

# BAB I

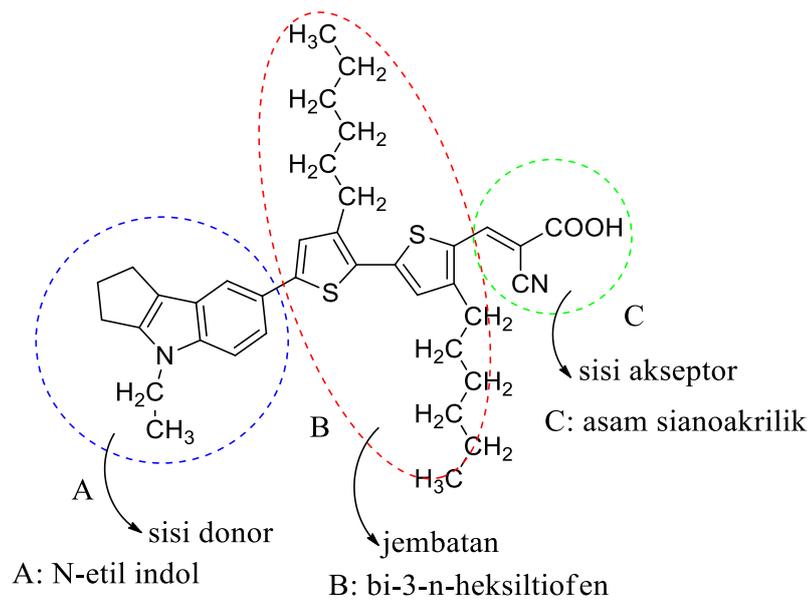
## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Saat ini kebutuhan energi, khususnya energi listrik terus meningkat dengan pesat, bahkan di luar estimasi yang diperkirakan. Hal ini sudah selayaknya sebagai dampak meningkatnya seluruh aktivitas kehidupan yang menggunakan energi listrik <sup>[1]</sup>. Berdasarkan survei yang dilakukan oleh Professor Ricards Smalley dari Rice University mengenai masalah terbesar yang akan dihadapi manusia untuk 50 tahun mendatang, ternyata energi menduduki peringkat pertama. Cadangan sumber energi fosil di seluruh dunia terhitung sejak 2002 yaitu 40 tahun untuk minyak, 60 tahun untuk gas alam, dan 200 tahun untuk batu bara. Dengan keadaan semakin menipisnya sumber energi fosil tersebut, di dunia sekarang ini terjadi pergeseran dari penggunaan sumber energi tak terbarui menuju sumber energi yang terbarui. Dari sekian banyak sumber energi terbarui seperti angin, *biomass* dan *hydro power*, penggunaan energi melalui *solar cell* / sel surya merupakan alternatif yang paling potensial. Hal ini dikarenakan jumlah energi matahari yang sampai ke bumi sangat besar, sekitar 700 Megawatt setiap menitnya. Bila dikalkulasikan, jumlah ini 10.000 kali lebih besar dari total konsumsi energi dunia <sup>[2]</sup>.

Sel surya berdasarkan perkembangan teknologi saat ini dan bahan pembuatannya dapat dibedakan menjadi tiga yaitu pertama, sel surya yang terbuat dari silikon tunggal dan silikon multi kristal. Kedua, sel surya tipe lapis tipis dan yang ketiga sel surya organik (*Dye Sensitized Solar Cell*). Sel surya konvensional berupa sambungan *p-n junction* yang terbuat dari bahan semikonduktor seperti silikon, masih mahal untuk dikembangkan karena menggunakan teknologi yang canggih. Hingga ditemukan oleh Gratzel yaitu sel surya organik atau DSSC sebagai sel surya dengan *dye sensitizer* dari bahan organik yang dapat dikembangkan dengan biaya murah dan pabrikasi yang mudah. Pada dasarnya prinsip kerja DSSC mengkonversi energi cahaya ke listrik dalam skala molekular dalam bentuk reaksi dari transfer elektron <sup>[3]</sup>.

Kajiyama *et al* telah melakukan penelitian sintesis *dye* organik dan diperoleh sembilan *dye* organik baru. Salah satunya adalah *dye* N-etil indol, seperti yang ditunjukkan pada **Gambar 1.1** <sup>[4]</sup>.



**Gambar 1.1** Struktur *dye* organik yang telah disintesis oleh Kajiyama

Kartika *et al* telah berhasil melakukan studi komputasi terhadap *dye sensitizer* yang disintesis oleh Kajiyama *et al* tersebut. Dimana senyawa N-etil indol bertindak sebagai donor dengan akseptornya adalah asam sianoakrilik yang dihubungkan dengan jembatan bi-3-n-heksiltiofen. Dengan kondisi seperti ini dihasilkan *band gap* senyawa N-etil indol sebesar 2.64 eV [5].

Pada penelitian ini, akan dilakukan studi komputasi untuk menentukan geometri struktur stabil dan hipotesis dari senyawa *dye*, yaitu senyawa *dye* dengan sisi donor N-etil indol dan sisi akseptor katekol, senyawa *dye* dengan sisi donor N-etil indol dan sisi akseptor 4-metil katekol, lalu sistem *dye*-Ti(OH)<sub>2</sub>. Perhitungan senyawa *dye* dengan sisi donor N-etil indol dan sisi akseptor asam sianoakrilik dilakukan kembali. Penggantian sisi akseptor asam sianoakrilik dengan katekol dan 4-metil katekol dilakukan untuk mengevaluasi perubahan sifat elektronik senyawa *dye* tersebut.

## 1.2 Rumusan Masalah Penelitian

Berdasarkan latar belakang diatas maka permasalahan yang akan dikaji pada penelitian ini yaitu:

1. Bagaimana menentukan struktur *dye* organik, yaitu N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen katekol dan N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen 4-metil katekol, lalu menentukan sifat elektronik *dye* tersebut?

2. Bagaimana menentukan sifat elektronik dari konfigurasi *dye*-Ti(OH)<sub>2</sub> melalui tingkatan energi elektronik, distribusi elektron HOMO/LUMO dan spektrum serapan UV-Vis ?

### 1.3 Ruang Lingkup Penelitian

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode teori fungsi rapatan, *Density Functional Theory* (DFT)/B3LYP dan teori fungsi rapatan fungsi waktu, *Time Dependent Density Functional Theory* (TDDFT)/B3LYP dengan basis set 6-31G(d,p) untuk semua atom. Studi komputasi ini dihitung dengan menggunakan perangkat lunak Firefly 8.1 dan kemudian data keluaran yang diperoleh dianalisis lebih lanjut dari geometri struktur stabilnya, senyawa hipotesis yang dihitung meliputi senyawa *dye* organik N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen katekol dan N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen 4-metil katekol dan konfigurasi *dye*-Ti(OH)<sub>2</sub>. Sifat elektronik senyawa *dye* dikaji melalui tingkatan energi elektronik, distribusi elektron HOMO/LUMO, besar celah energi atau *band gap* dan spektrum serapan UV-Vis.

### 1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini, antara lain:

1. Menentukan struktur *dye* organik yaitu: N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen katekol dan N-etil indol bi-3-n-heksiltiofen 4-metil katekol.
2. Menentukan struktur senyawa dengan konfigurasi *dye* – Ti(OH)<sub>2</sub>.
3. Menentukan sifat elektronik *dye* organik dan konfigurasi *dye* – Ti(OH)<sub>2</sub> meliputi tingkatan energi elektronik, distribusi elektron HOMO/LUMO dan spektrum serapan UV-Vis.