

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Dewasa ini, bahan perovskit halida timbal organik-anorganik telah menarik banyak perhatian dalam aplikasi sel surya. Sel surya perovskit halida timbal organik-anorganik (PSC) telah berkembang pesat dengan nilai efisiensi tertinggi (PCE) sebesar 22,7%. Keberhasilan besar dari perovskit halida timbal organik-anorganik dapat dikaitkan dengan sifat opto-elektroniknya yang superior, seperti nilai *band-gap*, *small exciton binding energy*, and *long carrier recombination lifetime*, yang ideal untuk fotovoltaik (Sun et al., 2018).

Komunitas perovskit fotovoltaik mulai mendukung penggunaan kation yang lebih besar daripada MA^+ . Ukuran kation mempengaruhi sudut M-I-M (M = Sn, Pb) dan dapat menjadi promosi dalam pelapisan serta pembentukan penghalang isolasi antara semikonduktor lapisan PbI_4 , seperti dalam pengurangan dimensi lapisan (2D dan struktur kuasi-2D), yang cenderung bersifat *excitonic*. Di sisi lain, ada beberapa kation seperti MA^+ , FA^+ , dan Cs^+ yang berada dalam faktor toleransi kerangka 3D, yang membentuk fase perovskite 3D dengan *exciton binding energy* rendah dan karakteristik *free-carrier* yang penting untuk kinerja tinggi fotovoltaik (PV) (Barrit et al., 2020).

Ada banyak studi tentang perhitungan struktur elektronik untuk menjelaskan karakteristik dari perovskit ini. Adapun penelitian menarik untuk perovskit halida timbal anorganik $APbX_3$, seperti $CsPbX_3$ sebagai bahan aktif dalam sel surya. Telah dilaporkan bahwa sel surya yang menggunakan *cesium lead iodide* $CsPbI_3$ menghasilkan nilai PCE yang besar mulai dari 5,95% sampai 10,5%. Walaupun nilai efisiensinya lebih rendah jika dibandingkan dengan sel surya berbasis perovskit timah halida organik yang digunakan, perovskit halida timbal anorganik yang digunakan dianggap lebih praktis karena kurang sensitif terhadap kelembapan untuk proses persiapannya. (Pitriana, Wungu, Herman, & Hidayat, 2019)

Selain itu, perovskit halida timbal anorganik lebih mudah dihitung karena struktur kristal dan simetri kristalnya sederhana. Untuk perhitungan yang bekerja pada struktur elektroniknya mungkin akan berguna dalam memahami peran dari logam alkali (A) terhadap pembentukan struktur elektronik dan sifat elektroniknya (Pitriana et al., 2019).

Dalam penelitian ini, menyelidiki struktur elektronik CsBX_3 (dimana B = Pb dan Sn, X = Cl, Br, dan I) dengan melakukan perhitungan prinsip pertama berdasarkan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan menggunakan perangkat lunak (*software*) *Quantum Espresso* (QE).

1.2 Rumusan Masalah

Permasalahan yang ingin diselesaikan dalam penelitian ini adalah :

1. Bagaimana membuat inputan CsBX_3 menggunakan *software Quantum Espresso*?
2. Bagaimana struktur elektronik dari CsBX_3 yang berbentuk kubik?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah dari penelitian ini adalah :

1. Simulasi dilakukan menggunakan *software Quantum Espresso*.
2. Struktur elektronik CsBX_3 hanya berbentuk kubik.

1.4 Tujuan

Tujuan dalam penelitian tugas akhir ini adalah :

1. Mengetahui cara membuat inputan CsBX_3 pada *Quantum Espresso*.
2. Mengetahui struktur elektronik dari CsBX_3 yang berbentuk kubik.

1.5 Metode Pengumpulan Data

1.5.1 Studi Literatur

Metode pengumpulan data ini digunakan sebagai langkah awal dengan mengumpulkan materi yang berhubungan dengan penelitian melalui beberapa jurnal, skripsi, dan paper yang digunakan sebagai referensi dan kemudian dipahami.

1.5.2 Simulasi

Simulasi dimulai dengan proses running input file dengan menggunakan *software Quantum Espresso*. Selanjutnya dilakukan proses input file di *software xcrysdn* untuk mengetahui optimasi konstanta kisi dan bentuk struktur dari perovskite. Dan terakhir input file di *software origin* untuk mendapatkan kurva dispersi.

1.5.3 Sistematika Penulisan

Pembahasan pokok dari penelitian ini untuk setiap bab diuraikan secara singkat sebagai berikut :

BAB 1 PENDAHULUAN

Pada bab ini akan dibahas mengenai latar belakang, perumusan masalah, batasan masalah, tujuan penelitian, metode pengumpulan data, dan sistematika penulisan.

BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA

Pada bab ini berisi tentang dasar teori. Bab ini berisi teori yang mendasari penelitian yang dilakukan.

BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN

Bab ini menjelaskan metodologi studi yang digunakan dalam menyelesaikan tugas akhir yang meliputi langkah-langkah penelitian.

BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN

Bab ini menjelaskan tentang hasil yang diperoleh dari penelitian, analisis serta pembahasannya.

BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN

Bab terakhir ini berisi kesimpulan dan saran dari seluruh hasil penelitian.

