

BAB II TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Sel Surya

Salah satu opsi dalam mengembangkan sumber energi terbarukan adalah menggunakan tenaga matahari melalui sel surya, yang berfungsi mengubah energi matahari menjadi energi listrik. Saat ini, telah ada berbagai sel surya yang diproduksi dan dipasarkan dengan menggunakan berbagai jenis material sebagai lapisan aktifnya, seperti silikon, galium arsenida, kadmium telurida, silikon amorf, sel surya berbasis pewarna (*dye*), sel surya organik/polimer, dan sel surya hibrid organik-inorganik. Penerapan secara luas sebagai sumber energi listrik masih dihadapkan pada kendala biaya produksi yang tinggi. Sel surya dengan bahan aktif *perovskite* sedang menjadi fokus pengembangan oleh para peneliti karena mampu mencapai PCE di atas 20%, sehingga diharapkan dapat menjadi solusi sel surya masa depan. Pengendalian morfologi dan struktur kristal *perovskite* dianggap sebagai kunci utama untuk meningkatkan efisiensi sel surya dan ketahanannya terhadap pengaruh lingkungan. Film *perovskite* harus menunjukkan tingkat kristalinitas yang tinggi dengan ukuran butir dalam skala mikrometer. Saat ini, sel surya yang menggunakan bahan aktif berupa campuran bahan halida organik/anorganik dengan struktur *perovskite* telah menarik perhatian banyak peneliti karena mampu mencapai PCE di atas 15% (Yurestira dkk., 2021)

Selain kemajuan efisiensi, stabilitas jangka panjang PSCs terhadap kelembapan, cahaya, dan panas juga meningkat signifikan dalam beberapa tahun terakhir, yang dapat diatribusikan kepada konstruksi penghalang difusi terhadap migrasi ion, rekayasa aditif, desain elektroda berbasis karbon yang inert secara kimiawi, dan pengembangan teknik penyalutan sel untuk mengurangi kebocoran timah dari modul PSC yang pecah. Telah terbukti bahwa PSCs yang dapat dicetak telah lulus standar internasional yang paling populer, yaitu IEC61215:2016 untuk teknologi PV. (Wu dkk., 2021).

Energi matahari yang dapat diubah menjadi energi listrik melalui sel surya. Energi listrik ini dapat dimanfaatkan oleh manusia dalam kehidupan sehari-hari maka dari itu, segala sesuatu ciptaan oleh Allah SWT seperti energi matahari yang

berguna untuk kehidupan manusia seperti yang dijelaskan dalam Al-qur'an Surah As-Sajdah ayat 4 Allah SWT berfirman:

لِلَّهِ الَّذِي خَلَقَ السَّمَوَاتِ وَالْأَرْضَ وَمَا بَيْنَهُمَا فِي سِتَّةِ أَيَّامٍ ثُمَّ اسْتَوَىٰ عَلَى الْعَرْشِ مَا لَكُمْ مِّنْ دُونِهِ مِنْ وَلِيٍّ وَلَا شَفِيعٍ أَفَلَا تَتَذَكَّرُونَ { ٤ }

Artinya: Allah adalah Zat yang menciptakan langit dan bumi serta apa yang ada di antara keduanya dalam enam masa, kemudian Dia berkuasa atas 'Arasy. Bagimu tidak ada seorang pun pelindung dan pemberi syafaat selain Dia. Maka, apakah kamu tidak memperhatikan?. (QS. As-Sajdah ayat 4)

Ayat ini menggambarkan bahwa Allah adalah pencipta langit dan bumi, serta segala isinya, termasuk matahari sebagai salah satu bagian penting dalam menciptakan dan menjaga kehidupan di planet ini. Meskipun tidak secara langsung menyebutkan sumber energi matahari, ayat ini menunjukkan bahwa kekuasaan Allah dalam menciptakan alam semesta adalah luar biasa dan mencakup segala sesuatu yang dibutuhkan oleh makhluk hidup, termasuk manusia, untuk menjalani kehidupan mereka di bumi. Dengan demikian, matahari sebagai sumber energi yang penting bagi kehidupan di bumi merupakan salah satu manifestasi dari keajaiban ciptaan Allah.

2.1.1 Struktur *Perovskite*

Teknologi sel surya *perovskite* memanfaatkan struktur kristal ABX_3 dari bahan penyerap. Struktur kristal ABX_3 ini terdiri dari dua kation A dan B dengan ukuran yang sangat berbeda serta tiga anion X yang terikat ke kation A dan B. Kation B dalam *perovskite* umumnya berupa timbal (Pb^{2+}) dengan nomor atom 82 dan massa 207,2 u. Anion X biasanya berupa klorin (Cl), bromin (Br), atau iodin (I) dengan nomor dan massa atom masing-masing 17 (35,453 u), 35 (79,904 u), dan 53 (126,90447 u). Absorber *perovskite* yang paling umum digunakan adalah *metilamonium plumbum trihalida* ($CH_3NH_3PbX_3$) dengan band gap optik antara 1,5 hingga 2,3 eV.

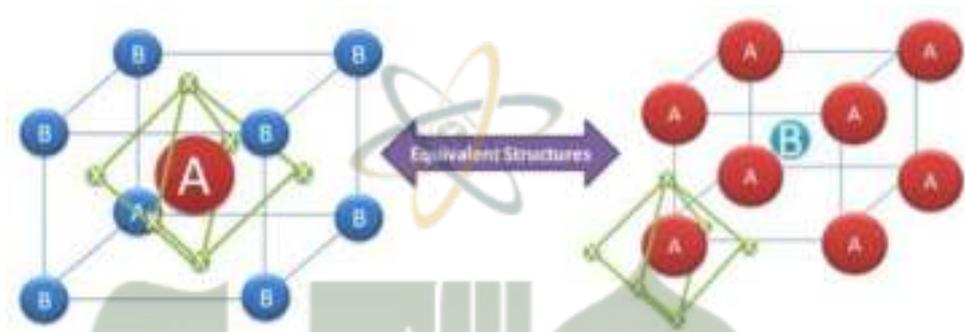
Beberapa contoh struktur terkait *perovskite* antara lain: (Wardana, 2022)

1. *Fase Ruddlesden-Popper* (RP) adalah jenis struktur *perovskite* yang terdiri dari lempengan *perovskite* dua dimensi yang diselingi dengan

kation Fase RP dapat memiliki sifat menarik seperti magnetoresistensi kolosal, superkonduktivitas, dan karakteristik unik lainnya.

2. Struktur terkait *perovskite* tipe ReO_3 struktur ini dapat dijelaskan sebagai *perovskite* ABX_3 di mana situs kation A tidak terisi, sehingga menghasilkan komposisi umum ABX_3 , di mana B biasanya adalah kation dan X adalah anion penghubung. Keragaman kimia dari struktur semacam itu sangat luas, mulai dari oksida dan fluorida sederhana hingga struktur kompleks dengan anion penghubung poliatomik.

Berikut adalah gambar Struktur kristal dari *perovskite* halidida hiridah: (Malinkiewicz dkk., 2014)



Gambar 2.1 Struktur Kristal *Perovskite*

2.1.2 Kelebihan dan Kekurangan *Perovskite*

Struktur senyawa *perovskite* menghasilkan celah pita energi yang kecil, membuatnya cocok untuk penyerapan cahaya matahari. Selain itu, bahan *perovskite* halida organik-inorganik ini menunjukkan koefisien absorpsi yang lebih tinggi dibandingkan sel surya lain, memungkinkannya menangkap lebih banyak cahaya matahari. Kelebihan lain meliputi panjang difusi yang besar dan energi ikatan yang rendah. Ada berbagai jenis struktur sel surya *perovskite*, seperti mesoskopik dan planar. Pada struktur sel surya *perovskite* planar, cahaya masuk melalui lapisan FTO dan diserap oleh lapisan *perovskite*. Dalam lapisan ini, cahaya diubah menjadi elektron dan hole, yang kemudian dihantarkan ke elektroda masing-masing. Hal ini menunjukkan bahwa *perovskite* memiliki karakter ambipolar, memungkinkannya menghantarkan baik elektron maupun hole. Peran fotoanoda *perovskite* di atas lapisan mesopori Al_2O_3 sebagai penyerap cahaya dan konduktor elektron. Selanjutnya, *perovskite* dapat berfungsi sebagai konduktor hole. Dari temuan ini,

dapat disimpulkan bahwa *perovskite* menunjukkan sifat menarik, berperan tidak hanya sebagai penyerap cahaya tetapi juga secara aktif berpartisipasi dalam konduksi muatan. Oleh karena itu, sifat-sifat *perovskite* memainkan peran penting dalam menentukan efisiensi keseluruhan perangkat sel surya (Saraswati dkk., 2015).

Salah satu kekurangan dari sel surya *perovskite* adalah perilaku histeresisnya. Selain itu, masih banyak pekerjaan yang harus dilakukan untuk meningkatkan efisiensi dan stabilitas konvers. Namun, bahan-bahan ini mungkin merupakan kandidat potensial untuk digunakan dalam cat tenaga surya. Perilaku histeresis pada sel surya *perovskite* mengacu pada fenomena di mana respons listrik dari sel surya tersebut terhadap perubahan cahaya tidak segera mengikuti perubahan tersebut secara proporsional. Dalam konteks sel surya, histeresis dapat menyebabkan ketidakstabilan dalam kinerja sel surya dan dapat mempengaruhi efisiensi konversi energi. Hal ini merupakan salah satu tantangan penting yang perlu diatasi dalam pengembangan sel surya *perovskite*. Berdasarkan hasil pencarian, faktor-faktor yang mempengaruhi perilaku histeresis pada sel surya *perovskite* antara lain kelembapan, masuknya oksigen, tingkat penyerapan fotonik aslinya, kepadatan kristal, dan permukaan. Selain itu, faktor-faktor seperti suhu, kecepatan scan, dan waktu penahanan juga dapat mempengaruhi perilaku histeresis pada sel surya *perovskite* (Hidayanti, 2020).

2.2 *Density Functional Theory (DFT)*

Metode perhitungan yang dikenal sebagai *Density Functional Theory (DFT)* digunakan untuk menghitung struktur, sifat elektronik, dan sifat optik material. Ilmuwan pertama yang mengembangkan metode DFT adalah Hohenberg dan Kohn, yang menggunakan dua teorema. Pertama, mereka menunjukkan interaksi antar elektron dengan menggunakan kerapatan keadaan elektronik. Kemudian, Kohn dan Sham mengembangkan DFT untuk menghasilkan persamaan Kohn-Sham (Sidik, 2022).

Chemical accuracy dalam konteks DFT merujuk pada tingkat akurasi perhitungan DFT terhadap sifat-sifat kimia suatu sistem. Jacob's Ladder of DFT menggambarkan berbagai tingkat ketelitian dan kecanggihan dalam DFT, mulai

dari LDA (*Local Density Approximation*), GGA (*Generalized Gradient Approximation*), meta-GGA (*meta Generalized Gradient Approximation*), dan hybrid GGA adalah berbagai jenis fungsional pertukaran-korelasi yang digunakan dalam DFT untuk sistem kimia. LDA adalah metode paling sederhana dan paling hemat komputasi, sementara GGA termasuk istilah tambahan yang bergantung pada gradien densitas. Meta-GGA memiliki ketergantungan tambahan pada densitas energi kinetik, dan hybrid GGA menggabungkan GGA standar dengan bagian pertukaran Hartree-Fock. Metode-metode ini memiliki tingkat akurasi dan efisiensi komputasi yang berbeda, dan pilihan fungsional bergantung pada aplikasi spesifiknya. Tingkat akurasi ini dapat ditingkatkan dengan memasukkan lebih banyak fisika dalam formulasi pertukaran korelasi (Zhou dkk., 2020).

2.2.1 Teorema Hohenberg-Kohn

Pada tahun 1964, Hohenberg dan Kohn membuat dua buah teorema mengenai densitas elektron yang merupakan dasar dari metode DFT. Kedua teorema tersebut menyempurnakan hubungan antara densitas elektron, energi eksternal, fungsi Hamiltonian, dan fungsi gelombang. berikut ini adalah bunyi kedua teorema yang diciptakan oleh Hohenberg-Kohn (Shanaz, 2019).

1. Teorema I

Potensial eksternal adalah interaksi antara elektron dan inti. "Potensial eksternal (energi total) dari suatu sistem adalah fungsional unik yang bergantung pada densitas keadaan dasar $n(r)$."

2. Teorema II

"Untuk mendapatkan energi minimum sistem (energi pada keadaan dasar) dilakukan dengan metode variasi." Namun, teorema Hohenberg-Kohn tidak dapat menjelaskan bagaimana menghitung densitas pada keadaan dasar. Akhirnya, peneliti bernama Kohn-Sham menemukan persamaan matematika untuk melengkapi teorema Hohenberg-Kohn.

2.2.2 Persamaan Kohn-Sham

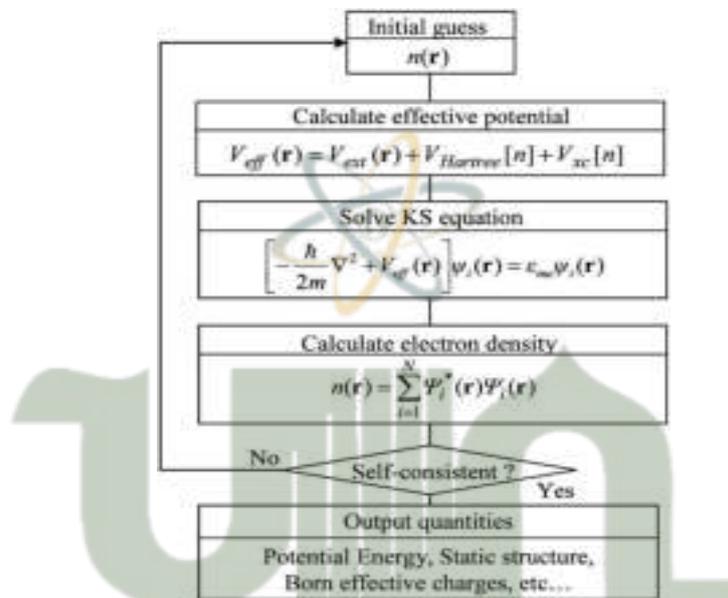
Pada tahun 1965, Kohn-Sham membuat persamaan yang menganggap bahwa sistem yang berinteraksi dan tidak berinteraksi memiliki densitas keadaan dasar yang sama.

Persamaan ini ditulis sebagai berikut: (Shanaz, 2019)

1. Persamaan Kohn-Sham: $\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ks}[n](\vec{r})\right]\varphi_i(\vec{r}) = E_i\varphi_i(\vec{r})$.
2. φ_i adalah orbital Kohn-Sham untuk elektron yang tidak berinteraksi, dan V_{ks} adalah potensial Kohn-Sham yang memiliki persamaan $V_{ks}[n](\vec{r}) = V_{ext}[n](\vec{r}) + V_{Hartree}[n](\vec{r}) + V_{xc}[n](\vec{r})$.
3. Potensial Kohn-Sham juga dikenal sebagai potensial efektif V_{eff} sedangkan V_{ext} adalah potensial eksternal sistem, $V_{Hartree}$ adalah potensial interaksi antar elektron, dan V_{xc} adalah potensial korelasi pertukaran. Potensial eksternal, V_{ext} , berasal dari interaksi antara elektron dengan inti atom lain. Persamaan berikut memberikan potensi eksternal $V_{ext}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} V_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}_{\alpha})$. Dengan r adalah jari-jari elektron dan R_{α} adalah jari-jari inti.
4. Persamaan potensial Hartree, atau $V_{Hartree}$, adalah potensial yang berasal dari interaksi pada distribusi muatan yang tidak berinteraksi antara elektron pada posisi r dan densitas elektron rata-rata pada posisi r' . Persamaan untuk potensial Hartree adalah $V_{Hartree}[n](\vec{r}) = \int dr' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$.
5. Persamaan potensial *exchange correlation*, yang diberikan melalui persamaan $V_{xc}[n](\vec{r}) = \frac{\partial E_{xc}}{\partial n(\vec{r})} E_{xc}$ adalah energi *exchange correlation*.
6. Persamaan energi *exchange correlation* dituliskan $E_{xc} = E_x + E_c$. E_x adalah energi pertukaran antara elektron dengan spin yang sama, tetapi E_c juga merupakan energi korelasi antara elektron dengan spin yang berbeda.
7. Maka persamaan densitas elektron dapat diperoleh melalui persamaan $n(r') = |\varphi_i|^2$.

Pada perhitungan berbasis DFT, densitas elektron dihitung dengan cara iterasi. Mula-mula dilakukan tebakan awal nilai densitas elektron. Kemudian densitas elektron tersebut digunakan untuk menyelesaikan persamaan potensial Kohn-Sham pada point 1. Lalu, dapat digunakan untuk menghitung nilai energi

pada pada point 2. Kemudian keadaan yang terisi elektron digunakan untuk membuat suatu densitas baru dengan menggunakan point 7. Sehingga dibuat persamaan potensial Kohn-Sham yang baru dan perhitungan diulang kembali hingga terjadi self-consistent, yakni selisih antara densitas baru dengan densitas sebelumnya sangat kecil, atau dengan kata lain sudah tercapai keadaan konvergen (Shanaz, 2019). Berikut adalah algoritma metode DFT untuk mendapatkan energi dan beberapa parameter lain: (Nakamachi dkk., 2013)



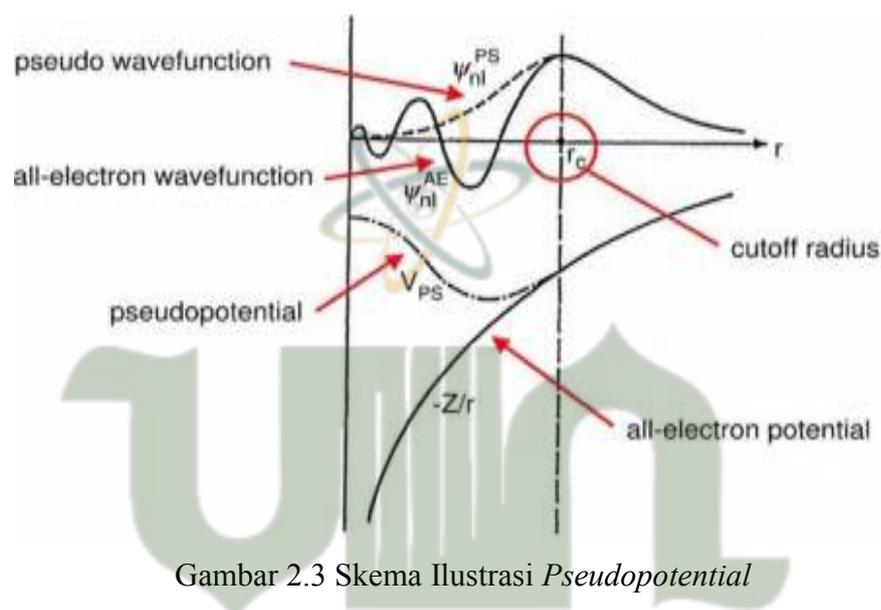
Gambar 2.2 Algoritma Kohn-Sham

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI
SUMATERA UTARA MEDAN

2.3 Pseudopotensial

Pendekatan *pseudopotensial* merupakan cara yang efektif untuk melakukan kalkulasi dalam berbagai sistem poliatomik. Dalam pendekatan ini, hanya elektron valensi yang aktif secara kimiawi yang dikerjakan secara eksplisit. Elektron inti secara kimiawi dieliminasi dalam pendekatan inti. Semua interaksi elektrostatis dan kuantum mekanis elektron valensi dengan inti ion (tarikan *Coulomb* inti yang disaring oleh elektron inti, tolakan Pauli, dan korelasi pertukaran antara elektron inti dan valensi) diperhitungkan oleh *pseudopotensial* yang bergantung pada momentum sudut. Perumusan DFT sebagai pendekatan oleh Hohenberg-Kohn dan Kohn-Sham pada pertengahan 1960-an dan LDA merupakan tonggak utamanya.

Selanjutnya, DFT menjadi pendekatan yang dominan dalam perhitungan struktur elektronik dari padatan dan permukaan. Skema PW-PP telah digunakan untuk mempelajari struktur elektronik dari padatan sejak akhir 1950. Tujuan metode ini adalah untuk menyederhanakan masalah DFT dengan hanya mempertimbangkan elektron valensi. Elektron inti dikecualikan dengan asumsi bahwa muatannya tidak terpengaruh oleh perubahan lingkungan kimia. Perkiraan ini dipahami dengan baik dan memberikan kelebihan dalam bidang komputasi (Ilyas, 2021). Dimana skema ilustrasi *pseudopotensial* dapat dilihat pada gambar dibawah ini: (Kebede dkk., 2014)

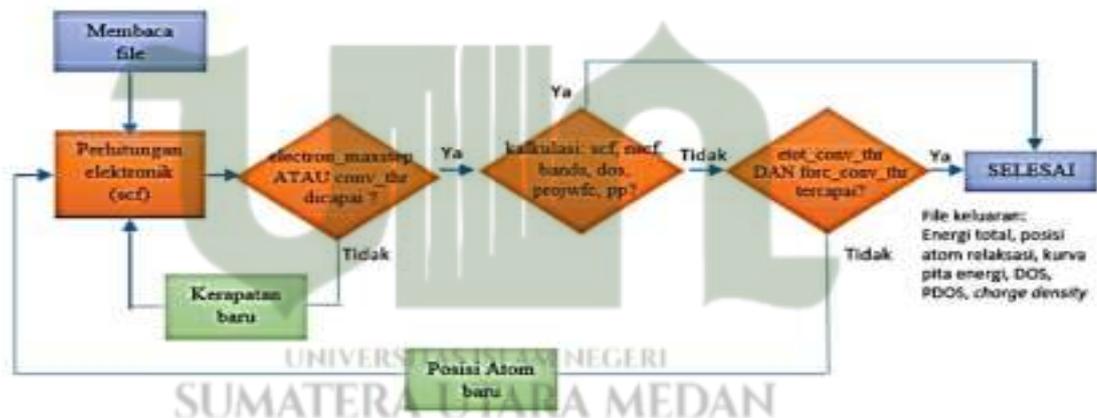


Gambar 2.3 Skema Ilustrasi *Pseudopotential*

Metode aproksimasi *pseudopotensial* digunakan dalam perhitungan struktur elektronik material. Pendekatan ini memiliki beberapa keunggulan dibandingkan metode lain, seperti efisiensi perhitungan dan kemampuan untuk memodelkan sifat-sifat elektronik material dengan baik. Beberapa contoh metode aproksimasi *pseudopotensial* meliputi NCPP (*Norm-Conserving Pseudopotentials*), USPP (*Ultra-soft Pseudopotentials*), dan PAW (*Projected Augmented Wave*). Metode ini penting dalam memahami sifat-sifat material dan digunakan dalam berbagai aplikasi, termasuk dalam studi tentang divais elektronika dan sifat-sifat material untuk aplikasi tertentu (Sabeni dkk., 2022).

2.4 *Quantum ESPRESSO*

Quantum ESPRESSO (QE) adalah *free open-source* yang digunakan untuk simulasi komputer, optimasi struktural dan penelitian struktur elektronik bahan yang berbeda, berdasarkan Teori Fungsional Densitas menggunakan basis set Bidang-Gelombang dan potensi semu. Kode QE bekerja pada berbagai jenis mesin Unix, termasuk mesin paralel yang menggunakan *Message Passing Interface* (MPI). Selain itu, QE bekerja pada CPU multicore, memanfaatkan paradigma OpenMP. Secara bersamaan, versi *OpenMP* dapat direalisasikan secara eksplisit melalui arahan *compiler* dan memerlukan kompilasi kode, atau melalui menghubungkan perpustakaan matematika *multithread* (seperti *Math Kernel Library*). Paralelisasi *OpenMP* eksplisit diterapkan di QE untuk meningkatkan skalabilitas pada mesin paralel multicore yang besar (Azhar, 2020). Adapun algoritma perhitungan yang dilakukan pada QE untuk mendapatkan hasil perhitungan yang akurat (Mahyuddin, Muhammad Haris & Ginting, 2020).

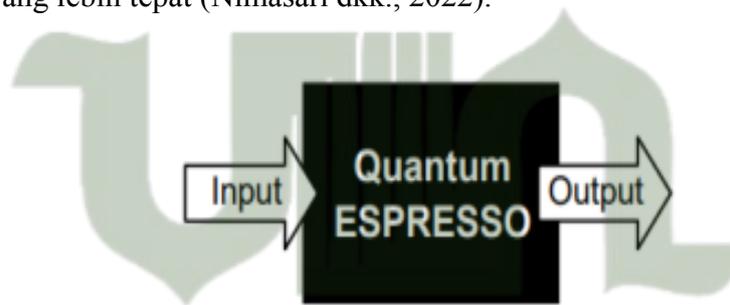


Gambar 2.4 Algoritma Kalkulasi yang Dilakukan pada *Quantum Espresso*

QE melakukan dua jenis iterasi utama, yaitu iterasi untuk kalkulasi elektronik (SCF) dan iterasi untuk kalkulasi ionik/atomik, sebagaimana dijelaskan dalam skema Gambar 2.4. Setelah QE membaca file input, langkah pertama adalah menyelesaikan permasalahan *many-body*, yakni interaksi antara elektron-elektron, dengan metode Hartree-Fock atau kalkulasi *self-consistent field* (SCF). Iterasi ini dilakukan secara berulang hingga mencapai ambang konvergensi (*conv_thr*) atau jumlah iterasi maksimum. Jika kalkulasi yang diinginkan hanya berkaitan dengan SCF, NSCF, atau perhitungan pita energi, QE dapat menyelesaikan kalkulasi

tersebut setelah iterasi SCF pertama. Namun, jika posisi atom yang optimal juga perlu dihitung, QE akan memeriksa apakah ambang energi (*etot_conv_thr*) dan ambang gaya (*forc_conv_thr*) telah terpenuhi. Jika telah terpenuhi, kalkulasi secara keseluruhan dianggap selesai, dan hasilnya dapat langsung dilihat dan dianalisis. Jika ambang energi dan ambang gaya belum tercapai, QE akan menggeser posisi atom dan memulai iterasi SCF kedua. Proses ini diulang sampai ambang energi dan ambang gaya terpenuhi. Pada titik ini, hasil kalkulasi akan mencakup posisi optimum atom beserta nilai energi minimumnya (Azhar, 2019).

QE bekerja seperti kotak hitam, Kotak hitam adalah perangkat, objek, atau sistem yang cara kerjanya tidak diketahui; hanya "input rangsangan" dan "reaksi keluaran" yang diketahui karakteristiknya (Hung dkk., 2022). Dalam konteks QE, ini mungkin mengacu pada representasi matematis dari sifat-sifat material atau sistem fisik yang kompleks, yang dapat digunakan untuk perhitungan dan prediksi. Namun, tanpa konteks yang lebih spesifik, tidak mungkin untuk memberikan definisi yang lebih tepat (Nimasari dkk., 2022).



Gambar 2.5 *Quantum ESPRESSO* Sebagai Kotak Hitam (*Black Box*)

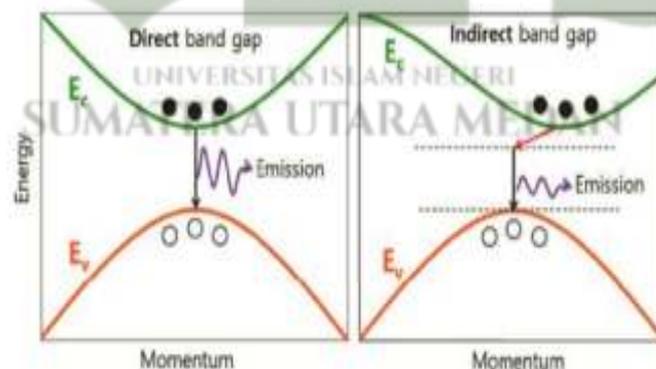
2.5 Karakteristik Sifat Elektronik Material

2.5.1 *Electronic Band Structure*

Lintasan valensi dari suatu atom menunjukkan pita level energi, sehingga setiap material memiliki pita level energi tertentu. Bila elektron mendapat energi tambahan yang cukup, maka elektron tersebut dapat meninggalkan lintasan valensi, menjadi elektron bebas, dan berada pada pita konduksi. Perbedaan energi elektron pada pita valensi dan pita konduksi pada lintasan terbawahnya disebut celah pita (band gap) atau celah terlarang (*forbidden gap*). Material isolator yang berisi penuh elektron pada pita valensi memiliki celah pita > 3 eV, material yang berisi sebagian elektron pada pita valensi memiliki celah pita ≤ 3 eV (Himran, 2021).

Terdapat dua jenis celah pita energi, yaitu "*direct band gap*" dan "*indirect band gap*" (Hahn dkk., 2023).

1. *Direct Band Gap* pada material dengan celah pita energi tipe direct, momentum elektron dan lubang sejajar. Ini berarti bahwa transisi elektron dari pita valensi ke pita konduksi terjadi tanpa perubahan momentum kisi. Material dengan celah pita energi tipe direct cenderung memiliki konduktivitas optik dan listrik yang lebih baik karena transisi elektron antara pita konduksi dan pita valensi terjadi dengan melepaskan atau menyerap foton. Hal ini membuat material tipe direct band gap cocok untuk aplikasi seperti dioda dan sel surya
2. *Indirect Band Gap* pada material dengan celah pita energi tipe indirect, momentum elektron dan lubang tidak sejajar. Transisi elektron dari pita valensi ke pita konduksi dalam material ini melibatkan perubahan momentum kisi. Material dengan celah pita energi tipe indirect cenderung memiliki konduktivitas optik dan listrik yang lebih rendah karena transisi elektron memerlukan bantuan foton tambahan atau phonon untuk melestarikan momentum. Hal ini membuat material tipe indirect band gap kurang efisien dalam aplikasi optik dan memerlukan tambahan energi untuk proses konduktivitasnya.



Gambar 2.6 Energi vs. Momentum Kristal untuk Semikonduktor

Brillouin Zone memiliki peran penting dalam memahami sifat-sifat listrik dan optik dari material, termasuk band gap. Secara khusus, *Brillouin Zone* adalah zona dalam ruang *reciprocal lattice* yang digunakan untuk menganalisis sifat-sifat listrik dan optik dari material padat. Dalam konteks band gap, struktur pita energi dari

material semikonduktor dapat dianalisis melalui *Brillouin Zone* untuk memahami sifat-sifat transisi elektronik antara pita konduksi dan pita valensi, yang kemudian memengaruhi sifat-sifat listrik dan optik dari material tersebut (Abbasi & Khataee, 2019).

2.5.2 *Density of States (DOS)*

Density of states (DOS) adalah jumlah keadaan per interval energi pada setiap tingkat energi yang tersedia untuk ditempati suatu sistem. Distribusi kepadatan mewakilinya secara matematis. Umumnya domain ruang dan waktu dari berbagai keadaan yang ditempati oleh sistem dirata-ratakan. DOS yang tinggi pada tingkat energi tertentu dimaksudkan untuk banyak keadaan bagian yang tersedia untuk ditempati. Ini berarti DOS nol ketika tidak ada keadaan yang dapat ditempati pada tingkat energi tersebut. DOS biasanya diwakili oleh salah satu simbol g , p , D , n , atau N (Grewal, 2022).

Hasil DOS dapat diperoleh dengan mengintegrasikan kerapatan elektron yang dihasilkan di ruang k . DOS untuk elektron, foton, atau fonon dapat dihitung dan disediakan sebagai fungsi keduanya energi atau vektor gelombang k , bergantung pada sistem mekanika kuantum. Hubungan spesifik sistem antara E dan k untuk dispersi energi harus dipahami agar dapat mengkonversi antara DOS sebagai fungsi energi, dan DOS sebagai fungsi vektor gelombang. Jumlah mode per satuan rentang frekuensi dinyatakan dengan DOS suatu sistem. Simulasi DFT prinsip pertama secara tradisional telah digunakan untuk memperoleh DOS (Adeleke dkk., 2023).

2.5.3 *Projected Density of States (PDOS)*

Projected density of states (PDOS) adalah metode perhitungan yang digunakan untuk memperoleh informasi tentang kontribusi orbital atomik terhadap kepadatan keadaan elektronik dalam suatu sistem. PDOS menghitung kepadatan keadaan elektronik yang diproyeksikan pada orbital atomik tertentu dalam suatu molekul atau padatan. PDOS dapat digunakan untuk menganalisis konduktivitas elektronik dalam suatu sistem. Untuk meningkatkan akurasi perhitungan PDOS, meningkatkan pengambilan sampel dari zona *Brillouin* pada struktur dapat membantu meningkatkan akurasi perhitungan (Xu, 2018).

2.6 Penelitian Yang Relevan

Aidha Ratna Fajarini Sidik (2022) pada penelitian ini dilakukan dengan *kogence.com* yang terdapat beberapa *software* didalamnya seperti *Quantum ESPRESSO*. Tahap perhitungan dilakukan setelah melakukan penggambaran molekul dengan *software VESTA4.0.0*. dan menggunakan fungsi *exchange-correlation* bertipe GGA-PBE. Pada penelitian ini mendapatkan bandgap 1.72 eV untuk LiPbBr_3 , bandgap 1.55 eV untuk LiPbCl_3 , dan bandgap 1.24 eV untuk LiPbI_3 . Tetapi pada penelitian ini tidak ada ditunjukkannya nilai dari *Lattice constants*.

Pada penelitian Pitriana dkk (2019) yang berjudul *Electronic Structure Calculations of Alkali Iodide APbI_3 ($A = \text{Li, Na, K, Rb or Cs}$) using Density Functional Theory (DFT) Method* menemukan bahwa energi gap *perovskite* tersebut berada pada rentang 1,31 eV – 1,43 eV, sedangkan konstanta kisi bervariasi dengan rentang 5,1 Å sampai 6,3 Å. Investigasi dilakukan melalui paket *Quantum ESPRESSO* melalui *pseudopotensial* jenis *ultrasoft* dan fungsi pertukaran-korelasi jenis GGA-PBE.

Pitriana dkk (2019) kemudian melanjutkan penelitian serupa dengan senyawa yang berbeda yaitu APbBr_3 ($A = \text{Li, Na, K, Rb or Cs}$). Pada penelitian ini, mereka membandingkan nilai konstanta kisi antar tipe fungsi pertukaran-korelasi yang berbeda, yakni GGA-PBE dan LDA-PZ (*local density approximation Perdew-Wang*). Kesimpulan menyatakan bahwa penggunaan fungsi pertukaran-korelasi GGA-PBE lebih mendekati hasil eksperimen melalui perbandingan konstanta kisi CsPbBr_3 . Untuk nilai band gap LiPbBr_3 (yang berkaitan erat dengan skripsi ini) Pitriana, dkk. memperoleh 1,708 untuk tipe GGA-PBE dan 1,170 untuk tipe LDA-PZ (Pina Pitriana dkk., 2019).

Pada tahun yang sama, Pitriana kemudian merangkum semua penelitiannya dalam disertasinya yang berjudul *Kajian Pengaruh Kation dan Anion Penyusun dari Bahan Anorganik Perovskit Berbasis Logam Halida pada Struktur Elektroniknya melalui perhitungan dengan Metode Density Functional Theory (DFT)*. Disertasi ini menyajikan semua nilai konstanta kisi, *band gap*, grafik struktur pita elektronik, dan DOS untuk tiga variasi senyawa yang terdiri dari APbBr_3 , APbI_3 , dan ASnI_3 dimana A merupakan kation logam alkali yang terdiri dari Li, Na, K, Rb, dan Cs. Beliau menyatakan bahwa semua senyawa tersebut

menunjukkan sifat bahan semikonduktor dan berpotensi sebagai bahan penyerap cahaya pada sel surya *perovskite* (Pitriana, 2019).

