

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar belakang

Energi surya adalah salah satu sumber energi terbarukan yang paling menarik di Asia dan merupakan sumber energi utama untuk mengimbangi pemanasan global dan krisis energi. Energi ini dapat dimanfaatkan melalui teknologi seperti sel surya, yang mempunyai cara kerja dengan mengubah cahaya matahari menjadi energi listrik. Sel surya merupakan perangkat yang sangat potensial untuk dikembangkan. Sampai saat ini, sel surya sudah mengalami perkembangan yang sangat signifikan, seperti munculnya sel surya berbasis silikon, sel surya *thin film* hingga sel surya generasi ketiga, yaitu sel surya *Dye Sensitized Solar* (DSSC).

Dibandingkan dengan sel surya lainnya, sel surya berbasis silikon seperti *multijunction silicon solar cell* dan *single crystal solar cell* memiliki efisiensi tinggi masing-masing sebesar 46% dan 25% (Saraswati *et al.*, 2015). Akan tetapi, sel surya tersebut membutuhkan fabrikasi yang sulit dan biaya yang tidak sedikit. Oleh karena itu, pengembangan sel surya dengan fabrikasi mudah dengan biaya murah masih menjadi topik hangat dalam penelitian. Baru-baru ini, sel surya jenis *perovskite* menarik perhatian karena memiliki perkembangan yang signifikan, karena dalam 8 tahun terakhir sel surya tersebut dapat mencapai efisiensi lebih dari 20.1% (Saraswati *et al.*, 2015).

Material *perovskite* merupakan senyawa organik-anorganik juga telah menghasilkan efisiensi yang baik dan berpotensi menjadi sumber energi alternatif yang stabil dan efektif. *Perovskite* organik-anorganik memiliki sifat semikonduktor, penyerapan cahaya yang baik dan sangat diminati untuk perangkat elektronik, seperti dioda pemancar cahaya dan sel surya, karena biaya rendah dan efisiensi konversi dayanya melebihi 20% (Maqbool *et al.*, 2017).

Perkembangan *perovskite* organik-anorganik ini memberikan dorongan untuk pengembangan peredam cahaya berbasis logam halida (Bourachid *et al.*, 2020). Ciri

khas fotovoltaik dari jenis bahan *perovskite* ini tidak terdapat pada jenis *perovskite* lainnya. Efisiensi konversi cahaya yang tinggi dalam sel surya *perovskite* ini adalah hasil dari koefisien absorpsi yang tinggi, celah pita yang tepat, mobilitas elektron dan lubang yang seimbang, dan tingkat rekombinasi yang rendah (Bourachid *et al.*, 2020).

Perovskite organik-anorganik diidentifikasi dengan rumus struktur ABX_3 , dimana A sebagai ion organik-anorganik, B sebagai atom logam divalen, dan X sebagai halogen. Material tersebut telah menarik minat luas karena aplikasi potensinya sebagai penyerap sel surya (Lang *et al.*, 2014), isolator topologi (Jin *et al.*, 2012) dan bahkan superkonduktor (Takahashi *et al.*, 2011).

Pada tahun 2018, penggunaan methylammonium lead iodide ($MAPbI_3$) tipe *perovskite* mencapai efisiensi konversi cahaya maksimum sebesar 23,7% (Swarnkar *et al.*, 2016). Namun *perovskite* tersebut mengalami ketidakstabilan kimia karena adanya sifat *volatile* dan higroskopis dari kation organik pada suhu tinggi. Oleh karena itu, muncul *perovskite Inorganic Metal Halide* (IMH) sebagai alternatif yang menjanjikan dengan kestabilan superior dan sifat-sifat yang sebanding.

IMH *perovskite* yang memiliki stabilitas lebih baik dikembangkan untuk mengatasi ketidakstabilan *perovskite* halida organik-anorganik. Sel surya berbasis *perovskite* $CsPbI_3$ telah diketahui memiliki kestabilan hingga dua bulan (Qian *et al.*, 2016). $CsPbI_3$ dalam fase ortorombik dapat menyerap jumlah energi tertinggi pada rentang energi foton yang luas. Oleh karena itu sangat cocok untuk penyimpanan energi surya dan aplikasi sel surya (Maqbool *et al.*, 2017). *Perovskite* seperti $CsSnI_3$ dan $CsSnBr_3$ juga telah dipelajari secara ekstensif untuk menggantikan Pb karena toksisitasnya (Huang & Lambrecht, 2013). Penyempitan celah pita $CsPbI_3$ menunjukkan peningkatan penyerapan optik, yang memiliki potensi besar untuk perangkat optoelektronik (Jing *et al.*, 2019). Dan variasi yang menonjol dalam parameter optik dalam rentang energi 2,5–20 eV membuat *perovskite* $CsPbBr_3$ cocok untuk perangkat optik (Ghaithan *et al.*, 2020).

Quantum ESPRESSO (QE) adalah alat yang digunakan untuk menghitung struktur elektronik dari suatu sistem atau model material. Keunggulan QE adalah basis DFT tidak bisa langsung menyelesaikan mekanika kuantum, sehingga

membuat perhitungan lebih efektif. Perhitungannya hanya mencakup perhitungan kulit atom sehingga memungkinkan perhitungan lebih cepat (Barnes *et al.*, 2017).

Density Functional Theory (DFT) adalah salah satu metode yang paling umum digunakan untuk mempelajari sifat material dalam ilmu solid-state. DFT digunakan untuk menganalisis struktur, sifat elektronik dan optik dari bahan *perovskite* (Afsari *et al.*, 2019). Oleh karena itu, penelitian teoritis tentang sifat elektronik, struktural, dan optik material *perovskite* sangat penting untuk pemahaman yang menyeluruh tentang jenis material ini. Dalam penelitian ini akan membahas mengenai sifat optik molekul ABX_3 , di mana A adalah kation alkali ($A = Cs, Li$), B adalah atom logam divalen ($B = Pb$) dan X adalah halogen ($X = I, Br, Cl$) menggunakan metode DFT.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan Masalah dari penelitian ini adalah bagaimana sifat optik absorbansi dari molekul ABX_3 ($A = Cs, Li$; $B = Pb$; $X = I, Br, Cl$).

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui sifat optik absorbansi dari molekul ABX_3 ($A = Cs, Li$; $B = Pb$; $X = I, Br, Cl$).

1.4 Manfaat Penelitian

Diharapkan penelitian ini dapat memberikan referensi untuk penelitian selanjutnya berdasarkan perhitungan dan eksperimen khususnya di bidang komputasi mengenai material *perovskite* dan semikonduktor.

1.5 Batasan Masalah Penelitian

Pada 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 kubik.

1.6 Metode Pengumpulan Data

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

1. 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.

2. Simulasi dimulai dengan dilakukan proses running input file dengan menggunakan *software* Quantum ESPRESSO.

1.7 Sistematika Penulisan

Penelitian ini di tuangkan dalam sebuah pemaparan hasil secara jelas dan terperinci, dengan rumusan yaitu:

- BAB I Pendahuluan, memaparkan latar belakang, rumusan masalah, tujuan dari penelitian, metode pengumpulan data dan sistematika penulisan.
- BAB II Teori Dasar, pemaparan dari referensi penelitian atau parameter penelitian.
- BAB III Metodologi Penelitian, pemaparan dari tempat penelitian, alat yang digunakan, metode - metode penelitian dan karakteristik penelitian.
- BAB VI 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.