$ ) untuk pelarut berbeda dihasilkan spektrum transisi dengan bilangan gelombang yang hampir sama.

**Kata kunci:** Cyanidin, DFT-TDDFT, Energi Gap, Infrared, Raman, UV-Vis.

Diterima 11-11-2022 | Disetujui 06-02-2023 | Dipublikasi 31-03-2023

## PENDAHULUAN

Kebutuhan energi listrik semakin hari semakin meningkat, pemenuhan energi listrik yang berasal dari batu bara, gas dan minyak banyak menghasilkan polusi CO<sub>2</sub>. Oleh karena itu diperlukan energi alternatif yang ramah lingkungan. Salah satunya sumber energi

listrik berasal dari dye sensitised solar cell (DSSC). DSSC menghasilkan listrik dengan efisiensi kurang dari 11% [1]. Oleh karena itu perlu terus diteliti agar dapat memaksimalkan nilai efisiensinya.

DSSC memiliki beberapa komponen penting yaitu material semikonduktor, sensitiser (dye), elektrolit dan kaca konduktif

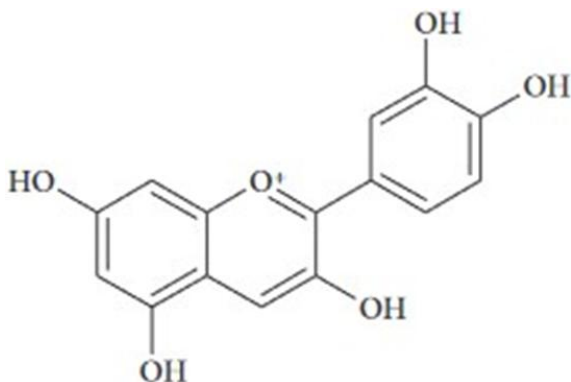
Penelitian *dye* sebagai *sensitizer* masih terus dikembangkan. *Dye* dapat dihasilkan dari bahan alam dan sintetik. Salah satu senyawa yang banyak terdapat dalam bahan alam adalah *anthocyanin*. *Antocyanin* memiliki beberapa senyawa aktif *cyanidin*.

Penelitian *cyanidin* sebagai bahan alam telah dilakukan baik secara teori maupun eksperimen. Penelitian sebelumnya telah mengkaji secara teori molekul *cyanidin 3 monoglucoside*, *patunidin 3 glucoside*, *malvidin 3 monoglucoside*. Molekul- molekul tersebut diteliti energi eksitasinya pada fase gas (2,565 eV; 2,538 eV; 2,537 eV). Molekul molekul tersebut memiliki panjang gelombang 438,44 nm, 488,46 nm, dan 488, 64 nm [2].

## TINJAUAN PUSTAKA

### *Dye (Sensitizer)*

*Sensitizer* pada DSSC berfungsi sebagai penyerap cahaya dan mengeksitasi elektron pada pita konduksi. Selanjutnya elektron akan terinjeksi ke pita konduksi pada material semikonduktor (TiO<sub>2</sub>). Bahan *sensitizer* dapat diperoleh dari *ruthenium* dan *porphyrin* yang memiliki efisiensi yang tinggi. Namun kedua bahan tersebut tidak ramah lingkungan dan mensintesisnya memerlukan prosedur yang canggih. Oleh karena itu diperlukan alternatif *sensitizer* yang ramah dan mudah mensintesisnya. Saat ini telah banyak dikembangkan *sensitizer* yang handal, efisien dan ramah lingkungan. Salah satunya dari bahan organik yaitu *cyanidin* [3].



**Gambar 1.** Struktur molekuler *cyanidin* [3].

Ciri -ciri *sensitizer* ideal memiliki kepekaan yang dapat menyerap semua warna tepat dibawah ambang batas 920 nm dan dapat menempel kuat pada bahan semikonduktor oksida. Hal ini menyebabkan elektron dengan mudah disuntikan ke permukaan semikonduktor oksida. Selain itu memiliki koefisien ekstingsi yang tinggi, stabil dalam reaksi reaksi oksidasi dan reduksi dengan elektrolit. *Sensitizer* yang baik, memiliki *state* LUMO yang lebih negatif disbanding pita konduksi pada semikonduktor Oksida. Selain itu memiliki *state* HOMO lebih positif dari potensial redoks elektrolit [4].

Pada saat mensintesis *sensitizer* dari bahan alam biasanya menggunakan berbagai macam pelarut antara lain *ethanol* [5], air[6], *acetonitrile*, dan *methanol* [7]. Oleh karena itu pada penelitian ini mengkaji secara teori pengaruh beberapa pelarut terhadap molekul *dye cyanidin* yang belum banyak dilakukan.

### *Density Functional Theory (DFT)*

Pada penelitian ini menggunakan perhitungan untuk sifat elektronik berdasarkan teori DFT. Teori DFT menjelaskan bahwa pada material interaksi-nteraksi inti dan elektron dinyatakan dalam konfigurasi elektronik. Konfigurasi elektronik untuk elektron banyak dinyatakan dengan persamaan Schrodinger (1) dan (2) berikut:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{inti} \frac{1}{M} \nabla^2 - \frac{1}{2} \sum_{elektron} \nabla^2 + \sum_{inti} \frac{ZZ'}{|R-R'|} - \sum_{inti-elektron} \frac{Z}{|r-R|} + \sum_{elektron} \frac{1}{|r-r'|} = \hat{H} \quad (2)$$

### *Pendekatan Born-Oppenheimer*

Pada pendekatan Born-Oppenheimer menyederhanakan persamaan dengan menghilangkan komponen Hamiltonian untuk energi kinetik dan energi potensial pada ion inti dengan asumsi interaksi gaya coulomb pada elektron dan inti sama besar, akibatnya perubahan momentum pada inti dan elektron sama besar. Namun karena massa inti jauh lebih besar dibanding elektron maka inti

bergerak secara stationer. Maka persamaan (3) digunakan sebagai persamaan dalam keadaan dasar. Pendekatan ini komponen Hamiltonian hanya ditentukan oleh energi kinetik dan potensial pada interaksi-interaksi elektron. Potensial yang disebabkan oleh gaya coulomb dinyatakan sebagai potensial eksternal.

$$-\frac{1}{2} \sum_{\text{elektron}} \nabla^2 - \sum_{\text{inti-elektron}} \frac{Z}{|r-R|} + V_{\text{ext}} = \hat{H} \quad (3)$$

### Teori Hohenberg-Kohn

Fungsi gelombang banyak partikel dapat dinyatakan sebagai fungsi densitas elektron. Teori ini menyatakan pada keadaan dasar fungsi gelombang dinyatakan sebagai fungsional densitas seperti pada persamaan (4):

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \Rightarrow \psi[n_0(r)] \quad (4)$$

Dengan persamaan energi keadaan dasar menjadi persamaan (5):

$$E[n_0] = \psi[n_0] \hat{H} \psi[n_0] \leq E[n'] = \psi[n'] \hat{H} \psi[n'] \quad (5)$$

### Pendekatan Kohn Sham

Persamaan energi total merupakan fungsi dari kerapatan, dinyatakan sebagai persamaan (6) berikut:

$$\left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \int \frac{n[r']}{|r-r'|} d^3r' + \frac{\partial E_{xc}[n]}{\partial n(r)} + v_{\text{ext}} \right) \phi_i[n] = \lambda \phi_i[n] \quad (6)$$

Dalam menyelesaikan persamaan Kohn Sham (KS) diperlukan kerapatan elektron total. Kerapatan elektron total diperoleh dengan menjumlahkan solusi persamaan kuadrat. Oleh karena itu untuk memperoleh persamaan KS digunakan metode menghitung kerapatan elektron secara siklus secara *self consistent field* (SCF) sehingga diperoleh nilai yang konsisten. Persamaan ini diperoleh nilai kerapatan dan energi total minimum pada keadaan dasar. [8].

## METODE PENELITIAN

### Waktu dan Tempat

Penelitian ini dilakukan dari Bulan Januari sampai Juli 2022 di Laboratorium Terpadu PLT UIN Syarif Hidayatullah.

### Alat dan Bahan

Alat dan bahan komputasi: PC Software Avogadro, ORCA, dan quantum espresso.

### Metode Penelitian

Metode yang dilakukan berupa metode komputasi DFT dan *time-dependent density functional theory* (TD-DFT) dengan fungsional B3LYP, Adapun langkah langkah penelitian:

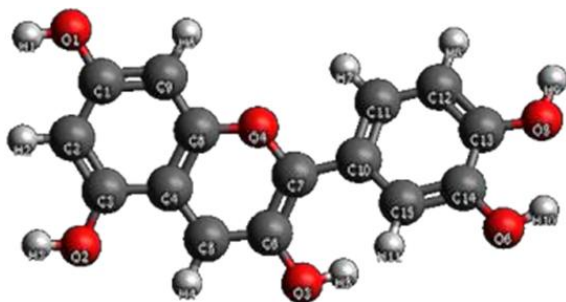
1. Memodelkan molekul *cyanidin* yang diperoleh dari RCSB PDB dengan program Avogadro.
2. Mengoptimasi model molekul *cyanidin* dengan metode DFT.
3. Perhitungan molekul orbital dengan variasi pelarut: *ethanol*, air dan *acetonitrile* dengan metode DFT.
4. Perhitungan UV-Vis dengan metode TD-DFT.
5. Perhitungan spektrum IR dan spektrum Raman dengan menggunakan metode DFT.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil yang diperoleh pada penelitian ini berupa gambaran struktur molekul cyanidin yang telah dioptimasi dengan metode DFT. Hasil lain yang diperoleh menggambarkan level energi HOMO-LUMO pada molekul orbital *cyanidin* untuk pelarut *cyanidin* 1, air dan acetonitrile. Pada penelitian ini juga membahas tentang sifat optik dari cyanidin dengan ketiga pelarut tersebut. Adapun sifat optiknya berupa pola absorpsi gelombang uv-vis, pola transmitansi spektrum infra red dan pergeseran hamburan spektrum raman.

## Hasil Optimasi Struktur *Cyanidin*

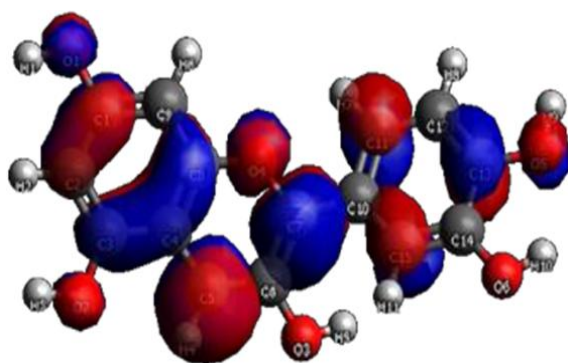
Struktur *cyanidin* terdiri dari 13 atom carbon, 6 atom oksigen dan 11 buah atom hidrogen. Hasil optimasi geometri dapat dilihat pada Gambar 2. Pada gambar tersebut atom carbon ditunjukkan dengan atom berwarna hitam, oksigen ditunjukkan dengan atom berwarna merah dan atom hidrogen ditunjukkan dengan atom berwarna putih.



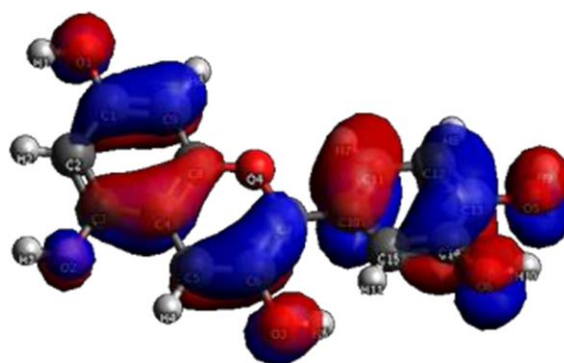
Gambar 2. Molekul *cyanidin* teroptimasi.

## Analisis Molekular Orbital *Cyanidin*

Penelitian ini berhasil menghitung dan menentukan molekul orbital *cyanidin* dengan variasi pelarut *ethanol*, air, dan *acetonitrile*. Orbital molekul HOMO dan LUMO dari molekul *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* dapat dilihat pada Gambar 3, 4, dan 5. Level HOMO menunjukkan tingkat energi potensial untuk dapat mendonorkan elektron sedangkan level LUMO menentukan tingkat energi potensial untuk menangkap elektron (akseptor) [9].



LUMO -3,148 eV



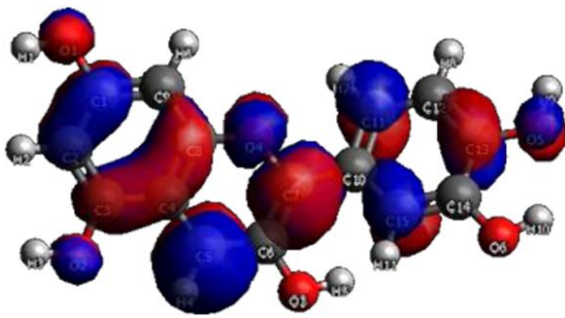
HOMO -5,989 eV

Gambar 3. Molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut *ethanol*.

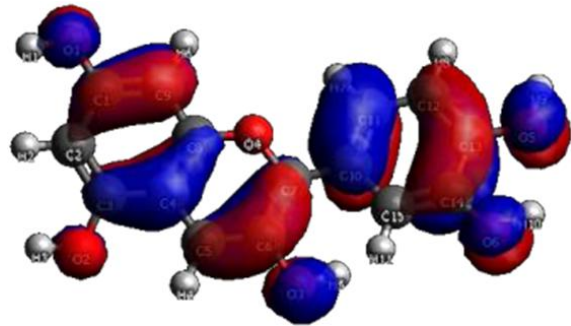
Molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* memiliki energi HOMO -5,989 eV dan memiliki energi LUMO -3,148 eV (Gambar 3). Energi gab untuk molekul *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* sebesar 2,841 eV.

Molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut air dapat dilihat pada Gambar 4. Pada molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut air memiliki energi HOMO -5,893 eV lebih tinggi dibanding energi HOMO pada *cyanidin* dengan pelarut *ethanol*. Sedangkan energi LUMO *cyanidin* dengan pelarut air sebesar -3.53 eV lebih rendah dibanding energi LUMO *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* dan pelarut *acetonitril*. Energi gab molekul *cyanidin* dengan pelarut air sebesar 2,363 eV.

Penelitian ini juga dapat menentukan molekul orbital dari *cyanidin* untuk pelarut *acetonitrile*. Molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* dapat dilihat pada Gambar 5. Energi HOMO molekul *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* memiliki energi -6,405 eV. Energi HOMO *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* memiliki energi paling rendah dibanding energi HOMO *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* dan air. Energi LUMO yang dimiliki molekul *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* sebesar -3.220 eV. Hal ini terlihat bahwa energi LUMO *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* memiliki energi lebih tinggi dari energi LUMO air dan lebih rendah dari Energi LUMO *cyanidin* dengan pelarut *ethanol*. Molekul *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* memiliki energi gab sebesar 3,185 eV.

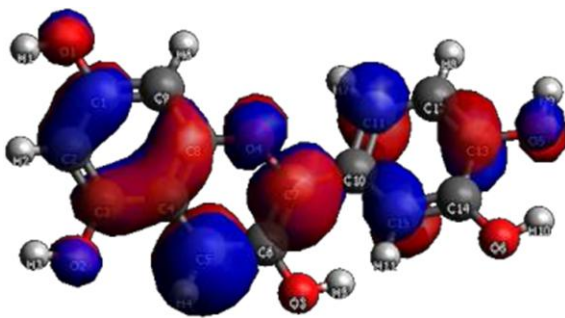


LUMO -3,530 eV

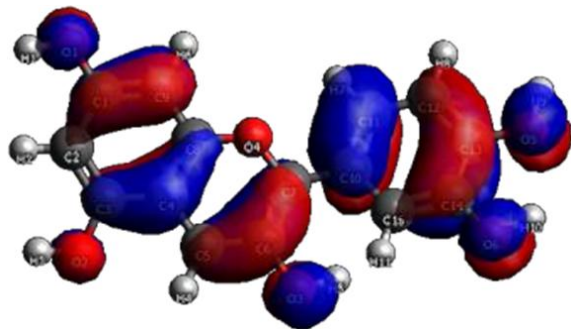


HOMO -5,893 eV

Gambar 4. Molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut air.



LUMO -3,220 eV



HOMO -6,405 eV

Gambar 5. Molekul orbital *cyanidin* dengan pelarut *ethanol*.

Tabel 1. Energi molekul orbital *cyanidin*.

Pelarut	Energi HOMO (eV)	Energi LUMO (eV)	Energi Gap (eV)
<i>Ethanol</i>	-5,989	-3,148	2,841
Air	-5,893	-3,530	2,363
<i>Acetonitrile</i>	-6,405	-3,220	3,185

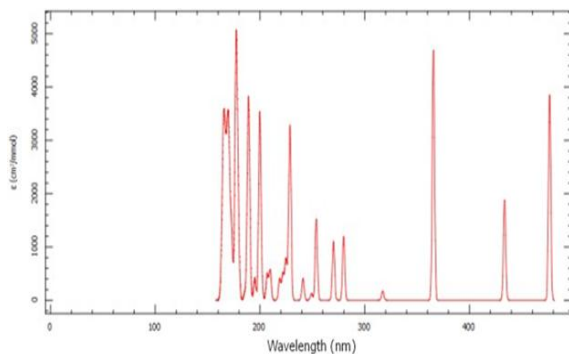
*Dye* yang digunakan sebagai sensitiser solar sel agar efisien sebaiknya memiliki level energi LUMO terendah lebih tinggi dari pita konduksi fotoelektroda setidaknya 0,2 eV lebih tinggi. Jika kita menggunakan  $\text{TiO}_2$  yang memiliki energi pita konduksi sebesar -4,0 eV, maka kita sebaiknya menggunakan *dye* yang memiliki energi LUMO lebih tinggi dari -4,0 eV. Hal ini agar dapat terjadi injeksi elektron yang efisien. Demikian juga untuk orbital molekul HOMO harus berada dibawah tingkat energi iodium atau triiodida (-4,8 eV) untuk meregenerasi secara efektif dari *dye* teroksidasi [10]. Dari perhitungan secara komputasi *dye*

*cyanidin* untuk pelarut *ethanol*, air dan *acetonitrile* cukup baik untuk dijadikan sebagai sensitiser solar sel.

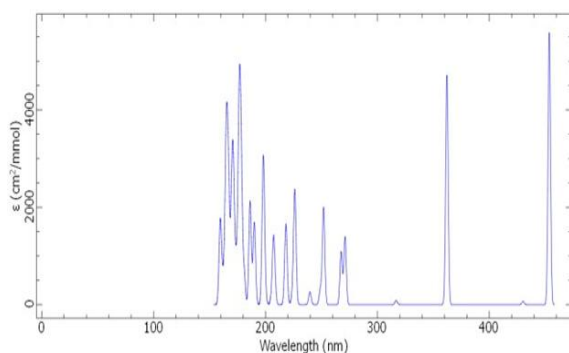
#### Hasil analisis absorpsi spektra UV-VIS

Perhitungan absorpsi spektra UV-VIS pada molekul *cyanidin* dengan pelarut *ethanol*, air dan *acetonitrile* dapat dilihat pada Gambar 6. Hasil spektrum menunjukkan bahwa molekul *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* berada pada serapan panjang gelombang 158,80 nm sampai 271, 10 nm dengan puncak tertinggi berada pada panjang gelombang 176,70 nm berada pada daerah ultra violet. Puncak spektrum tertinggi tersebut memiliki intensitas ekstingsi sebesar  $4500 \text{ cm}^2/\text{mmol}$  (0,306 arb). Puncak spektrum absorpsi lain berada pada panjang gelombang 362,10 nm dengan intensitas ekstingsi sebesar  $4480 \text{ cm}^2/\text{mmol}$  (0.444 arb). Spektrum tertinggi lain berada pada panjang

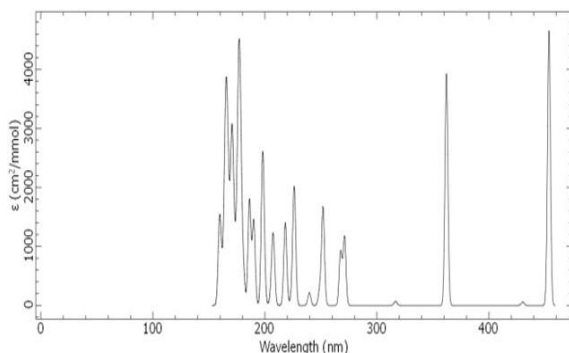
gelombang 453,60 nm dengan nilai ekstingsi 4750  $\text{cm}^2/\text{mmol}$  (0,526 arb).



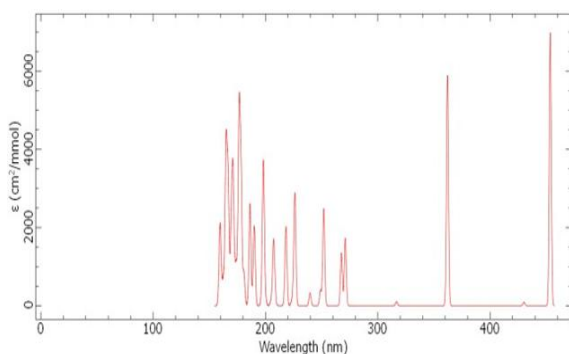
**a. Tanpa pelarut**



**b. Cyanidin dengan pelarut ethanol**



**c. Cyanidin dengan pelarut air**



**d. Cyanidin dengan pelarut acetonitrile**

**Gambar 6.** Spektra UV-VIS cyanidin tanpa pelarut dan pelarut *ethanol*, air dan *acetonitrile*.

Spektrum absorpsi UV-VIS pada molekul *cyanidin* dengan pelarut air puncak-puncak spektra terdapat pada jangkauan 158,80 nm sampai 271,10 nm. Puncak intensitas tertinggi untuk daerah ultraviolet berada pada panjang gelombang 176,70 nm dengan intensitas ekstingsi 5000  $\text{cm}^2/\text{mmol}$ . Puncak spektrum juga terdapat pada panjang gelombang 362,10 nm dengan intensitas ekstingsi sebesar 4800  $\text{cm}^2/\text{mmol}$  (0,444 arb). Puncak spektrum tertinggi berada pada panjang gelombang 453,60 nm dengan intensitas tertinggi sebesar 5700  $\text{cm}^2/\text{mmol}$  (0,526 arb).

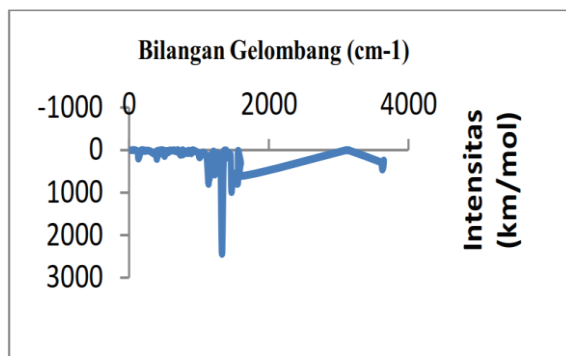
Spektrum absorpsi UV-VIS pada molekul *cyanidin* untuk pelarut *acetonitrile* memiliki puncak-puncak spektrum berada pada panjang gelombang yang sama dengan *cyanidin* untuk pelarut *ethanol* dan pelarut air. Namun intensitas ekstingsi memiliki nilai yang berbeda. Pada daerah ultra violet berada pada panjang gelombang 158,80 nm sampai 271,10 nm. Puncak tertinggi berada pada panjang gelombang 176,70 nm memiliki intensitas ekstingsi sebesar 5000  $\text{cm}^2/\text{mmol}$  (0,305 arb) Terdapat serapan di panjang gelombang 362,10 nm sebesar 4800  $\text{cm}^2/\text{mmol}$  (0,444 arb). Puncak tertinggi terdapat pada panjang gelombang 453,60 nm dengan intensitas ekstingsi 5600  $\text{cm}^2/\text{mmol}$  (0,526 arb).

Dalam molekul *cyanidin* mengandung gugus fenol, spektrum penyerapan UV fenol dalam sikloheks-ane, dua pita yang berasal dari transisi  $\rightarrow$  diamati: pita primer pada 210 nm (pita 1La) dan pita sekunder pada 269 nm (pita 1Lb). Dalam *ethanol*, ini bergeser ke 218,5 nm dan 271 nm, sebagai akibat dari keterlibatan gugus hidroksil fenol dalam berbagai bentuk ikatan hidrogen. Fenol tersubstitusi memberikan posisi pita yang sama dan intensitas seperti yang diamati untuk fenol [11].

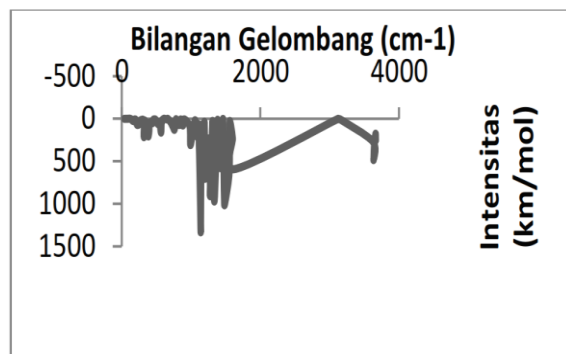
### Hasil Analisis Spektrum Infrared

Hasil transmittan spektrum *infrared* pada *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* (Gambar 7 (a)) memiliki jangkauan bilangan gelombang antara 1138  $\text{cm}^{-1}$  sampai 1486  $\text{cm}^{-1}$ . Spektrum tersebut menunjukkan adanya ikatan C-O di

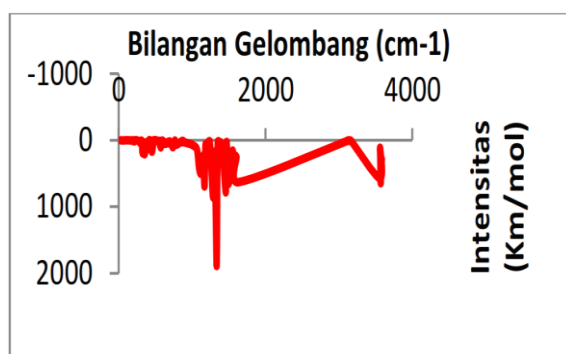
1152  $\text{cm}^{-1}$  (spektrum IR kol merah), 1065  $\text{cm}^{-1}$  (spektra IR beras merah) pada spektrum 1017  $\text{cm}^{-1}$  (spektrum IR buah naga) [12]. Adanya mode vibrasi ikatan skeletal C-C (1300  $\text{cm}^{-1}$  – 700  $\text{cm}^{-1}$ ), *gem-Dimethyl* “iso” - (*doublet*) (1385–1380/1370–1365  $\text{cm}^{-1}$ ) dan *methyl* C-H *asym./sym. bend* 1470–1430/1380–1370  $\text{cm}^{-1}$ . Dengan puncak intensitas tertinggi di frekuensi 1330,38  $\text{cm}^{-1}$  dengan intensitas 2441,4  $\text{km/mol}$  menunjukkan mode vibrasi *methyne* C-H *bend* (1300  $\text{cm}^{-1}$  – 1330  $\text{cm}^{-1}$ ) [13].



a. *Cyanidin* dengan pelarut *ethanol*



b. *Cyanidin* dengan pelarut air



c. *Cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile*

**Gambar 7.** Spektum infrared *cyanidin* dengan pelarut *ethanol*, air dan *acetonitrile*.

Hasil perhitungan molekul *cyanidin* dengan pelarut air (Gambar 7 (b)) diperoleh nilai spektrum dengan bilangan gelombang 1141,05 sampai 1553,45  $\text{cm}^{-1}$ . Spektrum tertinggi di 1141,06  $\text{cm}^{-1}$  dengan intensitas transmisi 1309,5  $\text{km/mol}$ . Pada spektrum *cyanidin* dengan pelarut air menunjukkan adanya mode vibrasi mode vibrasi *methyne* C-H *bend* (1300  $\text{cm}^{-1}$  – 1330  $\text{cm}^{-1}$ ), mode vibrasi ikatan skeletal C-C (1300  $\text{cm}^{-1}$  -700  $\text{cm}^{-1}$ ), *gem-Dimethyl* “iso” - (*doublet*) (1385–1380/1370–1365  $\text{cm}^{-1}$ ) dan *methyl* C-H *asym./sym. bend* 1470–1430/1380–1370  $\text{cm}^{-1}$ , *methylene* C-H *bend* (1485  $\text{cm}^{-1}$ –1445  $\text{cm}^{-1}$ ).

Hasil Perhitungan untuk molekul *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* (Gambar 7 (c)) memiliki spektrum 1095,2  $\text{cm}^{-1}$  sampai 1496,05  $\text{cm}^{-1}$ . Dengan spektrum tertinggi berada pada bilangan gelombang 1330  $\text{cm}^{-1}$ . Spektrum tersebut menunjukkan adanya mode vibrasi ikatan skeletal C-C (1300  $\text{cm}^{-1}$  – 700  $\text{cm}^{-1}$ ), *gem-Dimethyl* “iso” - (*doublet*) (1385–1380/1370–1365  $\text{cm}^{-1}$ ) dan *methyl* C-H *asym./sym. bend* 1470–1430/1380–1370  $\text{cm}^{-1}$ . Dengan puncak intensitas tertinggi di frekuensi 1330,38  $\text{cm}^{-1}$  dengan intensitas 2441,4  $\text{km/mol}$  menunjukkan mode vibrasi *methyne* C-H *bend* (1300 $\text{cm}^{-1}$  – 1330  $\text{cm}^{-1}$ )

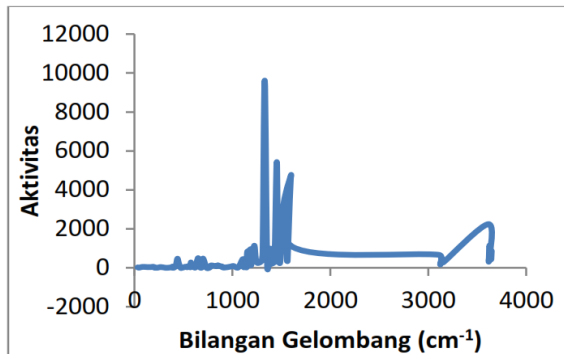
Spektrum molekul *cyanidin* untuk pelarut *ethanol*, air dan *acetonitrile* memiliki daerah spektrum yang hampir sama dan menunjukkan keberadaan gugus fungsi yang sama. Namun untuk intensitas tertinggi untuk *ethanol* dan *acetonitrile* berada pada 1330  $\text{cm}^{-1}$  yang menunjukkan mode vibrasi *methyne* C-H *bend*. Sedangkan pada pelarut air tertinggi pada 1141.05  $\text{cm}^{-1}$  menunjukkan mode vibrasi ikatan skeletal C-C.

### Hasil analisis spektrum raman

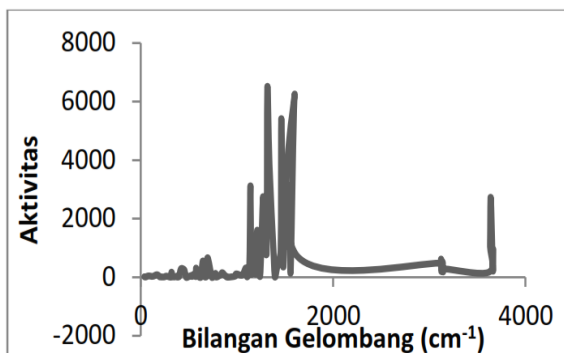
Spektrum raman (Gambar 8) yang diperoleh dari molekul *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* diperoleh puncak tertinggi pada bilangan gelombang 1330,38  $\text{cm}^{-1}$ , 1453,45  $\text{cm}^{-1}$  dan 1556,93  $\text{cm}^{-1}$ , 3617,52  $\text{cm}^{-1}$ . Pada spektrum raman dengan bilangan gelombang 1453,45

$\text{cm}^{-1}$  dan  $1164,8 \text{ cm}^{-1}$  menunjukkan  $1609 \text{ cm}^{-1}$  (*phenyl C-C*),  $1453 \text{ cm}^{-1}$  ( $\text{CH}_2$  def) [14].

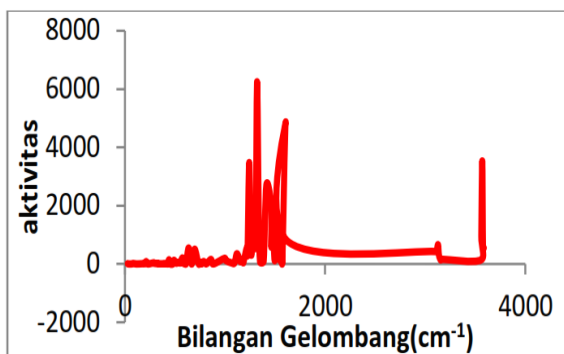
Spektrum raman pada molekul *cyanidin* dengan pelarut air diperoleh puncak spektrum  $1212 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1316 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1462,13 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1479 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1601,3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $3632,75 \text{ cm}^{-1}$ . Pada spektrum raman dengan bilangan gelombang  $1453,45$  dan  $1164,8 \text{ cm}^{-1}$  menunjukkan  $1609 \text{ cm}^{-1}$  (*phenyl C-C*),  $1453 \text{ cm}^{-1}$  ( $\text{CH}_2$  def) [15].



a. *Cyanidin* dengan pelarut *ethanol*



b. *Cyanidin* dengan pelarut air



c. *Cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile*

**Gambar 8.** Spektrum Raman pada molekul *cynidin* untuk pelarut *ethanol*, air dan *acetonitrile*.

Spektrum raman yang diperoleh dengan perhitungan pada molekul *cyanidin* dengan pelarut *acetonitrile* memiliki puncak puncak spektra  $1241,58 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1319,01 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1336,37 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1606,31 \text{ cm}^{-1}$ , dan  $3570,01 \text{ cm}^{-1}$ . Spektra tertinggi untuk molekul *cyanidin* dengan pelarut *ethanol* berada pada bilangan gelombang  $1330,38 \text{ cm}^{-1}$  dengan aktivitas  $9510,57$ . Sedangkan untuk pelarut air di panjang gelombang  $1316,62 \text{ cm}^{-1}$  dengan aktivitas  $6449,95$ . Sedangkan untuk pelarut *acetonitrile* berada di bilangan gelombang  $1319,81 \text{ cm}^{-1}$  dengan aktivitas  $6250,95$ .

## KESIMPULAN

Penelitian ini berhasil menunjukkan bahwa dari ketiga pelarut sebagai ekstraksi pada *sensitiser cyanidine* memiliki molekul orbital dengan level energi LUMO yang lebih tinggi dari foto elektroda  $\text{TiO}_2$   $-0.4 \text{ eV}$  (pelarut *ethanol*  $-3,148 \text{ eV}$ , pelarut air  $-3.530 \text{ eV}$ , pelarut *acetonitrile*  $3.220 \text{ eV}$ ). Hal ini menunjukkan bahwa sensitiser dengan pelarut tersebut baik digunakan sebagai sensitiser pada DSSC. Adapun sifat optik yang dihasilkan pada penyerapan spektrum UV-Vis berada pada daerah serapan cahaya tampak dan ultra violet ( $158,80 \text{ nm}$  –  $271,10 \text{ nm}$ ,  $362,10 \text{ nm}$ , dan  $453,60 \text{ nm}$ ). Sifat optik dari spektrum *infra red* ( $1138 \text{ cm}^{-1}$  –  $1486 \text{ cm}^{-1}$ ), dan spektrum raman ( $1141 \text{ cm}^{-1}$  –  $1606 \text{ cm}^{-1}$  untuk pelarut berbeda dihasilkan spektrum transisi dengan bilangan gelombang yang hampir sama.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Terima kasih kami sampaikan sehingga penelitian ini dapat terselenggara berkat dana Hibah penelitian pemula Pusat Penelitian dan Penerbitan (PUSLITPEN) LP2M UIN Syarif Hidayatullah Jakarta yang telah mendukung kegiatan ini.



## REFERENSI

1. Baibarac, M., Smaranda, I., Nila, A., & Serbschi, C. (2019). Optical properties of folic acid in phosphate buffer solutions: the influence of pH and UV irradiation on the UV-VIS absorption spectra and photoluminescence. *Scientific Reports*, **9**(1), 14278.
2. Imelda, E., Aziz, H., Santoni, A., & Utami, N. (2020). The modification of cyanidin-based dyes to improve the performance of dye sensitized solar cells (DSSCs). *Rasayan Journal of Chemistry*, **13**(1), 121–130.
3. Galappaththi, K., Lim, A., Ekanayake, P., & Petra, M. I. (2017). Cyanidin-based novel organic sensitizer for efficient dye-sensitized solar cells: DFT/TDDFT study. *International Journal of Photoenergy*, **2017**.
4. Andualem, A., & Demiss, S. (2018). Review on dye-sensitized solar cells (DSSCs). *Edelweiss Appli Sci Tech*, **2**, 145–150.
5. Pablo, C. C. V., Enrique, R. R., José, A. R. G., Enrique, M. P., Juan, L. H., & Eddie, N. A. M. (2016). Construction of dye-sensitized solar cells (DSSC) with natural pigments. *Materials Today: Proceedings*, **3**(2), 194–200.
6. Ammar, A. M., Mohamed, H. S., Yousef, M. M., Abdel-Hafez, G. M., Hassanien, A. S., & Khalil, A. S. (2019). Dye-sensitized solar cells (DSSCs) based on extracted natural dyes. *Journal of Nanomaterials*, **2019**.
7. Maulana, M. F., Yuniarti, E., Nurlaela, A., & Saptari, S. A. (2021). Dye Sensitized Solar Cell (DSSC) Efficiency Derived from Natural Source. *Jurnal Fisika dan Aplikasinya*, **17**(3), 68–73.
8. Rahman, I. A., & Purqon, A. (2015). Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS<sub>2</sub>. *Prosiding SKF 2015*, 497–503.
9. Wulandari, A., Afrizal, A., Emriadi, E., & Efdi, M. (2020). Studi komputasi terhadap struktur, sifat antioksidan, toksisitas dan skor obat dari scopoletin dan turunannya. *Chempublish Journal*, **5**(1), 77–92.
10. Boschloo, G., & Hagfeldt, A. (2009). Characteristics of the iodide/triiodide redox mediator in dye-sensitized solar cells. *Accounts of chemical research*, **42**(11), 1819–1826.
11. Antosiewicz, J. M., & Shugar, D. (2016). UV-Vis spectroscopy of tyrosine side-groups in studies of protein structure. Part 1: Basic principles and properties of tyrosine chromophore. *Biophysical Reviews*, **8**(2), 151–161.
12. Ahliha, A. H., Nurosyid, F., Supriyanto, A., & Kusumaningsih, T. (2018, March). Optical properties of anthocyanin dyes on TiO<sub>2</sub> as photosensitizers for application of dye-sensitized solar cell (DSSC). *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, **333**(1), 012018.
13. Nandiyanto, A. B. D., Oktiani, R., & Ragadhita, R. (2019). How to read and interpret FTIR spectroscopy of organic

- material. *Indonesian Journal of Science and Technology*, **4**(1), 97–118.
14. Jin, Z., Chu, Q., Xu, W., Cai, H., Ji, W., Wang, G., ... & Zhang, X. (2018). All-fiber Raman biosensor by combining reflection and transmission mode. *IEEE Photonics Technology Letters*, **30**(4), 387–390.
15. Xu, C., & Wang, Y. (2012). Collagen cross-linking increases its biodegradation resistance in wet dentin bonding. *The journal of adhesive dentistry*, **14**(1), 11.



Artikel ini menggunakan lisensi  
[Creative Commons Attribution  
4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)