

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Dalam beberapa tahun terakhir, *Density Functional Theory* (DFT) telah menjadi sistem yang sering digunakan pada keadaan dasar dari sistem banyak partikel. Banyak penelitian eksperimental dalam kimia organik dan anorganik dengan memasukkan penghitungan, seperti menggunakan kode populer, basis standar, dan standar pendekatan fungsional. Transformasi serupa juga terjadi dalam ilmu material dengan peningkatan perangkat keras untuk melakukan perbandingan sistematis dengan eksperimen di berbagai material (Burke, 2012). DFT telah berhasil dalam mengevaluasi berbagai keadaan dasar dengan akurasi tinggi (S.I. Gorelsky, 2001).

Sejak bahan *Organic-anorganic Halide Perovskite* (OHP) diperkenalkan, bidang penelitian material telah berkembang dalam aplikasi *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC). Bahan tersebut dapat digunakan sebagai penyerap yang baik dalam sel surya karena adanya bahan perovskit organik anorganik dengan koefisien absorpsi tinggi, panjang difusi eksiton yang panjang, *direct band gap*, dan sifat *transport* muatan yang sangat baik (Al-asbahi et al., 2020). Efek fotovoltaiik merupakan cara yang digunakan untuk sel surya dalam mengubah energi matahari menjadi energi listrik (M. Suryanto, 2019). Aplikasi sel surya berbasis OHP sudah mencapai 22,7%, hal tersebut memiliki nilai kompetitif dibandingkan dengan sel surya berbasis CdTe, CIGS, dan Si (Parrott et al., 2016).

Perovskit halida adalah jenis semikonduktor dari empiris ABX_3 dengan struktur sederhana, yaitu A dan B adalah kation dengan ukuran yang berbeda. A adalah kation monovalen, seperti molekul organik CH_3NH_3 yang digunakan untuk menetralkan muatan keseluruhan. Logam kation B seringkali menggunakan Pb^{2+} atau Sn^{2+} (Bernal & Yang, 2014). Timbal dan timah termasuk dalam kelompok unsur yang sama dan mempunyai sifat kimia yang serupa. Sn memiliki toksisitas rendah dan oksidanya memiliki sedikit pencemaran lingkungan (Li et al., 2019). X merupakan anion monovalen (Cl^- , Br^- , atau I^-). Bahan perovskit $CH_3NH_3PbX_3$ ($X = Cl, I, Br$) tidak stabil di udara, dan elemen timbal yang terurai akan berpotensi menimbulkan polusi terhadap lingkungan, sehingga diperlukan persiapan kristal perovskit yang bebas timbal atau lebih sedikit timbal. Aplikasi dari perovskit halida organik hibrida pada sel surya menggunakan sistem elektrolit cair (Bernal & Yang, 2014). Faktor-faktor yang membuat sel surya perovskit halida menguntungkan adalah kemudahan fabrikasi dari fase cair dan efisiensi dengan mengontrol susunan dan komposisi strukturalnya (Taya et al., 2019).

Perovskit organik anorganik $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{Cl, I, Br}$) telah menunjukkan daya saing yang tinggi dalam bidang aplikasi fotovoltaik dan fotolistrik karena proses yang luar biasa, termasuk biaya rendah dan penyerapan cahaya yang tinggi. Dinyatakan bahwa kualitas kristal memiliki pengaruh yang besar terhadap kinerja detektor sensor (Su et al., 2019). Semikonduktor organik anorganik $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{Cl, I, Br}$) menggabungkan stabilitas mekanik dan termo-stabilitas bahan anorganik dengan kemampuan proses dan sifat optik yang sangat baik dari bahan organik yang telah menarik minat penelitian yang besar karena kinerja fotovoltaik dan optoelektronik yang luar biasa (Jin et al., 2020).

Sifat perovskit sangat bergantung pada komposisi, kristalinitas, dan morfologi (Ghaithi et al., 2020). Dalam waktu kurang dari dua tahun penelitian intensif, efisiensi konversi daya dari sel surya berbasis $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{Cl, I, Br}$) telah mencapai 20,1%. Sifat optik memiliki peran penting dalam memahami struktur elektronik material dan mengoptimalkan strukturnya, sehingga lebih meningkatkan kinerja perangkat. Meskipun terdapat kemajuan pesat dalam teknologi sel surya perovskit $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{Cl, I, Br}$), tetapi sifat dasar material tersebut sebagian besar masih belum diketahui (Park et al., 2015).

Bidang optik telah menarik minat penelitian sejak ditemukannya harmonik optik oleh Franken et al. pada tahun 1961. Berbagai bahan nonlinier, termasuk molekul organik, kristal anorganik serta titik *Quantum Dots* (QDs), telah dipelajari dan diterapkan secara intensif di bidang pembatas optik dan penyimpanan optik (Lu et al., 2016). *Spectroscopic ellipsometry* (SE) dijadikan sebagai salah satu metode yang sesuai untuk menentukan fungsi optik suatu bahan, seperti fungsi dielektrik kompleks pada rentang energi foton. Sifat optik merupakan faktor utama kualitas sel surya. Pengujian fotovoltaik bertujuan mendapatkan karakteristik efisiensi fotovoltaik. Peningkatan efisiensi sel surya dilakukan menggunakan kristal fotonik (Park et al., 2015).

Penelitian sebelumnya tentang perovskit organik anorganik, yaitu Faghinasiri et al. (2020) menghitung sifat optik yang merupakan fungsi dielektrik (ϵ) salah satu sifat material dasar untuk digunakan dalam aplikasi optoelektronik yang menghubungkan fitur makroskopik dengan fitur mikroskopisnya. Mehdizadeh et al. (2019) menyebutkan bahwa $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{Cl, I, Br}$) memiliki kemampuan penyerapan cahaya yang sangat baik di zona tampak yang digunakan dalam teknologi sel surya. Jiang et al. (2016) mempelajari hubungan antara struktur kubik bertekanan tinggi $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ dan celah pita di bawah tekanan (Jiang et al., 2019). Kong et al. (2016) Menghitung struktur pita elektronik, optik, dan densitas muatan $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ di bawah tekanan (Jiang et al., 2019). Kojima et al. (2009) menggunakan perovskit $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ untuk mensintesis sel surya sebagai

lapisan penyerap, dan melaporkan efisiensi konversi daya 3,8% (Sabetvand et al., 2020).

Ilmu komputasi material telah muncul sebagai pengetahuan baru dalam sains dan teknologi. Hal tersebut telah memperdalam pemahaman dasar tentang bahan dan proses, serta memungkinkan penelitian kuantitatif mendapatkan hasil yang tepat. Sementara, kemajuan besar dalam teknologi komputer merupakan prasyarat yang diperlukan untuk perkembangan ini (Akhmatskaya & Nobes, 1999). Perangkat lunak muncul menjadi kebutuhan ketika masalah kompleks pada material perlu diselesaikan dengan serangkaian metode dan teknik yang berbeda (Giannozzi et al., 2009).

Pendekatan multiskala untuk menggabungkan metode dengan akurasi dari sistem yang kompleks atau fenomena yang terjadi pada waktu skala panjang. Pendekatan tersebut akan membutuhkan perangkat lunak yang dapat melakukan berbagai jenis komputasi pada aspek berbeda dari masalah yang sama atau bagian berbeda dari sistem yang sama, dan yang memungkinkan penggunaan sama dari modul yang berbeda (Giannozzi et al., 2009). Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini adalah GaussView 6.0 yang digunakan dalam visualisasi molekul, Quantum ESPRESSO untuk melakukan perhitungan, dan Origin 8 untuk plot grafik hasil perhitungan.

1.2 Rumusan Masalah

Penelitian ini merupakan penelitian bidang komputasi dengan rumusan masalah:

1. Bagaimana optimasi perhitungan absorbansi molekul $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ ($\text{B} = \text{Pb, Sn; X} = \text{Cl, I, Br}$)?
2. Bagaimana sifat optik absorbansi molekul organik anorganik $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ ($\text{B} = \text{Pb, Sn; X} = \text{Cl, I, Br}$)?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan penelitian ini:

1. Mengetahui optimasi perhitungan absorbansi molekul $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ ($\text{B} = \text{Pb, Sn; X} = \text{Cl, I, Br}$).
2. Mengetahui sifat optik absorbansi molekul organik anorganik $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ ($\text{B} = \text{Pb, Sn; X} = \text{Cl, I, Br}$).

1.4 Batasan Masalah

Dalam penelitian ini, masalah akan dibatasi dengan hal-hal berikut:

1. Penelitian merupakan bidang komputasi dengan menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO.
2. Molekul yang digunakan yaitu perovskit organik anorganik $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ ($\text{B} = \text{Pb, Sn; X} = \text{Cl, I, Br}$).

1.5 Metode Pengumpulan Data

1.5.1 Studi Literatur

Dalam mencari informasi dan data dilakukan sebagai langkah awal dengan mengumpulkan materi-materi yang berhubungan dengan penelitian Tugas Akhir. Data diperoleh dari berbagai sumber, yaitu jurnal, skripsi, yang digunakan sebagai referensi untuk dipahami dan dipelajari dalam pelaksanaan Tugas Akhir.

1.5.2 Komputasi

Selain studi literatur, penelitian ini juga dilakukan proses simulasi berupa perhitungan sifat optik menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO dengan parameter molekul ABX_3 ($A=CH_3NH_3$; $B=Pb, Sn$; $X=Cl, I, Br$).

1.6 Sistematika Penulisan

Dalam pembahasan secara kompleks pada penelitian ini, diuraikan dalam setiap bab:

1. BAB I

Pendahuluan, bagian pendahuluan mendeskripsikan latar belakang permasalahan dari penelitian yang dilakukan, rumusan masalah dan tujuan dilakukan penelitian tersebut, serta ruang lingkup dan sistematika penulisan.

2. BAB II

Dasar Teori, berisi tentang tinjauan pustaka dan teori-teori yang diterapkan dalam penelitian ini.

3. BAB III

Metode Penelitian, menjelaskan tata cara penelitian yang meliputi alat yang digunakan, prosedur penelitian, dan analisis data.

4. BAB IV

Hasil dan Pembahasan, berisi data-data penelitian dan beberapa analisis mengenai hasil penelitian.

5. BAB V

Kesimpulan, berisi ringkasan akhir penelitian.