

## BAB 1. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Krisis energi merupakan masalah utama di dunia karena penggunaan energi dari tahun ke tahun terus meningkat seiring bertambahnya populasi penduduk. Sementara energi dari bahan bakar fosil yang berasal dari batu bara, minyak bumi, dan gas alam semakin mengalami penipisan. Energi matahari dianggap sebagai salah satu sumber energi alternatif yang paling efisien karena energi matahari memiliki beragam keunggulan yaitu terbarukan, melimpah dan tidak menimbulkan polusi<sup>1</sup>.

Pembangkit energi listrik menggunakan energi cahaya dikenal sebagai teknologi fotovoltaik<sup>2</sup>. Salah satu sel fotovoltaik yaitu sel surya telah mengalami tiga generasi perkembangan. Sel surya generasi pertama menggunakan material silikon, kelemahan sel surya generasi pertama adalah bahan yang digunakan tersedia terbatas di alam dan biaya produksi mahal. Sel surya generasi kedua menggunakan polimer semikonduktor. Kelemahan dari sel surya generasi kedua adalah biaya produksi yang relatif tinggi serta proses produksinya memerlukan teknologi yang relatif canggih. Sel surya generasi ketiga telah dikembangkan yaitu *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSCs)<sup>3</sup>. DSSCs menggunakan TiO<sub>2</sub> atau ZnO sebagai semikonduktor dan zat warna sebagai *sensitizer*. DSSCs menawarkan teknologi yang efisien untuk pasokan energi pada masa yang akan datang karena menggunakan bahan dasar relatif lebih murah, sumbernya berlimpah, dan ramah lingkungan<sup>1</sup>.

Pada DSSCs terdapat *sensitizer* yang berperan untuk membantu meningkatkan efisiensi serapan cahaya<sup>4</sup>. *Sensitizer* pada DSSCs menggunakan zat warna organik dan anorganik. *Sensitizer* yang menggunakan zat warna organik telah menarik perhatian daripada zat warna anorganik karena sumbernya berlimpah dan sintesis molekulnya yang mudah, namun zat warna organik relatif kurang stabil dan efisiensi serapan cahaya rendah. Agar serapan cahaya zat warna meningkat maka dilakukan modifikasi struktur molekul. Sampai saat ini, banyak upaya yang dilakukan untuk mendapatkan *sensitizer* yang efisien melalui rekayasa molekuler untuk meningkatkan kinerja DSSCs<sup>5</sup>.

Zat warna organik modifikasi yang berkembang saat ini adalah zat warna organik tipe D- $\pi$ -A yang terdiri dari donor elektron, rantai  $\pi$ -konjugasi dan akseptor elektron<sup>6</sup>. Beberapa penelitian komputasi tentang zat warna organik dengan struktur donor seperti triarilamin<sup>7</sup>, indolin<sup>8</sup>, tripenilamin<sup>9</sup>, karbazol<sup>10</sup>, kumarin<sup>11</sup> telah dilakukan.

Diantara berbagai rantai donor elektron pada zat warna tipe D- $\pi$ -A, indolin memiliki keunggulan dengan kemurnian yang tinggi, lebih ramah lingkungan, mudah disintesis dan biaya produksi yang lebih rendah<sup>12</sup>. Pada strukturnya, indolin mempunyai pasangan elektron bebas pada atom nitrogen dengan membentuk struktur aromatis yang dapat menyumbangkan elektronnya untuk ditransfer ke pita akseptor sehingga indolin digunakan sebagai gugus donor elektron yang efisien untuk zat warna tipe D- $\pi$ -A pada DSSCs<sup>13,14</sup>.

Berdasarkan uraian diatas maka pada penelitian ini dilakukan studi komputasi tentang modifikasi struktur zat warna organik tipe D- $\pi$ -A berbasis indolin menggunakan program komputasi dengan metode *Density Functional Theory* (DFT). DFT dianggap sebagai metodologi perhitungan komputasi yang paling akurat yang digunakan untuk melihat struktur geometri optimal pada keadaan dasar. Pada penelitian ini digunakan basis set B3LYP/6-31G (d, p) untuk mengetahui fungsi hibrid pada senyawa<sup>15</sup>. Metode ini paling banyak digunakan untuk menganalisis secara teoritik sifat-sifat elektronik, optik, dan sifat listrik dari zat warna yang digunakan<sup>16</sup>.

## 1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana pengaruh modifikasi struktur zat warna tipe D- $\pi$ -A berbasis indolin terhadap efisiensi penyerapan cahaya zat warna?
2. Bagaimana pengaruh gugus pendorong dan penarik elektron terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna
3. Bagaimana struktur modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan efisiensi serapan cahaya terbaik?

## 1.3 Tujuan Penelitian

1. Untuk mengetahui pengaruh modifikasi struktur zat warna tipe D- $\pi$ -A berbasis indolin terhadap efisiensi penyerapan cahaya zat warna.
2. Mengetahui pengaruh gugus pendorong dan penarik elektron terhadap efisiensi serapan cahaya zat warna.
3. Menentukan struktur modifikasi terbaik yang mampu menghasilkan efisiensi serapan cahaya terbaik.

## 1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan sumbangan informasi dan manfaat terhadap bidang ilmu kimia terutama kimia komputasi, elektrokimia, kimia material serta kimia organik bahan alam, bagaimana struktur zat warna yang efisien

sebagai *sensitizer* pada *Solar Cells* sehingga nantinya dapat disintesis secara eksperimen di laboratorium.

