

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Selama beberapa tahun terakhir, berbagai jenis sel surya telah dikembangkan untuk mengubah sinar matahari menjadi listrik¹. Sel surya berbasis zat warna atau *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) adalah teknologi sel surya generasi ketiga yang mudah dan efisien untuk diterapkan sebagai penyedia energi terbarukan di masa mendatang dikarenakan sumber daya yang tidak terbatas, mudah untuk diproduksi, biaya rendah dan ramah lingkungan².

Komponen utama DSSC yaitu fotoanoda, *dye-sensitizer*, elektrolit dan counter elektroda. Fotoanoda yang digunakan adalah TiO_2/ZnO yang memiliki kestabilan dan sifat fotolistrik yang sangat baik akan tetapi hanya mampu menyerap sinar *Ultra Violet* (UV). Oleh karena itu zat warna biasanya digunakan sebagai *sensitizer* atau pemeka cahaya karena kemampuannya menyerap foton sampai daerah sinar tampak bahkan infra merah³.

Zat warna organik modifikasi saat ini telah banyak dipelajari sebagai *sensitizer* karena memiliki beberapa keunggulan seperti koefisien ekstingsi molar tinggi, biaya produksi rendah, ramah lingkungan dan fleksibel⁴. Beberapa tahun terakhir, banyak zat warna organik bebas logam telah dibuat dengan tipe Donor-jembatan π -Akseptor (D- π -A) dan dilaporkan sebagai komponen DSSC yang paling efisien⁵. Konfigurasi D- π -A memiliki banyak keuntungan seperti spektrum serapan pergeseran merah yang besar, celah energi rendah, dan memiliki fotoinduksi intramolekul yang efisien⁶. Hal ini disebabkan oleh adanya sifat tarikan dan dorongan elektron dalam molekul. Salah satu cara untuk memperbaiki sifat fotolistrik adalah dengan memperpanjang rantai π konjugasi yang dapat menggeser spektrum adsorpsi ke daerah sinar tampak. Telah banyak dilaporkan riset eksperimen dan teoritis tentang analisis molekul jembatan π pada zat warna tipe D- π -A diantaranya tiofen⁷, benzena dan turunannya⁸, trifenilamin⁹ dan lain-lain. Hasil penelitian tersebut menunjukkan meningkatnya efisiensi serapan cahaya DSSC.

Pirol merupakan senyawa organik heterosiklik aromatik yang tergolong ke dalam jenis alkaloid. Pirol merupakan kandidat yang baik sebagai jembatan π karena memiliki elektron π berkonjugasi dan atom nitrogen yang bersifat pendonor sekaligus penarik elektron yang baik. Pirol adalah salah satu model kromofor indol triptofan dan juga merupakan blok pembangun *sensitizer* untuk DSSC¹⁰. Akan tetapi sampai saat ini belum banyak dilakukan penelitian modifikasi struktur zat warna berbasis dipirol.

Berdasarkan uraian diatas maka dilakukan penelitian komputasi tentang modifikasi struktur zat warna organik tipe D- π -A berbasis dipirol menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Molekul dibuat dalam bentuk dipirol sebagai upaya untuk memperpanjang resonansi elektron π . Pada penelitian ini dilakukan variasi rantai donor, akseptor, gugus pendorong dan penarik elektron. Rantai-rantai yang divariasikan berbeda dengan penelitian sebelumnya sehingga struktur molekul yang diteliti adalah molekul terbaru. Sejauh ini belum ada penelitian eksperimen zat warna berbasis dipirol.

Pendekatan kimia komputasi dalam upaya untuk mendesain molekul menjadi sangat penting karena dapat meminimalisir penggunaan bahan kimia, lebih hemat karena dapat menghindari *trial and error* dalam eksperimen tetapi tepat dalam memberikan tingkat kepercayaan yang tinggi. Metode DFT saat ini merupakan metode perhitungan komputasi yang paling akurat yang digunakan untuk melihat struktur geometri optimal pada keadaan dasar dan tereksitasi. Pada penelitian ini digunakan basis set B3LYP/6-31G (d, p) untuk mengetahui fungsi hibrid pada senyawa. Metode ini sangat baik digunakan untuk menganalisis secara teoritik sifat-sifat elektronik, optik, dan sifat listrik dari zat warna yang digunakan².

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana pengaruh modifikasi struktur donor dan akseptor zat warna tipe D- π -A berbasis dipirol terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna pada DSSC
2. Bagaimana zat warna terbaik berbasis dipirol yang dapat menghasilkan efisiensi daya tinggi terhadap perangkat DSSC

1.3 Tujuan Penelitian

1. Menganalisis pengaruh dari modifikasi struktur donor dan akseptor zat warna tipe D- π -A berbasis dipirol terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna pada DSSC
2. Menentukan zat warna terbaik berbasis dipirol yang dapat menghasilkan efisiensi daya tinggi terhadap perangkat DSSC

1.4 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dari penelitian ini ialah dapat menentukan efisiensi serapan cahaya dan efisiensi daya zat warna tipe D- π -A berbasis dipirol yang nantinya dapat menentukan struktur molekul terbaik yang dapat meningkatkan efisiensi daya listrik DSSC dan dapat disintesis dalam skala laboratorium dan industri sebagai *sensitizer*

pada DSSC yang menghasilkan efisiensi serapan cahaya yang tinggi, murah dan ramah lingkungan.

