

STUDI SIFAT ELEKTRONIK MATERIAL PEROVSKITE DENGAN KATION *METHYLAMMONIUM* DAN *CESIUM* MENGUNAKAN TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN RELATIVISTIK

Nama Mahasiswa : Lana Ainunnisa
NIM : 01161015
Dosen Pembimbing Utama : Atut Reni Septiana, S.Pd., M.Si.
Dosen Pembimbing Pendamping : Agus Rifani, S.Si., M.Si.

ABSTRAK

Sel surya adalah salah satu alternatif untuk mengurangi penggunaan bahan bakar fosil yang kurang ramah lingkungan. Karenanya, pengembangan material *sel surya* terutama pada bagian *photovoltaic* menjadi tantangan para peneliti saat ini. Salah satu material yang menjadi fokus penelitian adalah metal halida perovskite seperti *Methylammonium-lead-halide* (MAPbI₃). Material jenis semikonduktor tersebut dapat diproduksi pada temperatur dibawah 200°C dan saat ini mencapai efisiensi konversi energi sebesar 22,1%. Meskipun demikian perovskite kation MA memiliki kekurangan pada ketahanan terhadap temperatur ruang, sehingga mulai dikembangkan bahan serupa yang memiliki kestabilan termal lebih baik, seperti *Cesium-lead-halide* (CsPbI₃). Terdapat beberapa penelitian pada bahan MAPbI₃ baik secara eksperimen maupun komputasi. Hasil komputasi yang terkait dengan kemampuan absorpsi cahaya telah didapat dengan menghitung nilai sela energi pada bahan MAPbI₃. Namun belum dilakukan penelitian serupa untuk bahan Cesium-lead-halide. Penelitian ini berfokus pada identifikasi sifat elektronik material perovskite MAPbI₃ dan CsPbI₃ melalui metode komputasi material. Pendekatan yang digunakan adalah pendekatan *ab initio*, yaitu melalui perumusan teori fungsional kerapatan (*Density Functional Theory*, DFT) dengan interaksi elektron-elektron dimodelkan melalui fungsional *Generalized Gradient Approximations* (GGA) dan interaksi elektron dengan inti dimodelkan melalui pendekatan *pseudopotentials* (PP) yang sudah melibatkan data relativistik. Hasilnya, nilai sela energi dari MAPbI₃ dan CsPbI₃ berturut-turut sebesar 1,64 eV dan 1,46 eV. Penggunaan *pseudopotential* relativistik menghasilkan nilai sela energi 30-37% lebih baik mendekati data eksperimen. Pengaruh substansi kation MA menjadi Cs berakibat pada penurunan pada nilai sela energi.

Kata kunci :
Perovskite, Teori Fungsional Kerapatan, Relativistik