

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Energi mempunyai peranan yang penting dalam kehidupan masyarakat, karena hampir semua aktivitas manusia membutuhkan energi, seperti penggunaan barang elektronik dan transportasi. Kebutuhan manusia terhadap energi semakin meningkat diseluruh negara di dunia, namun kesadaran masyarakat untuk menciptakan lingkungan yang bersih dan bebas dari polusi agar energi di alam tetap stabil, tidak mampu mengimbangi kebutuhannya terhadap energi. Penyediaan energi saat ini masih bergantung pada minyak, gas bumi dan berbagai sumber bahan bakar fosil lainnya¹.

Semakin menipisnya cadangan energi fosil ini, menyebabkan negara-negara di dunia berlomba-lomba mengembangkan energi alternatif yang dapat diperbarui. Sumber energi yang dapat diperbarui contohnya angin, biomassa dan *hydro power*. Penggunaan energi melalui sel surya (*solar cell*) menjadi alternatif yang cukup menjanjikan karena dengan menggunakan sel surya, energi matahari dapat diubah langsung menjadi energi listrik. Energi listrik merupakan energi primer, yang saat ini keberadaannya belum dapat digantikan oleh energi yang lain. Suplai energi dari matahari ke bumi sebesar 3×10^{24} J per tahun atau sekitar 10.000 kali lebih besar dari yang digunakan populasi dunia^{2,3}.

Sel surya yang banyak digunakan saat ini adalah sel surya berbasis teknologi silikon. Bahan silikon yang digunakan semakin lama semakin berkurang dan mahal, sehingga produksi sel ini tidak ekonomis karena ketersediaan silikon di alam relatif sedikit. *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) atau sel surya tersensitasi zat warna bisa menjadi solusinya, karena ramah lingkungan dan memiliki efisiensi penyerapan cahaya yang tinggi. DSSC menggunakan TiO_2 sebagai bahan semikonduktor dan zat warna organik untuk mengkonversi energi cahaya menjadi energi listrik. Zat warna organik sangat cocok sebagai *sensitizer* karena tersedia dalam jumlah yang banyak, murah, dan mudah diekstrak tanpa perlu pemurnian³.

Pada DSSC, saat ini telah berkembang penelitian tentang zat warna tipe D-TT-A (Donor-TT berkonjugasi-Akseptor) yang memiliki keunggulan untuk meningkatkan efisiensinya. Zat warna organik tipe D-TT-A dapat dilakukan rekayasa atau modifikasi terhadap struktur rantai donor, TT-konjugasi, dan akseptor, karena kemampuan konversi cahaya matahari menjadi listrik tergantung kepada ketersediaan ikatan

antara molekul-molekul zat warna dan partikel semikonduktor. Ikatan antara molekul-molekul tersebut menyebabkan elektron- elektron dari molekul zat warna tereksitasi ke lapisan tipis semikonduktor³.

Metode perhitungan secara komputasi yang bisa digunakan ialah metode *semiempiris*, *ab Initio*, dan *Density Functional Theory* (DFT). Pada penelitian ini digunakan metoda semiempiris *Austin Model 1* (AM1) untuk menentukan zat warna organik yang potensial untuk menyerap cahaya, sehingga dapat digunakan sebagai sensitizer pada DSSC. Kemampuan zat warna organik untuk menyerap cahaya dapat dipelajari berdasarkan panjangnya resonansi elektron π pada struktur zat warna organik, yang menyebabkan energi gap semakin kecil. Resonansi elektron π dipengaruhi oleh ikatan π -konjugasi dan atom-atom penyusun struktur rantai π -konjugasi. Semakin panjang struktur rantai π -konjugasi, maka resonansinya juga semakin panjang dan energi gap yang dihasilkan semakin kecil.

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan oleh Yi Yin Tan, dkk, 2014, dengan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TD-DFT) kemampuan penyerapan cahaya tampak dari zat warna organik dapat dikontrol sesuai dengan perubahan/ pergeseran panjang gelombang dari tiofen dan penambahan gugus penarik/ pendorong elektron⁴. Namun pada penelitian tersebut tidak dipelajari pengaruh dari turunan tiofen terhadap panjang gelombang dan energi gap yang dihasilkan. Pergeseran panjang gelombang ke arah yang lebih panjang, akan menyebabkan zat warna mampu menyerap seluruh warna cahaya tampak dengan energi gap yang semakin kecil. Oleh karena itu penulis tertarik untuk melakukan penelitian dengan judul **Rekayasa Struktur Rantai π -Konjugasi pada Zat Warna Organik Tipe D- π -A dengan Kerangka Tiofen Menggunakan Metode Semiempiris *Austin Model 1* (AM1).**

Penemuan mekanika kuantum dalam ilmu kimia memberikan perkembangan terhadap suatu ilmu baru yaitu kimia komputasi. Kimia komputasi adalah cabang ilmu kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya, seperti struktur atom, energi, muatan, momen dipol, kereaktifan, frekuensi getaran dan besaran spektroskopi lainnya, sehingga kemampuan zat warna sebagai sensitizer bisa ditentukan dengan metode komputasi⁵.

Penelitian yang dilakukan oleh Yi Yin Tan, dkk, 2014, zat warna organik tipe D- π -A menggunakan pemodelan turunan zat warna organik kecil fenotiazin sebagai

rantai donor, tiofen sebagai rantai π berkonjugasi, dan asam sianoakrilik sebagai rantai akseptor menghasilkan DSSC dengan efisiensi lebih dari 8% dan energi gap terkecil sebesar 3,328 eV. Setelah dimodelkan dengan penambahan trifenilamin pada zat warna organik kecil fenotiazin sebagai rantai donor dan gugus oktil sebagai gugus pendorong elektron, energi gap yang dihasilkan lebih besar dari sebelumnya⁴.

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan Shin-Lu Chen, dkk, 2013, zat warna organik C214-N123 memiliki energi gap terkecil sebesar 2,01 eV dengan rantai donor 3-N-trifenilamin, maka dalam penelitian ini zat warna organik kecil fenotiazin sebagai rantai donor diganti dengan 3-N-trifenilamin dan asam sianoakrilik sebagai rantai akseptor diganti dengan disianida untuk mempelajari zat warna organik yang lebih potensial digunakan pada DSSC⁶.

1.2 Perumusan Masalah

Berdasarkan uraian latar belakang di atas, maka pembahasan penelitian ini akan difokuskan untuk menentukan zat warna organik tipe D- π -A yang lebih potensial digunakan untuk menyerap cahaya berdasarkan variasi struktur rantai π -konjugasi, mempelajari pengaruh penambahan gugus penarik elektron dan gugus pendorong elektron terhadap energi gap zat warna organik tipe D- π -A. Proses optimasi dilakukan untuk mendapatkan energi gap dari masing-masing zat warna organik untuk disesuaikan dengan energi gap semikonduktor pada DSSC, sehingga dapat dipelajari kemampuan zat warna organik tersebut sebagai *sensitizer*.

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan:

1. Menentukan zat warna organik tipe D- π -A yang lebih potensial digunakan untuk menyerap cahaya berdasarkan variasi struktur rantai π -konjugasi.
2. Mempelajari pengaruh penambahan gugus penarik dan pendorong elektron terhadap energi gap zat warna organik tipe D- π -A.

1.4 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dilakukan penelitian ini, yaitu:

1. Dapat menentukan zat warna organik tipe D- π -A yang lebih potensial digunakan untuk menyerap cahaya berdasarkan variasi struktur rantai π -konjugasi.
2. Dapat mempelajari pengaruh penambahan gugus penarik dan pendorong elektron terhadap energi gap zat warna organik tipe D- π -A.