

# BAB 1

## PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Salah satu sumber energi terbarukan yang paling menarik di Asia adalah energi matahari. Itu adalah sumber energi alternatif yang bisa mengatasi krisis energi dan dapat menggantikan yang konvensional dengan sumber daya energi yang tidak terbatas. Baru-baru ini, sepenuhnya perovskit anorganik juga menghasilkan efisiensi yang menjanjikan, dan menjadikan berpotensi sebagai energi alternatif yang stabil dan efisien. Energi ini dapat dimanfaatkan melalui sel surya energi matahari, yang secara langsung mengubah sinar matahari menjadi energi listrik dengan kerugian terkecil adalah emisi gas rumah kaca. Perovskit anorganik sangat menarik untuk desain perangkat elektronik, seperti dioda pemancar cahaya dan perovskit sel surya karena biaya yang rendah [1].

Selama 8 tahun terakhir, logam halida organik-anorganik perovskit telah menjadi beberapa bahan yang paling terkenal karena mereka dapat menunjukkan efisiensi sel surya yang tinggi, melebihi 20%. Namun, karena sifat *volatile* dan higroskopis dari kation organik, perovskit menderita ketidakstabilan kimia, terutama pada suhu tinggi. Oleh karena itu, semua *Inorganic Metal Halide* (IMH) perovskites  $\text{CsPbX}_3$  (X= Br, Cl dan I) dengan cepat muncul sebagai alternatif yang menjanjikan karena kestabilan superior dan sifat-sifat yang sebanding, seperti emisi yang kuat, hasil kuantum fluoresensi tinggi dan celah pita memiliki nilai yang terbaik [2].

Efisiensi bahan sel surya perovskit bervariasi dengan berbagai nilai celah pita, sementara itu nilai celah pita tergantung pada parameter fisik yang berbeda dan fase transisi. Rumus struktur  $\text{ABX}_3$  diidentifikasi A sebagai *ion organik* kecil, B sebagai atom atom logam *divalent* dan X adalah halogen. Untuk memahami efisiensi sel surya dibutuhkan pengetahuan lengkap tentang parameter yang memengaruhi celah pita sebagai semua fase senyawa perlu diketahui. Moller

melaporkan bahwa cesium timah halida memiliki struktur perovskit, seperti yang disebutkan di atas, dengan rumus umum  $\text{CsPbX}_3$  [1].

Tingginya kinerja IMH perovskites telah diterapkan untuk perangkat lainnya seperti optoelektronik, yaitu *photodetectors* (PD) dan *light-emitting-diodes* (LED), menunjukkan besarnya potensi untuk kemajuan masa depan. Diketahui bahwa bahan IMH perovskites biasanya menunjukkan stabilitas yang lebih tinggi. Meskipun kinerja bagus, namun IMH Perovskit masih menghadapi tantangan besar yaitu masalah stabilitas. Biasanya, IMH perovskit menampilkan panas yang sangat rendah suhu dekomposisi, karena mereka mengandung kation monovalen organik yang tidak stabil. Misalnya,  $\text{MAPbI}_3$  terurai dengan cepat dalam 30 menit pada 150 C di udara [2].

Diketahui bahwa bahan anorganik bisa menunjukkan stabilitas yang lebih tinggi dari bahan organik, terutama pada suhu tinggi. Karena itu, kation organik diganti dengan kation anorganik monovalen dalam struktur perovskite yang akan di uji. Meskipun campuran kation perovskit dapat menampilkan kinerja yang sebanding dan stabilitas superior dibandingkan dengan perovskit OMH, kestabilan masih menjadi masalah karena keberadaan kation organik [2].

Untuk alasan ini, perovskit *inorganic metal halide* (IMH) tanpa komponen organik  $\text{CsPbX}_3$  (X= Br, Cl dan I) diusulkan dan dikembangkan dengan cepat dalam 4 tahun terakhir. Pada tahap awal, PSC (*perovskite solar cells*) hanya berdasarkan pada perovskit IMH PCE (*power conversion efficiency*) yang dipamerkan sebesar 6%. Baru-baru ini, PCE dari IMH PSC (berdasarkan  $\text{CsPbI}_3$ ) telah melampaui 10%. Di awal 2015, Protesescu *et al.* menggunakan nanokristal  $\text{CsPbX}_3$  menggunakan pendekatan injeksi panas. Sejak saat itu, para peneliti meneliti tentang Struktur nano  $\text{CsPbX}_3$  dan telah bermunculan dengan cepat, terutama aplikasi dalam LED [2].

## 1.2. Rumusan Masalah

Penjelasan pada latar belakang dijadikan sebagai panduan pelaksanaan penelitian ini, dengan demikian rumusan masalah dapat ditentukan sebagai berikut:

1. Bagaimana struktur pita elektronik dari molekul  $\text{CsPbX}_3$  (X= Br, Cl dan I).
2. Bagaimana grafik *Density of State* (DoS) dan *Projected Density of State* (PDoS)  $\text{CsPbX}_3$  (X= Br, Cl dan I).

## 1.3. Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui struktur elektronik berupa: *band gap* / celah pita elektronik pada senyawa  $\text{CsPbX}_3$  (X= Br, Cl dan I) serta grafik *Density of State* (DoS) dan *Projected Density of State* (PDoS).

## 1.4. Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat untuk dijadikan sebagai referensi/acuan penelitian selanjutnya, baik yang berbasis komputasi maupun eksperimen, khususnya di bidang komputasi tentang perovskite dan semikonduktor.

## 1.5. Batasan Masalah

Dilakukan penelitian ini tentu memiliki Batasan masalah agar penelitian dapat berjalan dengan sesuai dan tidak keluar dari topik yang diteliti. Batasan masalah dalam penelitian ini adalah hanya menggunakan struktur kristal berbentuk ortorombik..

## 1.6 Metode Pengumpulan Data

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

- 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.
- Simulasi dimulai dengan 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.