



# Prosiding

**SEMINAR NASIONAL *BASIC SCIENCE VI***

*Sains Membangun Karakter dan Berpikir Kritis  
Untuk Kesejahteraan Masyarakat*

*Ambon, 07 Mei 2014*

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS PATTIMURA  
AMBON**

Hak cipta dilindungi Undang-Undang

Cetakan I, Agustus 2014

Diterbitkan oleh: Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Pattimura

ISBN: 978-602-97552-1-2

Deskripsi halaman sampul : Gambar yang ada pada cover adalah kumpulan benda-benda langit dengan berbagai fenomena

## KOMPUTASI TAHAP AWAL PENGEMBANGAN MATERIAL AKTIF SEL SURYA ORGANIK

Yusthinus Thobias Male

Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Pattimura  
Jl. Ir. M. Putuhena, Kampus Unpatti Poka, Ambon 97233  
*E-mail*: yusmale@fmipa.unpatti.ac.id

### ABSTRAK

Material aktif pada sel surya organik mengandung polimer molekul organik dengan elektron  $\pi$  (*phi*) terkonyugasi yang bersifat sebagai gugus kromofor serta mengandung pasangan donor dan akseptor elektron. Salah satu molekul donor yang telah dilaporkan sintesisnya adalah molekul dengan kerangka dasar poli(2,7-dihidroindeno[2,1-a]indene (PININE), dengan turunan PININE-DTBT, PININE-DHTBT dan PININE-DHOTBT. Belum ada penjelasan mengenai pengaruh substituen terhadap sifat elektroniknya. Metode komputasi digunakan untuk mempelajari pengaruh tersebut. Model komputasi yang digunakan adalah B3LYP/6-31G(d). Penelitian ini menunjukkan bahwa substituen pendorong elektron menurunkan energi total system dibandingkan senyawa tanpa substituen. Diperlukan komputer dengan kemampuan tinggi untuk menyelesaikan perhitungan yang melibatkan molekul besar.

**Kata kunci** : Sel surya organik, polimer terkonyugasi, PININE, substituen, komputasi

### PENDAHULAN

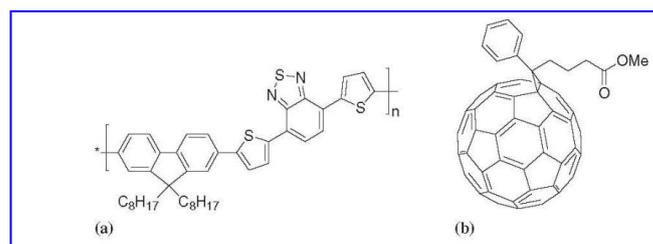
Indonesia yang dilewati oleh garis khatulistiwa dan menerima panas matahari yang lebih banyak daripada negara lain, mempunyai potensi yang sangat besar untuk mengembangkan pembangkit listrik tenaga surya sebagai alternatif energi terbarukan pengganti bahan bakar fosil yang bersih, tidak berpolusi, aman dan persediaannya tidak terbatas. Perkembangan yang pesat dari industri sel surya (*solar cell*) yang telah menyentuh level 1000 MW sejak tahun 1994 membuat banyak kalangan semakin melirik sumber energi masa depan yang sangat menjanjikan ini. Saat ini dikenal tiga jenis/tipe sel surya yaitu; tipe silikon wafer kristal tunggal dan polikristal, tipe lapis tipis (*thin film*) serta sel surya tipe organik (West, 2003).

Sel surya tipe silikon wafer kristal tunggal menghasilkan efisiensi yang sangat tinggi (sampai 20%) tetapi masalah terbesar yang dihadapi dalam pengembangan produksi massal adalah harga yang sangat tinggi sehingga membuat panel sel surya yang dihasilkan menjadi tidak efisien sebagai sumber energi alternatif. Untuk menghasilkan sel surya yang lebih ekonomis, dibuat sel surya berbasis silikon wafer poli kristal. Sel surya tipe ini memiliki

harga pembuatan yang lebih murah meskipun tingkat efisiensinya lebih rendah jika dibandingkan dengan silikon kristal tunggal. Generasi kedua sel surya adalah tipe lapis tipis (*thin film*). Ide pembuatan sel surya tipe ini adalah pengurangan biaya produksi karena hanya menggunakan kurang dari 1% dari bahan baku silikon jika dibandingkan tipe pertama (silikon wafer). Efisiensi tertinggi saat ini yang bisa dihasilkan oleh jenis solar sel lapisan tipis ini adalah sebesar 19,5% yang berasal dari solar sel *Copper Indium Gallium Selenide* (CIGS) [Brabec dkk., 2003]. Saat ini 84% pangsa pasar masih didominasi sel surya tipe silikon wafer. Pada taraf aplikasi, sel surya yang ada masih memiliki kelemahan karena sukar ditangani, harga yang masih mahal serta proses instalasi yang rumit. Produksi dari sel surya anorganik berbasis silikon masih membutuhkan temperatur dan kondisi vakum yang tinggi yang berakibat tingginya biaya produksi (Petritsch, 2000).

Berbagai riset diupayakan agar harga sel surya menjadi lebih murah dan fleksibel menghasilkan sel surya generasi ketiga yaitu sel surya polimer atau disebut Sel Surya Organik (SSO). Material organik pada SSO mengandung polimer dengan elektron  $\pi$  (*phi*) terkonyugasi yang bersifat sebagai gugus kromofor serta mengandung pasangan donor dan akseptor elektron. SSO memiliki keunggulan dibanding sel surya berbasis silikon karena biaya fabrikasi yang rendah, ringan serta fleksibel tetapi aplikasinya masih menemui kendala karena efisiensinya baru mencapai 5% PCE (*power conversion energy*).

Dalam prakteknya, molekul donor sebagai penyerap foton, misalnya poli(3-heksiltiofene-P3HT) dan molekul akseptor, misalnya [6,6]-fenil C61-asam butrat metil ester (PCBM) direkatkan bersama (*blended*). Gambar 1 menyajikan struktur molekul P3HT dan PCBM.

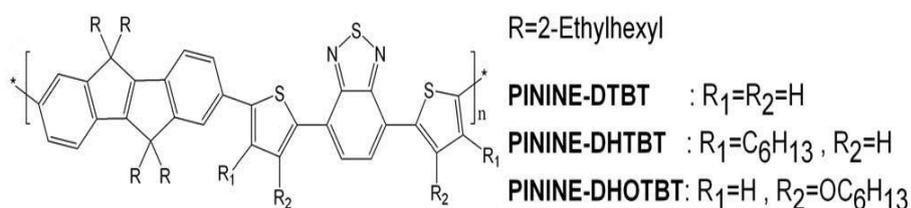


Gambar 1. Struktur polimer P3HT (a) dan molekul akseptor PCBM (b)

Tiga parameter utama yang menentukan efisiensi atau tingkat konversi energi matahari menjadi energi listrik adalah; arus pendek sirkuit ( $J_{sc}$ ), tegangan sirkuit terbuka ( $V_{oc}$ ) dan faktor pengisian (FF) (Niggemann dkk., 2008). Karena SSO mengandung polimer donor dan akseptor PCBM,  $V_{oc}$  adalah gambaran perbedaan (gap) energi antara HOMO (*highest occupied molecular orbital*) dari donor dan LUMO (*lowest unoccupied molecular orbital*) dari akseptor (Yun Zhao dkk., 2008). Penelitian laboratorium untuk mensintesis polimer terkonyugasi diarahkan untuk menghasilkan kopolimer yang mengandung pengulangan satuan donor-akseptor (D-A) dalam satu molekul sehingga delokalisasi intermolekul lebih

efektif. Di samping kopolimer P3HT yang telah dikenal, kopolimer yang telah dihasilkan antara lain; 4,7-di-2-tienil-2,1,3-benzotiodiazol (DTBT yang dikombinasikan dengan akseptor fluorene, 2,7-carbazol dan 4,4-dialkil-4H-siklopental[2,1-b:3,4-b']ditiopen-2,6-dil (Shinuk Cho dkk., 2008).

Polimer terkonyugasi yang akan diteliti adalah poli(2,7-dihidroindeno[2,1-a]indene-co-4,7-di-2-tienil-2,1,3-benzotiodiazol (PININE-DTBT), poli(2,7-dihidroindeno[2,1-a]indene-co-4,7-bis(4-heksil-2-tienil)-2,1,3-benzo-tiodiazol (PININE-DHTBT) dan poli(2,7-dihidroindeno[2,1-a]indene-co-4,7-bis(3-heksiloksi-2-tienil)-2,1,3-benzotiodiazol (PININE-DHOTBT) (Gambar 2), dengan molekul akseptor elektron yang diteliti adalah PCBM (Gambar 2). Ketiga jenis polimer ini telah disintesis dan diuji sifatnya tetapi belum diperoleh penjelasan kuantitatif mengenai pengaruh substituen terhadap perbedaan energi HOMO-LUMO dibandingkan senyawa tanpa substituen (Shinuk Chao dkk. (2008).



Gambar 2. Struktur polimer PININE-DTBT, PININE-DHTBT dan PININE-DHOTBT.

Salah satu parameter yang menentukan efisiensi atau tingkat konversi energi matahari menjadi energi listrik adalah tegangan sirkuit terbuka. Untuk SSO,  $V_{oc}$  adalah gambaran perbedaan (gap) energi antara HOMO (*highest occupied molecular orbital*) dari donor dan LUMO (*lowest unoccupied molecular orbital*) dari akseptor. Metode sintesis yang digunakan untuk menghasilkan material polimer terkonyugasi umumnya bersifat coba-coba (*trial and error*) sehingga banyak senyawa kopolimer yang baru justru ditemukan secara tidak sengaja (*serendipity*). Hal ini terjadi karena metode eksperimen tidak dapat meramalkan sifat senyawa yang belum disintesis.

Untuk meramalkan sifat suatu senyawa terkonyugasi, teori ikatan kimia tidak dapat memprediksi perbedaan energi HOMO-LUMO dari senyawa yang belum disintesis. Kimia komputasi berbasis struktur teori elektron sangat bermanfaat dalam pengujian metode dan peramalan reaksi serta sifat molekul atau sistem kimia yang dikaji langsung dapat dibandingkan dengan hasil eksperimen. Kimia komputasi sangat bermanfaat dalam pengujian metode dan peramalan reaksi serta sifat molekul atau sistem kimia yang dikaji langsung dapat dibandingkan dengan hasil eksperimen (Cramer, 2004). Karena melibatkan distribusi elektron, metode komputasi yang digunakan pada penelitian ini adalah *ab initio* yaitu Hartree-Fock (HF).

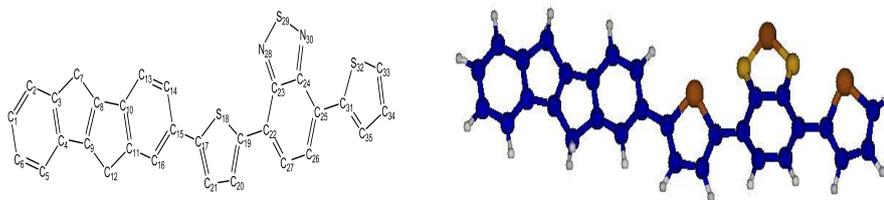
## METODE PENELITIAN

Perangkat penelitian yang digunakan untuk melakukan studi komputasi terdiri dari perangkat keras dan perangkat lunak. Perangkat keras berupa empat buah komputer dengan spesifikasi prosesor Xeon 3.0 GHz dan *Double Data Random Access Memory* (DDRAM) 2 GHz. Keempat komputer digabungkan membentuk klaster (*cluster*) untuk mendapatkan sistem komputer dengan kinerja tinggi. Dalam penelitian ini digunakan sistem operasi berbasis Linux, yaitu Linux Mandriva 2010.1. Untuk perangkat lunak, digunakan GAMESS-US, Molden 4.7, wxMacMolPlt dan GaussSum-2.1.4. GAMESS-US digunakan untuk melakukan semua perhitungan komputasi molekul seperti optimasi geometri, perhitungan frekuensi, perhitungan energi keadaan dasar, keadaan tereksitasi dan pengaruh pelarut. Molden 4.7 dan wxMacMolPlt digunakan untuk membuat koordinat awal struktur molekul serta melihat keluaran (*viewer*) sedangkan GaussSum-2.1.4 digunakan untuk melihat spektrum IR hasil perhitungan.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Pengaruh substituen terhadap parameter geometri molekul

Optimasi geometri dilakukan untuk mengetahui pengaruh substituen terhadap parameter geometri molekul; Jarak ikatan antar-atom (Å), sudut ikatan (°) dan sudut dihedral (°). Sistem penomoran kerangka dasar molekul PININE serta hasil optimasinya ditunjukkan pada Gambar 3.



Gambar 3. (Kiri) struktur dasar polimer terkonyugasi PININE; (Kanan) hasil optimasi. Optimasi dilakukan hingga struktur tersebut konvergen yang menandakan bahwa perhitungan telah selesai dan struktur tersebut telah mencapai konformasi yang paling stabil. Hasil perhitungan disajikan pada Tabel 1.

Tabel 1. Pengaruh substituen terhadap panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut dihedral

Parameter Geometri		Molekul			
		PININE	DTBT	DHTBT	DHOTBT
Panjang ikatan (Å)	r <sub>3-7</sub>	1,51	1,53	1,53	1,53
	r <sub>8-7</sub>	1,49	1,51	1,51	1,51
	r <sub>9-12</sub>	1,49	1,51	1,51	1,51
	r <sub>11-12</sub>	1,51	1,53	1,53	1,53
	r <sub>17-21</sub>	1,41	1,41	1,41	1,39
	r <sub>19-20</sub>	1,41	1,41	1,40	1,40
	r <sub>31-35</sub>	1,40	1,40	1,39	1,39
	r <sub>33-34</sub>	1,39	1,39	1,39	1,38
Sudut ikatan (°)	<4 3 7	110,25	110,54	110,58	110,58
	<9 8 7	110,42	110,89	110,97	110,89
	<8 9 12	110,40	110,99	110,99	110,95
	<12 11 10	110,02	110,47	110,38	110,47
	<21 17 15	126,51	127,18	131,84	126,88
	<20 19 22	128,83	129,33	129,06	126,97
	<25 31 35	129,32	129,47	129,22	128,09
	<32 33 34	111,80	111,83	112,04	112,18
Sudut dihedral (°)	D <sub>7 3 4 5</sub>	-179,93	-179,08	-179,82	-179,52
	D <sub>7 8 9 12</sub>	179,86	171,93	172,55	170,63
	D <sub>10 8 9 12</sub>	-0,11	-3,08	-2,31	-3,28
	D <sub>12 11 10 8</sub>	0,01	1,53	2,95	1,04
	D <sub>21 17 15 14</sub>	0,20	3,00	10,24	-9,69
	D <sub>20 19 22 23</sub>	0,22	-2,87	-2,48	90,53

Pada Tabel 1, terlihat bahwa selisih panjang ikatan antara molekul dasar dan molekul tersubstitusi untuk r<sub>3-7</sub> dan r<sub>8-7</sub> atau r<sub>9-12</sub> dan r<sub>11-12</sub> memiliki selisih nilai yang lebih besar, karena pada molekul DTBT, DHTBT, dan DHOTBT terjadi pemanjangan ikatan 0,02 Å akibat efek sterik substituen 2-Etil heksil. Untuk sudut ikatan, ketiga substituen tidak memperlihatkan perbedaan yang signifikan sedangkan untuk sudut dihedral, substitusi gugus alkil dan alkoksi pada molekul DHTBT dan DHOTBT memberikan pengaruh yang cukup signifikan.

#### Pengaruh substituen terhadap energi elektronik ( $E_{el}$ )

Perhitungan dilakukan untuk mengetahui pengaruh substituen terhadap energi elektronik ( $E_{el}$ ) molekul donor (PININE-DTBT, PININE-DHTBT dan PININE-DHOTBT) dan molekul akseptor (PCBM), yang hasilnya disajikan pada Tabel 2.

Tabel 2. Energi elektronik ( $\text{kJ mol}^{-1}$ ) molekul donor dan akseptor.

Polimer Terkonjugasi	$E_{el}$
PININE-DTBT	-1422,08
PININE-DHTBT	-1835,81
PININE-DHOTBT	-1935,84

Pada Tabel 2, terlihat bahwa energi total dari molekul DHOTBT lebih rendah. Dapat dikatakan bahwa substituen yang meruah (*bulk*) serta bersifat pendorong elektron menyebabkan delokalisasi elektron dalam sistem cincin PININE semakin efektif sehingga energi sistem menurun atau molekul lebih stabil. Untuk mengetahui pengaruh substituen terhadap muatan atom, selisih energi HOMO-LUMO serta spektrum IR dan UV-Vis, dibutuhkan kluster komputer dengan performa yang lebih baik.

## KESIMPULAN DAN SARAN

### Kesimpulan

1. Perhitungan komputasi tahap awal telah berhasil dilakukan untuk mengetahui pengaruh substituen terhadap struktur molekul polimer terkonyugasi turunan PININE.
2. Substituen yang meruah (*bulk*) serta bersifat pendorong elektron menyebabkan delokalisasi elektron dalam sistem cincin PININE semakin efektif sehingga energi sistem menurun sehingga molekul lebih stabil
3. Metode komputasi sangat bermanfaat untuk mengetahui pengaruh struktur terhadap sifat elektronik suatu molekul.

### Saran

Diperlukan kluster komputer dengan kemampuan lebih baik (*high performance computing system*) untuk melakukan perhitungan dengan molekul besar.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Rektor Universitas Pattimura yang telah membiaya penelitian ini melalui DIPA Universitas Pattimura melalui skim Penelitian Unggulan Perguruan Tinggi No.07.3/UN13.2/SPK-PJ-HUPT/2013 tanggal 22 Juli 2013.

## DAFTAR PUSTAKA

- Brabec, C. J., Sariciftci, N.S., Hummelen, J.C., dan Gregg, B.A.(2003): *J. Phys. Chem.B* **107**, 4688.
- Cramer, 2004, *Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models*, Edisi kedua, John Wiley and Sons, Chichester.
- Niggemann, M., Riede, M., Gombert, A., dan Leo, K. (2008): *Phys. Stat. Sol. (a)* **205**, No.12, 2862-2874.
- Petritsch, K., 2000, *Organic Solar Cell Architectures*, Cambridge and Graz University, Austria
- Shinuk Cho, Jung Hwa Seo, Sun Hee Kim, Suhee Song, Youngeup Jin, Kwang Lee, Hongsuk Suh dan Heeger, A.J. (2008): *Applied Physics Letters* , **93**, 263301.
- Yun Zhao, Zhiyuan Xie, Yao Qu, Yanhou Geng and Lixiang Wang (2008): *Synthetic Metals*, **158**, 908-911.
- West, K., 2003. *Solar Cell Beyond Silicon*.Riso International Energy Confrence.