

# BAB I PENDAHULUAN

## 1.1 Latar Belakang

Energi surya merupakan sumber daya energi yang tidak terbatas dan akan selalu tersedia. Potensi energi ini dapat diambil sebagai alternatif untuk diubah menjadi energi listrik menggunakan sel surya. Penggunaan panel surya sebagai opsi energi listrik alternatif dapat dimanfaatkan oleh masyarakat yang memerlukan pasokan listrik, terutama ketika menghadapi kendala ketidakterersediaan energi listrik. (Purwoto dkk., 2018).

Peningkatan signifikan terjadi dalam perkembangan teknologi energi surya seiring berjalannya waktu. Salah satu inovasinya adalah *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC), yang pertama kali diperkenalkan oleh O'Regan dan Grätzel pada tahun 1991 dengan inspirasi dari proses fotosintesis. DSSC, sebagai perangkat fotovoltaik generasi ketiga, memiliki sejumlah keunggulan, termasuk biaya yang terjangkau, penggunaan bahan yang tidak peka terhadap kontaminan lingkungan, kemudahan dalam proses fabrikasi, kemampuan produksi dalam bentuk fleksibel, dan kinerja tinggi. Hal ini menjadikannya sebagai alternatif potensial untuk menggantikan sel surya konvensional yang umumnya berbahan dasar silikon. Keunggulan DSSC telah menarik perhatian peneliti, yang kemudian melakukan penelitian intensif terhadap teknologi ini. Sebagai hasilnya, terjadi kemajuan pesat dalam peningkatan performa DSSC, yang awalnya memiliki *power conversion efficiency* (PCE) sekitar 7,1%, hingga saat ini telah mencapai PCE sebesar 14,7% (Nursam & Oktaviana, 2020).

Sel surya generasi terakhir yang merupakan pengembangan dari DSSC adalah *perovskite solar cells* (PSC). Dalam beberapa tahun terakhir, PSC telah mencapai tingkat efisiensi konversi daya PCE hingga 23,3%. *Perovskite* halida hibrida merupakan senyawa organik dan anorganik dengan rumus umum  $ABX_3$ , dimana di dalam penelitian ini akan mencoba menggunakan A adalah litium (Li), B adalah logam Pb/Sn, dan X adalah anion halida (Cl, Br, atau I). Struktur kristal dari senyawa *perovskite* umumnya digunakan dalam sel surya, seperti  $CH_3NH_3Pb_3I_3$ ,

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeCl}_3$  dan  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnCl}_3$ .  $\text{MAPbI}_3$  atau *metilamonium plumbum iodida perovskite*, adalah contoh *perovskite* halida hibrida pertama. (Herna dkk., 2022)

Pada tahun 2022, Aidha Ratna Fajarini Sidik melakukan studi untuk mempelajari sifat optik absorbansi *perovskite*  $\text{ABX}_3$  ( $\text{A} = \text{Cs, Li; B} = \text{Pb; X} = \text{I, Br, Cl}$ ) melalui kalkulasi prinsip pertama pada fase kubik tersebut. Hasil penelitian tersebut memaparkan semua bahan *perovskite* tersebut berpotensi sebagai bahan semikonduktor yang menjanjikan untuk aplikasi optoelektronik (Sidik, 2022).

Penelitian lain dilakukan oleh Pina Pitriana dkk (2019), yaitu mengkalkulasi struktur elektronik dari alkali timbal iodida  $\text{APbI}_3$  ( $\text{A} = \text{Li, Na, K, Rb, dan Cs}$ ) menggunakan metode teori fungsional kerapatan. Mereka menunjukkan bahwa *perovskite* alkali timbal iodida merupakan bahan semikonduktor yang dapat diaplikasikan sebagai penyerap cahaya matahari bagi sel surya. Selain itu, nilai band gap dan konstanta kisi mengalami kenaikan seiring bertambahnya jar-jari kation penyusun (Pitriana dkk., 2019).

Berdasarkan uraian diatas, peneliti ingin melakukan penelitian tentang “Perhitungan Sifat Elektronik  $\text{LiPbX}_3$  ( $\text{B} = \text{Pb dan Sn; X} = \text{Br, Cl dan I}$ ) Fase Kubik dengan Metode *Density Functional Theory*”. Pada penelitian ini untuk menghitung struktur elektronik menggunakan metode komputasi Perangkat lunak. *Software* yang digunakan dalam penelitian ini adalah *XCrySDen* yang digunakan dalam visualisasi struktur Kristal, *Quantum ESPRESSO* untuk melakukan perhitungan, dan *Gnuplot* untuk plot grafik hasil perhitungan.

## 1.2 Rumusan Masalah

Penjelasan latar belakang ini digunakan sebagai panduan untuk melaksanakan penelitian ini. Sebagai hasilnya, rumusan masalah dapat diformulasikan sebagai berikut:

1. Bagaimana sifat elektronik dari *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  ( $\text{B} = \text{Pb dan Sn; X} = \text{Br, Cl dan I}$ )?
2. Bagaimana hasil dari grafik *Density of States* (DOS) dan *Projected Density of States* (PDOS) dalam perhitungan sifat elektronik *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  ( $\text{B} = \text{Pb dan Sn; X} = \text{Br, Cl dan I}$ )?

### 1.3 Batasan Masalah

Dalam lingkup penelitian ini, masalah akan difokuskan pada aspek-aspek berikut:

1. Pemodelan struktur pita elektronik, DOS dan PDOS dilakukan menggunakan metode DFT melalui perangkat lunak *Quantum ESPRESSO*.
2. Perhitungan secara komputasi tidak berfokus bagaimana perangkat lunak mendapatkan hasil pemodelan tetapi berfokus pada hasil itu sendiri.
3. Hanya dilakukan pada satu fase kristal yaitu pada fase kubik *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I).
4. Jenis *pseudopotensial* yang digunakan adalah *Semi Local Norm Conserving* dengan *Generalized Gradient Approximation Perdew Burke Ernzerhof exchange correlation functional* (GGA-PBE).

### 1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dilaksanakannya penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Untuk mengetahui sifat elektronik dari *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) pada fase kubik.
2. Untuk mengetahui hasil dari grafik *Density of States* (DOS) dan *Projected Density of States* (PDOS) dalam perhitungan sifat elektronik *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I).

### 1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat dilaksanakannya penelitian ini adalah:

1. Sebagai tambahan informasi untuk penelitian selanjutnya terkait sifat elektronik yang dimiliki material *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I), khususnya pada bidang eksperimen.
2. Menambah pengetahuan mahasiswa dan pemaca pada bidang fisika komputasi material, khususnya terkait DFT dan *Quantum ESPRESSO*.