

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Energi merupakan faktor penting dalam pertumbuhan sosial dan ekonomi. Saat ini, konsumsi energi masih bergantung pada energi berbahan bakar fosil seperti minyak bumi, batu bara, dan gas alam. Penggunaan energi berbahan bakar fosil secara berlebihan akan menghasilkan gas rumah kaca, seperti karbon dioksida (CO_2), yang menyebabkan menipisnya lapisan ozon sehingga terjadi pemanasan global dan menimbulkan bencana alam¹.

Sinar matahari merupakan sumber energi utama dalam kehidupan, dan dipandang sebagai energi alternatif yang ideal untuk menggantikan energi berbahan bakar fosil karena kelimpahannya, tidak menimbulkan polusi, jumlah tidak terbatas, dan dapat diperbaharui². Oleh karena itu, teknologi energi terbarukan yang inovatif sangat dibutuhkan agar dapat mengatasi masalah global seperti krisis energi, perubahan iklim dan pembangunan berkelanjutan³.

Perkembangan yang menarik dari teknologi sel surya saat ini adalah *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) yang telah menunjukkan potensi cukup besar sebagai sel surya komersial generasi baru⁴. DSSC merupakan jenis fotovoltaik berbasis zat warna yang berfungsi sebagai *sensitizer* untuk penyerapan cahaya matahari⁵. DSSC adalah pembangkit energi listrik yang potensial karena ramah lingkungan dan biaya produksi yang lebih murah dengan efisiensi daya yang terus meningkat⁶.

Salah satu parameter kunci dalam mendesain DSSC adalah *sensitizer* yang berperan penting dalam menyerap cahaya, injeksi elektron, dan peningkatan sifat fotolistrik⁷. Zat warna organik sangat cocok sebagai *sensitizer* karena tersedia dalam jumlah berlimpah, murah, dan mudah diekstrak⁸. Beberapa ekstrak tanaman yang dimanfaatkan diantaranya adalah kunyit, beras hitam, dan daun pandan⁵. Akan tetapi zat warna alami cenderung tidak murni dan tidak stabil sehingga berkembang penelitian secara eksperimen maupun teoritis tentang zat warna organik sintesis untuk *sensitizer*.

Zat warna organik dapat ditingkatkan daya sensitisasinya dengan merekayasa struktur molekulnya, zat warna yang diteliti menghasilkan efisiensi yang paling baik pada peralatan DSSC ialah zat warna organik dengan tipe D- π -A. Dimana D merupakan gugus donor elektron, π merupakan jembatan terkonjugasi, dan A merupakan gugus akseptor elektron. Zat warna dengan tipe D- π -A memiliki stabilitas serta efisiensi yang sangat baik pada DSSC karena memiliki sifat *push and pull* dan resonansi elektron yang lebih panjang⁹.

Tiofen diketahui menunjukkan kesesuaiannya sebagai jembatan- π konjugasi dalam zat warna organik tipe D- π -A. Penggabungan gugus tiofen ke molekul zat warna tipe D- π -A diketahui mampu meningkatkan daya serap molar, stabilitas keseluruhan dan kinerja *sensitizer* dalam sel surya. Gugus tiofen juga dapat memfasilitasi pergeseran merah batokromik dari spektra serapan yang dapat dikaitkan dengan adanya gugus heterosiklik yang kaya akan elektron¹⁰. Pergeseran panjang gelombang ke arah yang lebih panjang, akan menyebabkan zat warna berbasis tiofen mampu menyerap cahaya tampak lebih banyak, dan *bandgap* yang dihasilkan semakin kecil⁴. Berdasarkan strukturnya, tiofen sangat potensial dijadikan sebagai jembatan π terkonjugasi pada zat warna tipe D- π -A karena memiliki elektron π berkonjugasi dan atom sulfur pada rantai heterosiklik yang bisa berfungsi sebagai akseptor maupun donor elektron¹¹.

Pendekatan kimia komputasi dalam upaya untuk mendesain senyawa menjadi sangat penting karena dapat meminimalisir penggunaan bahan kimia dan waktu penelitian, lebih hemat karena dapat menghindari *trial and error* dalam eksperimen dan mampu memberikan tingkat akurasi yang baik. Metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent DFT* (TD-DFT) memiliki kelebihan berupa hasil perhitungan lebih akurat dibandingkan dengan metode komputasi lainnya. Metode DFT dan TD-DFT digunakan untuk menyelidiki geometri molekul, struktur elektronik, spektrum serapan dan karakteristik fotovoltaiik dari zat warna yang digunakan¹².

Berdasarkan uraian diatas, maka peneliti tertarik untuk memodifikasi struktur zat warna tipe D- π -A berbasis tiofen secara komputasi menggunakan metode perhitungan DFT dan TD-DFT. Agar resonansi elektron pada molekul zat warna menjadi lebih panjang maka digunakan dua molekul tiofen membentuk ditiofen sebagai jembatan π -terkonjugasi dengan variasi rantai donor dan rantai akseptor. Molekul donor dan akseptor yang digunakan berbeda dengan penelitian yang telah ada sehingga rangkaian struktur zat warna keseluruhan adalah molekul baru yang belum pernah diteliti sebelumnya secara teoritik maupun eksperimen.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dikemukakan, rumusan masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Bagaimana pengaruh modifikasi struktur zat warna tipe D- π -A berbasis ditiofen terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna pada DSSC?
2. Bagaimana stuktur zat warna terbaik berbasis ditiofen yang mampu menghasilkan efisiensi serapan cahaya tinggi terhadap peralatan DSSC?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Menganalisis pengaruh modifikasi struktur zat warna tipe D- π -A berbasis ditiofen terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna pada DSSC.
2. Menentukan struktur zat warna terbaik berbasis ditiofen yang mampu menghasilkan efisiensi serapan cahaya yang tinggi terhadap peralatan DSSC.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini yaitu dapat menentukan efisiensi serapan cahaya zat warna tipe D- π -A berbasis ditiofen dan efisiensi daya DSSC yang nantinya dapat ditentukan struktur molekul terbaik yang menghasilkan efisiensi serapan cahaya yang tinggi, murah dan ramah lingkungan. Sehingga dapat disintesis dalam skala laboratorium dan industri sebagai *sensitizer* pada DSSC.

