

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Material konversi energi menjadi salah satu tantangan besar abad ini seiring meningkatnya penggunaan teknologi-teknologi digital berbasis elektronik. Energi surya merupakan salah satu sumber energi terbarukan yang melimpah, ramah lingkungan dan telah berhasil diaplikasikan oleh beberapa industri dan juga masyarakat. Tetapi energi surya masih memerlukan pengembangan lebih lanjut agar dapat menghasilkan efisiensi serta kestabilan termal yang lebih baik dibanding sebelumnya. Langkah tersebut dapat dilakukan dengan cara membuat material yang tepat untuk bagian sel surya yang berfungsi mengkonversi sinar matahari menjadi energi listrik. Pemilihan material yang tepat dapat dilihat dari tinjauan kestabilan struktur dan sifat elektroniknya.

Perovskite merupakan material yang termasuk golongan semikonduktor, tetapi memiliki karakteristik yang unik dibandingkan semikonduktor lainnya. Material ini memiliki koefisien absorpsi yang tinggi, rentang spektrum yang dapat diserap luas, mobilitas pembawa muatan tinggi, dan jarak tempuh difusi yang panjang (Kim, dkk, 2012). Sejak aplikasi pertamanya, *perovskite* pada sel surya menunjukkan efisiensi konversi energi sebesar 3,8% dan hingga saat ini telah tersertifikasi pada nilai 22,1% sehingga *perovskite* diklaim menjadi sel surya yang perkembangannya akan melebihi efisiensi silikon yang telah digunakan sebelumnya melalui pengembangan selama kurang lebih 40 tahun dengan biaya produksi yang lebih rendah (Zhang, dkk, 2016). *Perovskite* yang pernah dikembangkan adalah kation berupa *Methylammonium Perovskite* (MAP) seperti $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ dan kation berbasis *Cesium* (Cs) seperti CsPbBr_3 , yang menunjukkan *perovskite* berbasis Cs lebih stabil dalam sifat termal dibandingkan berbasis MAP dalam kondisi pemakaian selama 2 minggu (Kulbak, dkk, 2016). Oleh karena itu, unsur kation pada material *perovskite* berpengaruh terhadap kestabilan dan *lifetime* material tersebut. Untuk mengetahui pengaruh penggantian

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dilakukannya penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Menentukan struktur kristal optimal dari perovskite dengan kation MA dan Cs.
2. Mengetahui struktur pita energi dan rapat keadaan dari perovskite dengan kation MA dan Cs.
3. Mengetahui efek relativistik terhadap nilai sela energi.
4. Mengetahui pengaruh jenis kation MA dan Cs pada material perovskite berdasarkan koreksi struktur pita energi.

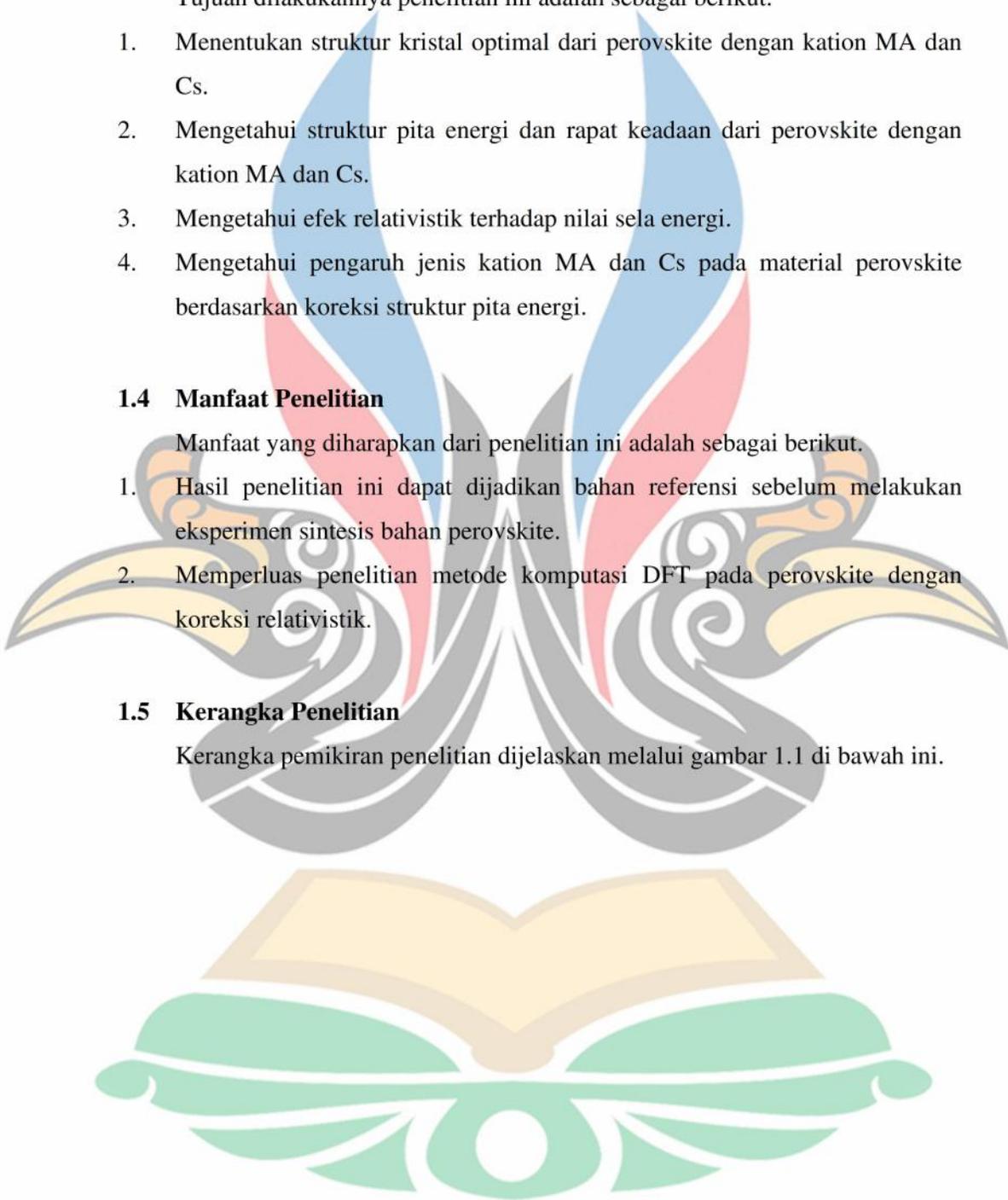
1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Hasil penelitian ini dapat dijadikan bahan referensi sebelum melakukan eksperimen sintesis bahan perovskite.
2. Memperluas penelitian metode komputasi DFT pada perovskite dengan koreksi relativistik.

1.5 Kerangka Penelitian

Kerangka pemikiran penelitian dijelaskan melalui gambar 1.1 di bawah ini.



www.itk.ac.id

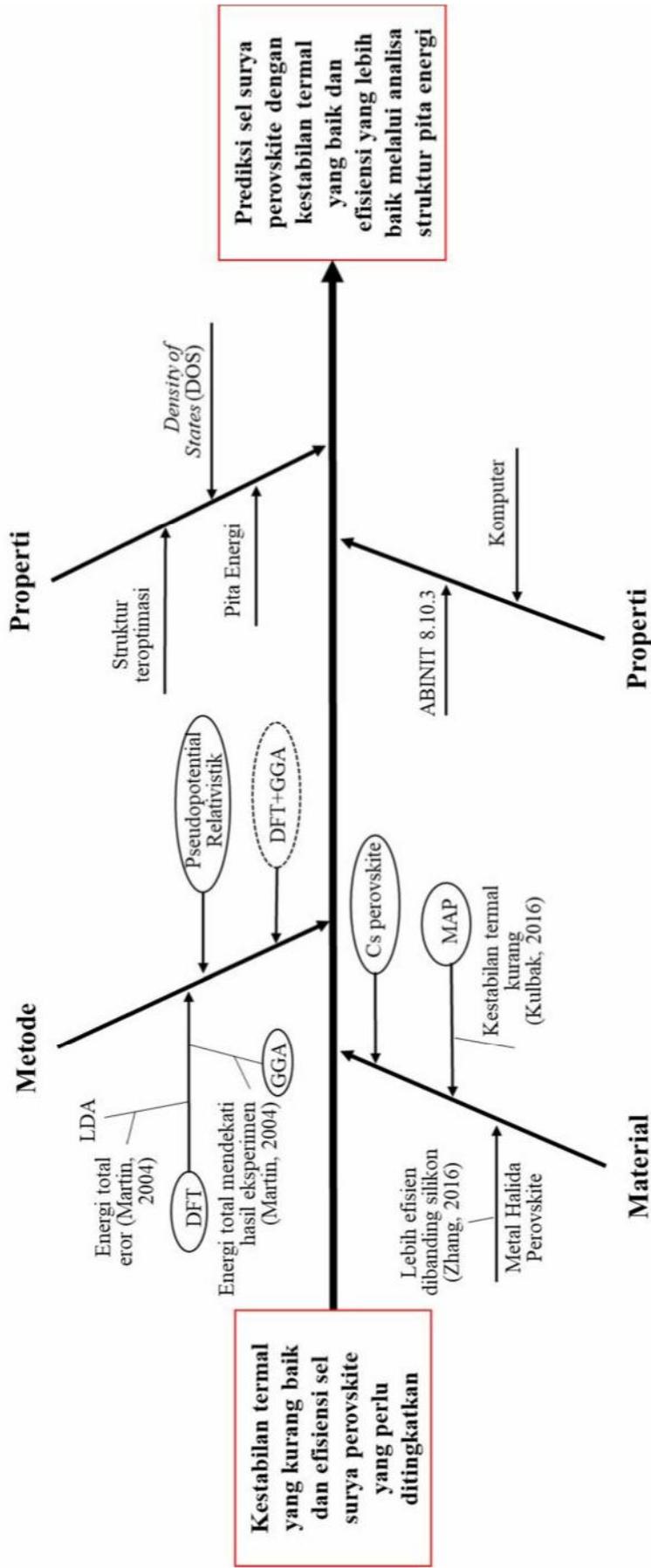
unsur kation *perovskite* dari MA ke Cs terhadap sifat elektroniknya dapat diprediksi menggunakan metode komputasi.

Metode komputasi menjadi salah satu cara untuk mengetahui sifat struktur dan elektronik kristal melalui pemodelan ab-initio yang dihitung langsung dari persamaan Schrödinger. Keuntungan menggunakan metode ini yaitu tidak memerlukan rancangan peralatan laboratorium yang rumit tetapi dapat memprediksi pengembangan material dengan properti tertentu sehingga dapat menjadi acuan sebelum melakukan eksperimen sintesis material. Penyelesaian persamaan Schrödinger untuk sistem banyak elektron tidak dapat diselesaikan secara analitik, sehingga digunakan pendekatan perhitungan numerik yaitu melalui perumusan *Density Functional Theory* (DFT atau teori fungsional kerapatan). Pendekatan DFT dapat memberikan keseimbangan antara akurasi dan kerumitan perhitungan (Gygi dan Giulia, 2005). DFT menggunakan hampiran pada interaksi elektron-elektron dan interaksi elektron dengan inti, yaitu disebut dengan pendekatan *Generalized Gradient Approximation* (GGA) dan *Pseudopotential/Potensial Semu*. *Pseudopotential* yang digunakan memperhatikan jenis atom pada material *perovskite*, pada kasus ini menggunakan atom logam Pb. Atom Pb memiliki massa yang relatif besar dibandingkan dengan atom lain penyusun *perovskite*, sehingga perlu memperhatikan efek relativistik di dalam *pseudopotential* yang digunakan. Hasil perhitungan DFT adalah struktur dan sifat elektronik yaitu berupa pita energi dan rapat keadaan pada *ground state* (keadaan dasar).

1.2 Perumusan Masalah

Perumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Bagaimana cara menentukan struktur kristal optimal *perovskite* dengan kation MA dan Cs menggunakan teori fungsional kerapatan?
2. Bagaimana struktur pita energi dan rapat keadaan dari *perovskite* dengan kation MA dan Cs ?
3. Bagaimana menentukan efek relativistik terhadap nilai sela energi ?
4. Bagaimana pengaruh jenis kation MA dan Cs pada material *perovskite* berdasarkan koreksi struktur pita energi ?



Gambar 1. 1 Kerangka Pemikiran Penelitian

