

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Ketergantungan global pada bahan bakar fosil yang bersifat terbatas dan tidak terbarukan telah memicu kekhawatiran serius akan krisis energi serta kerusakan lingkungan akibat emisi gas rumah kaca yang memicu pemanasan global. Sebagai solusi berkelanjutan, energi matahari muncul sebagai alternatif yang paling menjanjikan karena sifatnya yang bersih, aman, dan jumlahnya melimpah di seluruh permukaan bumi¹. Di antara berbagai teknologi fotovoltaiik, *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) menjadi solusi unggulan dan berpotensi besar untuk aplikasi pada perangkat elektronik karena biaya produksi yang rendah, efisiensi yang tinggi dalam konversi energi listrik, dan ramah lingkungan².

DSSC terdiri atas komponen anoda semikonduktor, *sensitizer*, katoda, dan elektrolit³. Semikonduktor pada peralatan DSSC adalah TiO_2 yang berperan dalam menyerap cahaya. Sebagai elektroda, TiO_2 memiliki banyak kelebihan yaitu stabilitas kimia yang tinggi, non-toksik, mobilitas elektron yang baik, dan dapat disintesis dengan berbagai metode yang relatif sederhana dan ekonomis⁴. Namun, TiO_2 memiliki (celah energi) *bandgap* yang lebar berkisar 3,13-3,6 eV sehingga hanya mampu menyerap sinar UV. Dengan demikian, untuk meningkatkan serapan cahaya TiO_2 diperlukan *sensitizer*. *Sensitizer* merupakan komponen kunci dalam meningkatkan kinerja DSSC pada intensitas cahaya yang rendah, sehingga DSSC cocok diaplikasikan di dalam ruangan maupun di wilayah dengan intensitas cahaya rendah⁵.

Sensitizer dari zat warna anorganik telah banyak digunakan untuk DSSC karena memiliki efisiensi serapan cahaya yang tinggi. Namun, zat warna ini memiliki kekurangan yaitu ketersediaan terbatas dan menyebabkan dampak buruk pada lingkungan. Efisiensi serapan cahaya yang dihasilkan zat warna organik masih rendah, tetapi *sensitizer* zat warna organik memiliki banyak kelebihan dibanding zat warna anorganik yaitu ketersediaan yang berlimpah, biaya rendah, fleksibilitas yang baik, dan ramah lingkungan⁶.

Peningkatan efisiensi serapan cahaya zat warna organik dilakukan melalui berbagai modifikasi struktur molekul, karena struktur molekul diketahui memengaruhi kemampuan serapan cahaya. Studi eksperimental dan komputasi mengenai modifikasi sistem zat warna telah banyak dilakukan, di antaranya pada tipe D- π -A⁷, D-D- π -A⁸, D-A- π -A⁹, D- π - π -A¹⁰, D- π -A-A¹¹. Pada sistem ini, rantai D bersifat donor elektron, rantai π memiliki elektron π berkonjugasi, dan rantai A bersifat akseptor elektron. Sifat tarikan dan tolakan elektronik serta sistem elektron π berkonjugasi menghasilkan transfer muatan yang cepat dan resonansi elektron yang panjang. Semakin panjang resonansi elektron π , maka *bandgap* akan semakin kecil, sehingga transisi elektronik cepat dan cahaya akan lebih banyak diserap bahkan pada intensitas yang lebih rendah. Kondisi ini akan menghasilkan efisiensi daya listrik yang besar⁶.

Struktur D- π - π -A dirancang untuk memperpanjang rantai π antara donor dan akseptor. Hasil penelitian sebelumnya menunjukkan struktur D- π_1 - π_2 -A memiliki efisiensi serapan

cahaya yang besar melalui desain yang cermat dan pemilihan komponen rantai yang tepat. Modifikasi pada struktur ini dapat meningkatkan resonansi elektron dan kekuatan donor serta akseptor elektron sehingga memungkinkan zat warna untuk menyerap lebih banyak cahaya dalam rentang spektrum yang lebih luas, termasuk cahaya tampak dan inframerah dekat sehingga berpotensi meningkatkan efisiensi daya listrik dari DSSC¹².

Pirimidin merupakan senyawa organik heterosiklik yang memiliki kemampuan menyerap cahaya dan mampu meningkatkan efisiensi konversi energi listrik karena memiliki elektron π berkonjugasi dan atom nitrogen (N) yang bersifat donor dan sekaligus akseptor elektron yang baik, sehingga sangat cocok sebagai rantai π pada zat warna modifikasi. Namun demikian, belum ada penelitian yang menggunakan pirimidin sebagai zat warna organik untuk DSSC dengan modifikasi struktur tipe D- π_1 - π_2 -A. Modifikasi struktur zat warna berbasis pirimidin dapat meningkatkan sifat optik dan elektroniknya, sehingga berkontribusi pada kinerja DSSC yang lebih baik¹³.

Metode komputasi merupakan pilihan yang tepat untuk merancang struktur zat warna organik terbaru yang efisien sebagai *sensitizer* karena proses pengerjaannya yang cepat, biayanya rendah, dan hasil yang akurat⁵. Berdasarkan uraian diatas, penelitian komputasi tentang modifikasi struktur zat warna organik tipe D- π_1 - π_2 -A berbasis pirimidin menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) menjadi fokus peneliti. Modifikasi struktur diharapkan dapat mengoptimalkan sifat optik dan elektronik zat warna organik.

Metode DFT adalah metode perhitungan kuantum yang paling akurat. Hingga saat ini, belum dilaporkan penelitian mengenai zat warna berbasis pirimidin dengan modifikasi struktur tipe D- π_1 - π_2 -A. Pada penelitian ini, anilin digunakan sebagai rantai donor dengan akseptornya adalah formil sianida. Rantai π_1 yang digunakan adalah pirimidin, sementara variasi dilakukan pada rantai π_2 . Selain itu, variasi juga diterapkan pada rantai donor. Rangkaian struktur zat warna yang diteliti merupakan model terbaru yang belum pernah diteliti sebelumnya.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Bagaimana pengaruh modifikasi struktur zat warna tipe D- π - π -A berbasis pirimidin terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna pada DSSC?
2. Bagaimana struktur zat warna terbaik berbasis pirimidin yang mampu menghasilkan efisiensi serapan cahaya tinggi terhadap peralatan DSSC?
3. Bagaimana interaksi zat warna dengan permukaan TiO_2 ditinjau dari parameter elektronik yang berkaitan dengan performa DSSC?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Menganalisis pengaruh modifikasi struktur zat warna tipe D- π - π -A berbasis pirimidin terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna pada DSSC.

2. Menentukan struktur zat warna terbaik berbasis pirimidin yang mampu menghasilkan efisiensi serapan cahaya tinggi terhadap peralatan DSSC.
3. Menentukan jenis dan kekuatan interaksi zat warna dengan permukaan TiO_2 secara komputasi.

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan memberikan manfaat dalam menjelaskan tingkat efisiensi serapan cahaya serta performa daya dari zat warna tipe D- π_1 - π_2 -A berbasis pirimidin, sehingga dapat diperoleh rancangan struktur molekul yang paling mendukung peningkatan kinerja DSSC. Temuan struktur yang optimal ini berpotensi menjadi dasar pengembangan *sensitizer* baru yang dapat disintesis baik dalam skala laboratorium maupun industri. Selain menawarkan performa fotovoltaiik yang lebih baik, kandidat *sensitizer* yang dihasilkan juga diharapkan memiliki keunggulan dari segi biaya serta tetap ramah lingkungan, sehingga relevan untuk aplikasi sel surya generasi mendatang.

