

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Bahan bakar fosil adalah suatu sumber daya alam yang diperoleh dari fosil tanaman maupun hewan. Batu bara, minyak bumi, dan gas alam merupakan contoh dari bahan bakar fosil. Bahan bakar fosil ini sering digunakan sebagai sumber energi listrik, karena mudah didapatkan, murah, dan dapat menghasilkan listrik dengan cakupan yang cukup luas. Akan tetapi, penggunaan listrik melalui bahan bakar fosil memiliki banyak kerugian, diantaranya adalah tidak dapat diperbaharui dan menghasilkan polutan yang menyebabkan pencemaran lingkungan, sehingga diperlukan adanya alternatif lain.

Indonesia sebagai salah satu negara yang dilewati oleh garis khatulistiwa, memiliki keuntungan tersendiri karena matahari akan bersinar setiap tahunnya. Energi matahari merupakan sumber energi terbesar yang jika dieksploitasi dengan tepat, dapat berpotensi untuk menyediakan kebutuhan konsumsi energi dunia lebih lama (Greenpeace, 2009). Matahari bersifat ramah lingkungan sehingga menjadikannya sumber energi yang ideal dan menjanjikan sebagai alternatif dari bahan bakar fosil. Perkembangan penggunaan energi matahari telah menarik perhatian para saintis untuk meneliti konversi energi matahari menjadi energi listrik dengan sel surya.

Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) merupakan salah satu jenis sel surya yang pertama kali diperkenalkan oleh Brian O'Regan dan Michael Grätzel pada tahun 1991. DSSC merupakan sel surya generasi ketiga yang secara teknis dan ekonomis mampu digunakan sebagai alternatif jenis sel surya sebelumnya (Grätzel, 2003). DSSC dianggap sebagai salah satu sumber energi terbarukan yang cukup menjanjikan, ramah lingkungan dan hemat biaya karena DSSC menggunakan material yang murah,

proses fabrikasi yang mudah, dan efek samping pada lingkungan sangat minim, terutama dengan menggunakan *sensitizer* alami (Narayan, 2012). DSSC masih dapat bekerja secara efektif dalam kondisi cahaya yang redup (Shahid *et al.*, 2013). DSSC terdiri dari beberapa komponen utama seperti zat pewarna tersensitisasi (*dye sensitizer*), material semikonduktor seperti TiO_2 atau ZnO, kaca *Transparent Conducting Oxide* (TCO), elektroda pembanding, dan elektrolit (Kusumawati *et al.*, 2017).

Dye sebagai *sensitizer* berfungsi untuk menyerap dan mengubah sinar matahari menjadi energi listrik. Secara umum, *sensitizer* dibagi menjadi dua macam yaitu *sensitizer* logam kompleks dan *sensitizer* alami (Aliah *et al.*, 2016). Meskipun efisiensi yang dihasilkan cukup besar, *sensitizer* logam kompleks memiliki kekurangan, yakni harga produksi yang relatif mahal dan proses sintesis yang membutuhkan banyak waktu. *Sensitizer* alami dapat dijadikan alternatif karena bahannya mudah didapatkan, seperti pada bunga, daun, buah, dan lain sebagainya. Selain itu *sensitizer* alami juga memiliki beberapa kelebihan seperti preparasi yang mudah, mengalami biodegradasi yang sempurna, ramah lingkungan, dan yang paling penting adalah tingginya reduksi pada kegunaan logam mulia (Kumara *et al.*, 2017).

Namun demikian, efisiensi DSSC dengan *sensitizer* alami masih relatif rendah sehingga berbagai penelitian dilakukan untuk meningkatkannya, baik penelitian berbasis eksperimen maupun berbasis komputasi. Metode eksperimen biasanya dilakukan untuk mengetahui pengaruh beberapa komponen DSSC terhadap efisiensinya. Adapun beberapa penelitian berbasis eksperimen yang telah dilakukan diantaranya dengan mengubah material penyusun DSSC seperti: variasi *dye*, semikonduktor, penggunaan elektrolit, elektroda pembanding, bahkan dengan menggunakan variabel lain seperti waktu maupun pH. Sedangkan metode komputasi biasanya digunakan untuk menentukan struktur elektronik *dye* maupun hubungan antara *dye* dan semikonduktor, yang dapat dijadikan sebagai acuan pada penelitian berbasis eksperimen (Kusumawati *et al.*, 2017).

Metode komputasi memiliki beberapa kelebihan jika dibandingkan dengan metode eksperimen. Pada metode eksperimen, penelitian perlu dilakukan di laboratorium, sedangkan penelitian komputasi lebih bersifat fleksibel. Selain itu, metode komputasi juga dapat menghemat waktu, biaya, dan juga dapat mengurangi kemungkinan gagal dalam penelitian (Akbar, 2013).

Metode komputasi dengan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) adalah metode yang sering digunakan untuk menganalisis struktur elektronik *sensitizer* pada keadaan dasar (*ground state*). Molekul organik seperti flavonoid, betalain, karotenoid, dan klorofil yang terkandung pada tumbuhan (digunakan sebagai *sensitizer*), telah banyak diteliti dengan menggunakan metode DFT. Lakshmanakumar *et al.* (2017) melakukan penelitian untuk mengetahui sifat elektronik dari pelargonidin yang banyak terkandung dalam buah *berry*. Faiz *et al.* (2017) menggunakan metode DFT untuk menganalisis pigmen hijau. Hasil penelitiannya menjelaskan bahwa adanya pergeseran level energi HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) dan LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) yang akan mempengaruhi proses penyerapan energi matahari. Kumara *et al.* (2013) melakukan penelitian menggunakan struktur teh hitam yang mengandung salah satu molekul kimia yaitu theaflavin. Dalam penelitiannya digunakan metode komputasi DFT dan *Time-Dependent Differential Functional Theory* (TD-DFT). Hasil dari penelitian tersebut menyatakan bahwa molekul theaflavin memiliki potensi untuk meningkatkan efisiensi DSSC.

1.2 Rumusan Masalah

Uraian pada latar belakang dijadikan sebagai panduan dilaksanakannya penelitian ini, dengan demikian masalah dapat ditentukan sebagai berikut:

1. Bagaimana struktur elektronik dari molekul theaflavin?
2. Bagaimana struktur elektronik dari molekul sianidin-3-glukosida?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui struktur elektronik berupa: total energi, HOMO-LUMO, dan energi celah pita (*band gap energy*) dari molekul theaflavin dan sianidin-3-glukosida, sebagai pewarna tersensitisasi yang digunakan pada DSSC.

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat untuk dijadikan sebagai referensi/acuan penelitian selanjutnya, baik yang berbasis komputasi maupun eksperimen.

1.5 Batasan Masalah Penelitian

Adapun batasan masalah dalam penelitian ini diantaranya:

- a. Analisis hanya dilakukan pada molekul theaflavin dan juga molekul sianidin-3-glukosida.
- b. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah metode *Density Functional Theory* (DFT) melalui *software Quantum ESPRESSO*.

1.6 Metode Pengumpulan Data

Dalam penelitian ini, digunakan dua metode pengumpulan data, yaitu:

- a. Studi Literatur
Studi literatur dilakukan untuk mengumpulkan beberapa informasi yang berkaitan dengan penelitian. Informasi tersebut didapatkan dari beberapa referensi seperti jurnal, hasil penelitian (tugas akhir), buku, maupun artikel.
- b. Simulasi
Simulasi dimulai dengan menggambarkan struktur molekul theaflavin dan sianidin-3-glukosida pada *software* GaussView. Selanjutnya, dilakukan proses *running input file* dengan menggunakan *software* Quantum ESPRESSO.

1.7 Sistematika Penulisan

Penulisan skripsi disusun dalam beberapa bagian:

- BAB I Pendahuluan, berisi mengenai apa yang melatarbelakangi dilakukannya penelitian, rumusan masalah, tujuan, manfaat penelitian, apa saja hal yang membatasi penelitian, metode pengumpulan data, dan sistematika penulisan laporan penelitian.
- BAB II Dasar Teori, berisi materi yang berkaitan dengan penelitian yang dilakukan.
- BAB III Metodologi Penelitian, berisi tempat dan waktu dilaksanakannya penelitian, alat yang digunakan, model molekul yang digambarkan, beberapa optimasi yang dilakukan, serta rangkaian prosedur penelitian.
- BAB IV Hasil dan Pembahasan, berisi data-data penelitian dan beberapa analisis mengenai hasil penelitian.
- BAB V Penutup, berisi kesimpulan dari seluruh hasil penelitian dan saran yang kiranya dapat dilakukan untuk penelitian selanjutnya.

