

BAB V PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian dan perhitungan menggunakan metode komputasi melalui *Density Functional Theory* (DFT) yang telah dilakukan pada *perovskite* LiBX_3 (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) fase kubik, maka dapat ditarik kesimpulan:

1. Sifat elektronik dari *perovskite* LiBX_3 (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) pada fase kubik dengan konstanta kisi untuk $\text{LiPbBr}_3 = 5,938 \text{ \AA}$, $\text{LiPbCl}_3 = 5,663 \text{ \AA}$, $\text{LiPbI}_3 = 6,321 \text{ \AA}$, $\text{LiSnBr}_3 = 5,803 \text{ \AA}$, $\text{LiSnCl}_3 = 5,523 \text{ \AA}$, dan $\text{LiSnI}_3 = 6,175 \text{ \AA}$. Dalam penelitian ini memperoleh nilai energi celah pita (E_g) yang dihasilkan untuk LiPbBr_3 sebesar 1,71 eV, untuk LiPbCl_3 sebesar 1,87 eV, untuk LiPbI_3 sebesar 1,43 eV, untuk LiSnBr_3 sebesar 0,51 eV, untuk LiSnCl_3 sebesar 0,65 eV, dan untuk LiSnI_3 sebesar 0,28 eV. bahan yang digunakan sebagai bahan penyerapan cahaya yang efektif dengan tingkat efisiensi konversi daya PCE hingga 35% bisa dicapai oleh divais sel surya sambungan p-n dengan besar celah pita energi sebesar 1,34 eV, maka *perovskite* LiPbX_3 (LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , dan LiPbI_3) berpeluang menjadi bahan penyerapan cahaya dengan efisiensi konversi energi yang besar.
2. Kesesuaian antara struktur pita elektronik dan grafik DOS terlihat dari bagaimana pita konduksi dan pita valensi pada grafik struktur pita elektronik berkorelasi dengan puncak atau peningkatan dalam grafik DOS, menunjukkan banyaknya tingkat energi yang bisa ditempati oleh elektron. Berdasarkan grafik diperoleh untuk Sn ke Pb nilai celah pita energi semakin besar dengan perubahan atom jari-jari atom yang semakin besar sedangkan untuk Cl, Br, ke I nilai celah pita energi semakin kecil dengan perubahan jari-jari atom yang semakin besar. Sedangkan untuk grafik PDOS dapat dilihat bahwa antara atom A, B, dan X, semua ikut berperan dalam pembentukan celah pita energi. Dimana atom A sebagai pembentuk pita konduksi dan X sebagai

pembentuk pita valensi, dan atom A dan X mendominasi dalam pembentukan celah pita energi sedangkan atom B juga ikut berperan dalam membentuk pita valensi dan pita konduksi tetapi hanya memberi pengaruh yang lebih kecil, hal ini dimungkinkan posisi atom B yang berada di pusat kubus sehingga tidak merubah secara signifikan simetri dari kristal.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian dan perhitungan yang telah dilakukan maka saran yang dapat diberikan peneliti adalah:

1. Untuk penelitian selanjutnya diharapkan untuk melakukan perhitungan lainnya seperti perhitungan pada sifat fonon, sifat termal dan sifat optik menggunakan *perovskite* yang sama pada penelitian ini.
2. Untuk penelitian selanjutnya diharapkan menggunakan fase yang berbeda serta variasi kation dan anion berbeda untuk mendapatkan bahan dengan nilai PCE lebih maksimum.

