

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang Penelitian

Energi listrik merupakan salah satu energi yang sangat penting bagi kehidupan manusia khususnya penduduk Indonesia. Namun penyediaan energi listrik ini bukan perkara yang mudah mengingat jumlah penduduk Indonesia yang tidak sedikit serta terus berkembangnya sektor industri di Indonesia. Selain itu rasio elektrifikasi di Indonesia masih sekitar 65%, sehingga lebih dari sepertiga wilayah Indonesia belum mendapatkan pasokan listrik. Pembangkit listrik di Indonesia sebagian besar dihasilkan dengan bantuan bahan bakar fosil (minyak bumi, batubara, dll) yang selain jumlahnya terbatas, bahan bakar fosil juga berpotensi menimbulkan kerusakan pada lingkungan terutama dapat menjadi pemicu pemanasan global. Dari permasalahan-permasalahan diatas diperlukan suatu solusi yang efektif dan efisien terutama pada aspek lingkungan dan aspek ekologi (Shah *et al*, 1999; Brabec *et al*, 2001). Pemanfaatan sumber daya alam idealnya haruslah bermanfaat dan dapat dilestarikan tanpa mencemari lingkungan. Allah telah melimpahkan kenikmatan berupa sumber daya alam yang melimpah dan manusia dilarang untuk melakukan kerusakan di muka bumi, seperti yang tercantum dalam Al Quran Surat Al Araaf ayat 56-58 yang berbunyi:

وَلَا تُفْسِدُوا فِي الْأَرْضِ بَعْدَ إِصْلَاحِهَا وَادْعُوهُ خَوْفًا وَطَمَعًا إِنَّ رَحْمَتَ
 اللَّهِ قَرِيبٌ مِّنَ الْمُحْسِنِينَ ﴿٥٦﴾ وَهُوَ الَّذِي يُرْسِلُ الرِّيحَ بُشْرًا
 بَيْنَ يَدَيْ رَحْمَتِهِ ۗ حَتَّىٰ إِذَا أَقْلَّتْ سَحَابًا ثِقَالًا سُقْنَاهُ لِبَلَدٍ مَّيِّتٍ
 فَأَنْزَلْنَا بِهِ الْمَاءَ فَأَخْرَجْنَا بِهِ مِنْ كُلِّ الثَّمَرَاتِ ۗ كَذَٰلِكَ نُخْرِجُ
 الْمَوْتَىٰ لَعَلَّكُمْ تَذَكَّرُونَ ﴿٥٧﴾ وَالْبَلَدُ الطَّيِّبُ يَخْرُجُ نَبَاتُهُ
 بِإِذْنِ رَبِّهِ ۗ وَالَّذِي خَبثَ لَا يَخْرُجُ ۚ نَكَدًا ۗ كَذَٰلِكَ نُصَرِّفُ الْآيَاتِ
 لِقَوْمٍ يَشْكُرُونَ ﴿٥٨﴾

Artinya : “Dan janganlah kamu berbuat kerusakan di muka bumi sesudah (Allah) memperbaikinya dan berdoalah kepadanya dengan rasa takut (tidak akan diterima) dan harapan (akan dikabulkan). Sesungguhnya rahmat Allah amat dekat kepada orang-orang yang berbuat baik. Dan dialah yang meniupkan angin sebagai pembawa berita gembira sebelum kedatangan rahma Nya (hujan) hingga apabila angin itu telah membawa awan mendung, kami halau ke suatu daerah yang tandus, lalu kami turunkan hujan di daerah itu. Maka kami keluarkan dengan sebab hujan itu berbagai macam buah-buahan. Seperti itulah kami membangkitkan orang-orang yang telah mati, mudah-mudahan kamu mengambil pelajaran. Dan tanah yang baik, tanam-tanamannya tumbuh dengan seizin Allah, dan tanah yang tidak subur, tanaman-tanamannya hanya tumbuh merana. Demikianlah kami mengulangi tanda-tanda kebesaran (Kami) bagi orang-orang yang bersyukur.” (QS Al A’raf : 56-58)

Untuk menjaga bumi dari kerusakan tentunya diperlukan solusi tepat sehingga kelangsungan hidup manusia serta makhluk hidup lainnya di bumi dapat terjaga dengan baik. Sel surya merupakan salah satu *device* yang ramah lingkungan yang diharapkan dapat menjadi solusi dalam permasalahan ketersediaan listrik di Indonesia.

Indonesia merupakan salah satu negara tropis yang banyak mendapatkan penyinaran matahari sepanjang tahunnya sehingga sesuai jika sel surya dikembangkan di Indonesia. DSSC merupakan salah satu *device* sel surya yang mendapat perhatian besar sejak tahun 1991 karena memiliki keunggulan yang

sangatlah menarik terutama *cost production* yang rendah dan memiliki efisiensi yang tinggi (O'Regan *et al*, 1991). Kinerja dari DSSC dipengaruhi oleh beberapa sifat dari komponen *sensitizer* seperti spektrum absorpsi dan sifat redoks. DSSC adalah sel surya generasi ketiga pengembangan dari perangkat *photovoltaic* konvensional generasi pertama dan kedua. Pada generasi pertama dan kedua sel surya photovoltaic (PV) digunakan bahan-bahan yang sulit didapatkan sehingga biaya pembuatan bahan ini relatif tinggi. Generasi pertama dari sel surya ini digunakan bahan silikon (Si) sebagai *sensitizer*. Sel surya generasi pertama ini memiliki efisiensi sel surya yang tinggi, yaitu sekitar 20 % (Culp *et al*, 1991) namun untuk mendapatkan bahan silikon sebagai *sensitizer* ini tidak mudah hal ini disebabkan oleh ketersediaan bahan ini di alam masih sulit ditemukan sehingga untuk mendapatkan *sensitizer* berbahan silikon tidaklah murah. Pada generasi kedua digunakan semikonduktor polikristalin yang pada proses produksinya membutuhkan teknologi yang sangat canggih dan memerlukan biaya yang tidak sedikit. Untuk mengatasi permasalahan tersebut, maka Gratzel *et al* mengembangkan sel surya generasi ketiga yang dinamai *Dye Sensitizer Solar Cell* (DSSC). DSSC memiliki kelebihan dibandingkan dengan sel surya generasi kesatu dan generasi kedua, yaitu memiliki *cost performance* yang lebih baik. Akan tetapi DSSC yang terbaik saat itu masih memiliki kekurangan salah satunya adalah efisiensi lebih kecil bila dibandingkan dengan sel surya generasi pertama dan kedua, yaitu 12% (Mende *et al*, 2006; Chiba *et al*, 2006). Efisiensi yang kecil diakibatkan oleh banyak faktor, salah satunya *dye sensitizer* yang digunakan.

Kajiyama *et al* telah melaporkan sebuah series dari molekul zat warna *carbazole*, *indole*, dan *indoline* yang masing-masing ditambahkan gugus fungsi *anisyl* sebagai *donor* elektron, asam *cyanoacrylic* sebagai *acceptor* elektron dan *bi-3-n-hexylthyophenes* sebagai jembatan elektron (*bridge*) (Kajiyama *et al*, 2012). Zat warna yang digunakan pada penelitian Kajiyama *et al* memiliki efisiensi tertinggi sebesar 5,4 %. Pada penelitian Kajiyama *et al* tidak disertakan parameter struktur (panjang ikatan) dan sifat optik molekul (Kerapatan Orbital, *Osc. Strength*, % komposisi eksitasi), untuk melengkapi kekurangan tersebut maka dilakukan studi komputasi terhadap senyawa organik N-Carbazole-PhOMe,

N-Indole-PhOMe dan N-Indoline-PhOMe. Studi komputasi dilakukan agar penelitian yang sulit bila dilakukan secara eksperimen dapat dilakukan dengan perhitungan secara komputasi.

Studi komputasi dapat digunakan untuk memprediksikan struktur dan sifat suatu sistem kimia dengan cepat. Keunggulan dari metode ini dapat memprediksikan sifat molekul yang kompleks dengan hasil perhitungan yang berkorelasi secara signifikan dengan hasil eksperimen. Selain itu studi komputasi dapat menghemat biaya sebab hasil eksperimen dapat diramalkan sebelum eksperimen dilakukan sehingga dapat meminimalisir kegagalan saat eksperimen dilakukan (Pranowo, 2011). Dengan keunggulan-keunggulan dari studi komputasi, diharapkan *output* yang dihasilkan dari penelitian ini merupakan *output* dengan performa terbaik.

1.2 Rumusan Masalah Penelitian

Masalah yang akan dikaji pada penelitian ini antara lain sebagai berikut :

1. Bagaimana memprediksi parameter struktur (panjang ikatan), sifat optik (spektrum absorpsi) dan sifat elektrokimia (*band gap* HOMO/LUMO) dari senyawa organik N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe, N-Indoline-PhOMe?
2. Bagaimana kesesuaian hasil perhitungan komputasi senyawa organik N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe dan N-Indoline-PhOMe dengan hasil eksperimen Kajiyama *et al* sehingga dapat melengkapi hasil eksperimen Kajiyama *et al*?

1.3 Ruang Lingkup Penelitian

Metode yang digunakan pada dalam penelitian ini adalah *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent Density Functional Theory* (TDDFT). Semua perhitungan pada studi komputasi ini dihitung menggunakan *software* Gaussian 03 kemudian *output* yang dihasilkan di analisis lebih lanjut.

Hasil dari studi komputasi ini dapat melengkapi hasil eksperimen Kajiyama *et al* dengan hasil yang berkorelasi dengan hasil eksperimen. Kajian/studi pada penelitian ini terbatas pada senyawa organik N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe dan N-Indoline-PhOMe dalam fasa gas dan pelarut toluen.

Dalam Penelitian ini prediksi sifat-sifat dari senyawa N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe, N-Indoline-PhOMe dibatasi pada parameter struktur (optimasi struktur geometri dan panjang ikatan), sifat optik (spektrum absorpsi) dan sifat elektrokimia (*band gap* HOMO/LUMO).

1.4 Tujuan Penelitian

1. Untuk melengkapi hasil eksperimen Kajiyama *et al* yang sulit dilakukan secara eksperimen dengan menggunakan perhitungan komputasi.
2. Untuk memprediksi informasi data yang sulit di peroleh bila dilakukan secara eksperimen berupa parameter struktur (optimasi struktur geometri dan panjang ikatan), sifat optik (spektrum absorpsi) dan sifat elektrokimia (*band gap* HOMO/LUMO).

