

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penggunaan energi yang terus meningkat berbanding lurus dengan meningkatnya jumlah penduduk namun berbanding terbalik dengan sumber energi yang saat ini berasal dari fosil seperti batu bara, gas bumi, dan minyak bumi. Beberapa tahun terakhir, produksi fosil dilaporkan mengalami penurunan sebesar 2% setiap tahunnya¹. Oleh karena itu, pemanfaatan energi alternatif dan terbarukan banyak dikembangkan salah satunya sel surya.

Sel surya adalah peralatan yang mengubah energi matahari menjadi energi listrik (fotovoltaik). Sel surya yang banyak dikembangkan saat ini adalah sel surya tersensitasi zat warna atau *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) sebab fabrikasinya yang sederhana dan biayanya ekonomis². DSSC merupakan sel surya generasi ketiga yang diperkenalkan oleh O'Regan dan Gratzel pada tahun 1991 menggunakan zat warna kompleks ruthenium dengan efisiensi sebesar 7,12%³. Kompleks ruthenium sangat efektif digunakan sebagai zat warna sebab memberikan efisiensi yang tinggi. Namun, ruthenium merupakan bahan anorganik yang jumlahnya terbatas dan bersifat toksik. Maka diperlukan zat warna yang melimpah keberadaannya di alam, murah dan tidak bersifat toksik sebagai alternatif pengganti kompleks ruthenium.

Zat warna organik telah banyak digunakan sebagai sensitizer dalam DSSC akan tetapi zat warna organik belum menghasilkan efisiensi sebaik zat warna anorganik. Maka dari itu, untuk meningkatkan efisiensi senyawa organik sebagai sensitizer pada DSSC dilakukan modifikasi pada strukturnya. Modifikasi struktur senyawa organik yang dilakukan menggunakan konfigurasi dasar D- π -A. Dimana D adalah molekul bersifat donor elektron, π adalah molekul jembatan yang memiliki elektron π berkonyugasi, dan A adalah molekul bersifat akseptor elektron. Konfigurasi dasar D- π -A digunakan untuk meningkatkan kesensitifan sel surya terhadap sinar dengan memperpanjang resonansi elektron π konyugasi yang menggeser spektrum ke arah panjang gelombang lebih besar karena efek *push-pull*⁴.

Difenilamin (DPA) adalah senyawa organik turunan anilin yang memiliki rumus kimia $(C_6H_5)_2NH$. Difenilamin dapat digunakan sebagai rantai donor pada modifikasi tipe D- π -A untuk meningkatkan efisiensi pada DSSC. Difenilamin memiliki kecenderungan mendonorkan elektron karena strukturnya yang memiliki dua cincin fenil dan satu pasangan elektron bebas pada atom nitrogen dimana elektron yang terikat dapat dengan bebas berkonyugasi melalui ikatan rangkap cincin aromatik.

Dengan demikian, difenilamin berpotensi menjadi unit donor yg baik. Semakin baik unit donor yang akan dijembatani maka akan semakin baik pula penyerapan sinar matahari yang dihasilkan⁵.

Penelitian menggunakan kimia komputasi telah menjadi bagian penting dalam perkembangan DSSC sebab memberikan studi yang mendalam mengenai struktur dan sifat elektronik suatu molekul/senyawa yang digunakan sebagai sensitizer. Selain itu, keuntungan penggunaan kimia komputasi ialah dimungkinkannya menghitung sifat molekul yang kompleks, hasil perhitungan yang berkolerasi secara signifikan dengan eksperimen di laboratorium, dan meminimalisir biaya *try and error*⁶. Beberapa contoh penelitian kimia komputasi dalam modifikasi zat warna organik sebagai sensitizer pada DSSC yaitu senyawa trifenilamin⁷, Indolin⁸, kumarin⁹, tiofen¹⁰, dan sebagainya. Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, modifikasi struktur zat warna organik mampu meningkatkan efisiensi serapan pada zat warna.

Oleh karena itu, penelitian mengenai analisis teoretis modifikasi struktur zat warna tipe D- π -A berbasis difenilamin dilakukan dengan memvariasikan rantai π konyugasi dan rantai akseptor elektron. Struktur dimodifikasi melalui program komputasi dengan metode *Density Functional Theory* (DFT). Metode DFT digunakan sebab memiliki hasil perhitungan yang akurat dan sesuai hasil eksperimen.

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana pengaruh modifikasi struktur zat warna organik dengan senyawa donor elektron difenilamin dalam konfigurasi dasar D- π -A terhadap efisiensi penyerapan sinar matahari ?
2. Bagaimana modifikasi struktur zat warna yang menghasilkan serapan sinar matahari terbaik ?

1.3 Tujuan Penelitian

1. Menganalisis pengaruh rantai π -konyugasi dan gugus akseptor elektron terhadap efisiensi penyerapan sinar matahari oleh zat warna termodifikasi.
2. Menentukan struktur modifikasi zat warna yang menghasilkan serapan terbaik terhadap sinar matahari.

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini bermanfaat sebagai tambahan referensi modifikasi struktur zat warna tipe D- π -A untuk zat warna pada DSSC agar dapat disintesis secara eksperimen di laboratorium berdasarkan efisiensi terbaik yang dihasilkan.