

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Hukum kekekalan energi menyatakan bahwa energi total sistem yang terisolasi akan tetap konstan, yang berarti energi tidak dapat diciptakan atau dimusnahkan sebaliknya, energi hanya bisa diubah dari satu bentuk ke bentuk lainnya. Hukum kekekalan energi ini membuat para ilmuwan berfikir bagaimana untuk membuat suatu energi yang dapat diperbaharui terus menerus tanpa banyak efek yang buruk terhadap kelestarian lingkungan. Mengandalkan energi fosil merupakan cara yang tidak bijak karena fosil akan habis jika digunakan secara terus menerus.

Pemanfaatan energi matahari sebagai sumber energi merupakan cara yang bijak karena matahari merupakan sumber energi yang tidak terbatas. Penggunaan energi matahari sebagai sumber energi mendorong pesatnya perkembangan sel surya sehingga banyak melahirkan sel surya jenis baru.

Material dengan struktur perovskit mulai banyak diteliti untuk diterapkan pada berbagai bidang seperti sel surya dan sensor karena banyak keunggulannya dibandingkan dengan sel surya berbahan lain. Saat ini sel surya perovskit memiliki efisiensi yang tinggi dari DSSC dan mendekati efisiensi sel surya lapisan tipis (Mei, et al., 2015).

Perovskit halida dengan struktur umum ABX_3 dengan A adalah Alkali, B adalah Pb atau Sn, dan X merupakan Cl, Br dan I telah banyak diteliti sebagai perovskit yang berpotensi pada pengaplikasian sel surya (Chung, et al., 2012). Efisiensi penggunaan perovskit pada sel surya naik hingga 23,3% dengan peningkatan yang sangat pesat pada beberapa molekul (Burschka, et al., 2013).

Untuk menentukan sifat-sifat dari suatu material perovskit perlu dilakukannya karakterisasi pada material tersebut. Penelitian ini bertujuan agar mengetahui sifat

fonon pada material perovskit. Sifat fonon ini sangat bermanfaat untuk mengetahui konduktivitas, kehantaran panas, kestabilan suatu unsur dan lain sebagainya yang bersangkutan dengan karakteristik struktur elektronik bahan. Perhitungan sifat fonon pada material perovskit ini menggunakan DFT (*Density Functional Theory*) sebagai teori dasar penelitian ini dan menggunakan *software* Quantum ESPRESSO sebagai *software* untuk mengkompilasi kode perintah yang diinginkan.

DFT (*Density Functional Theory*) adalah sebuah metode *modelling* pada mekanika kuantum secara komputasi dan biasa digunakan untuk meneliti struktur elektronik suatu molekul. Metode DFT ini merupakan salah satu teori dasar yang mendukung *software* Quantum ESPRESSO dalam perhitungan beberapa sifat suatu molekul, yaitu polarisabilitas, fonon, intensitas Raman dan absorpsi Infra Merah.

Perhitungan sifat fonon pada penggunaan sel surya berguna untuk mengetahui sel *phonovoltaic* (pV) yang berfungsi untuk mengubah energi vibrasi (fonon) pada arus langsung seperti pada efek fotofoltaik dalam sel fotofoltaik yang mengubah cahaya (foton) menjadi energi.

Beberapa penelitian sebelumnya mengenai perhitungan sifat fonon pada perovskit anorganik belum banyak yang menggunakan CsSnX_3 ($\text{X}=\text{Cl}$, Br dan I) dalam fase kubik sebagai molekul yang diteliti. Kebanyakan dari penelitian sebelumnya menggunakan atom Pb sebagai kation sehingga dengan penggunaan Sn sebagai kation akan memberikan hasil yang berbeda karena Pb dan Sn memiliki jari-jari atom yang berbeda (Guo, et al., 2017). Beberapa penelitian sebelumnya, yang berhubungan dengan penelitian ini adalah (Huang & Lambrecht, 2017) yang mencari kurva dispersi fonon pada molekul CsSnX_3 ($\text{X}=\text{Cl}$, Br , I) dengan menggunakan Teknik hamburan neutron inelastik. Hasil kurva dispersi dari penelitian ini dibandingkan dengan kurva dispersi pada referensi yang dilakukan oleh Ling Yi Huang dan Lambercht. (Feldstein, et al., 2020) yang mencari kurva fonon dispersi dan *Phonon Density of States* (PDOS) pada CsSnX_3 ($\text{X}=\text{Cl}$, Br , I) dalam fase orthogonal dan tetragonal, pada penelitian ini menunjukkan bahwa CsSnX_3 ($\text{X}=\text{Cl}$, Br , I) dalam fase orthogonal dan tetragonal merupakan molekul yang stabil karena tidak ada frekuensi gelombang yang negatif (imajiner). (Zhao, et

al., 2019) yang meneliti mengenai *doping* CsSnX_3 ($X=\text{Cl, Br, I}$) dalam fase kubik dengan menggunakan CsX_3 ($X=\text{Cl, Br, I}$) sebagai upaya pencarian perovskit CsSnX_3 ($X=\text{Cl, Br, I}$) dalam fase kubik yang lebih stabil.

1.2 Rumusan Masalah

Penelitian ini memiliki beberapa rumusan masalah, yaitu:

1. Bagaimana bentuk kurva dispersi fonon dan kestabilan molekul CsSnX_3 ($X= \text{Cl, Br, I}$).
2. Bagaimana bentuk kurva fonon DOS dan sebaran mode fonon pada molekul CsSnX_3 ($X= \text{Cl, Br, I}$).
3. Berapa nilai konstanta dielektrik dari molekul CsSnX_3 ($X=\text{Cl, Br, I}$)

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dilakukannya penelitian ini, yaitu untuk:

1. Mengetahui bentuk kurva dispersi fonon dan kestabilan molekul CsSnX_3 ($X= \text{Cl, Br, I}$).
2. Mengetahui bentuk kurva fonon DOS dan sebaran mode fonon pada molekul CsSnX_3 ($X= \text{Cl, Br, I}$).
3. Mengetahui nilai konstanta dielektrik pada molekul CsSnX_3 ($X=\text{Cl, Br, I}$).

1.4 Batasan Masalah

Penelitian ini memiliki beberapa batasan masalah, yaitu:

1. Semua data yang dihasilkan berlaku pada molekul CsSnX_3 ($X= \text{Cl, Br, I}$).
2. Penelitian ini dilakukan pada molekul CsSnX_3 ($X= \text{Cl, Br, I}$) dalam fase kubik.
3. Pengolahan data menggunakan *software* Quantum Espresso.

1.5 Metode Pengumpulan Data

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

- a. Studi literatur, dilakukan sebagai tinjauan pustaka atau referensi dari beberapa sumber yang diambil seperti paper, jurnal ilmiah serta buku yang berkaitan dengan penelitian ini.
- b. Komputasi, dilakukan sebagai pengambilan data sekaligus dengan pengolahan data berdasarkan beberapa sumber pada studi literatur. Pada tahap komputasi ini menggunakan Quantum Espresso sebagai aplikasi untuk pengambilan dan pengolahan data.

1.6 Sistematika Penulisan

Pada pokok pembahasan penelitian ini, untuk setiap babnya dapat diuraikan secara singkat dan jelas seperti berikut:

- BAB I Pendahuluan berisikan tentang latar belakang di lakukannya penelitian ini, tujuan, masalah yang diambil dan batasan dari masalah-masalah itu sendiri.
- BAB II Tinjauan Pustaka yang berisikan teori-teori yang mendasari penelitian ini yang bersumber dari buku dan jurnal-jurnal dengan sumber terpercaya.
- BAB III Metode Penelitian yang berisikan tentang metode atau cara mendapatkan data pada penelitian ini secara lengkap dan rinci, diagram alir dan cara pengolahan data yang akan digunakan pada penelitian ini.