

BAB I

PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Perovskit halida menarik perhatian karena biaya fabrikasinya yang rendah dan kinerja fotovoltaiik yang sangat baik sehingga menjadikannya material yang sangat menjanjikan untuk aplikasi sel surya (Snaith, 2018). Material ini menunjukkan sifat optoelektronik yang luar biasa, termasuk koefisien absorpsi yang tinggi, celah pita langsung, masa hidup pembawa muatan yang panjang, dan mobilitas pembawa muatan yang tinggi (Li dkk., 2023; Sansoni dkk., 2022; Yi dkk., 2019). Karakteristik ini menjadikan perovskit cocok untuk aplikasi fotovoltaiik, mendukung sel surya film tipis berbasis perovskit halida untuk mencapai efisiensi konversi daya (PCE) setinggi 27% (Park, 2026).

Secara struktural, perovskit memiliki rumus molekul ABX_3 . Komponen A merupakan kation logam seperti Cesium (Cs^+) atau molekul organik seperti metylammonium ($CH_3NH_3^+$) dan formamidine ($CH_3CH_2NH_3^+$). Komponen B merupakan kation bervalensi dua seperti Pb^{2+} , Sn^{2+} , dan logam alkali tanah. Komponen X merupakan anion atom halogen seperti Cl^- , Br^- , I^- (Noman dkk., 2024). Perovskit pada awalnya berbahan dasar organik seperti $MAPbI_3$ (Sasongko dkk., 2025) dan $FAPbI_3$ tetapi sulit untuk dikomersialkan karena ketidakstabilan MA dan FA serta memungkinkan Pb yang toksik mencemari lingkungan (Babayigit dkk., 2016; Jin dkk., 2020). Oleh karena itu, pengembangan material perovskit bebas timbal dengan sifat fotovoltaiik yang menguntungkan menjadi arah penelitian yang penting.

Sejumlah elemen yang berbeda dapat digabungkan bersama untuk membentuk struktur perovskit yang baru. Perovskit memiliki struktur yang sederhana, tetapi dapat memiliki karakteristik melawan distorsi struktural dalam keadaan khusus, misalnya akibat adanya pengaruh temperatur dan tekanan. Adanya distorsi struktural tersebut dapat menyebabkan kenaikan atau penurunan pada sifat

elektronik dan optik dari material (Wulandari dkk., 2020). Distorsi struktural dalam perovskit perlu diatur untuk mendapatkan sifat optik yang diinginkan. Distorsi terbukti dapat meningkatkan emisi cahaya di rentang cahaya tampak dan meningkatkan waktu hidup di keadaan tereksitasi (Mala dkk., 2022).

Salah satu pendekatan untuk meminimalkan risiko Pb ke lingkungan melalui inovasi perovskit berbahan dasar anorganik bebas timbal, menggantikan Pb dengan kation berpotensi, seperti Sn^{2+} (Li dkk., 2018), Be^{2+} , Mg^{2+} , Ca^{2+} (Ikot dkk., 2023; Ma dkk., 2018), Ag^+ (Du dkk., 2017), Ge^{2+} (Krishnamoorthy dkk., 2015), Sb^{3+} (Zuo & Ding, 2017), dan Ti^{4+} (Ju dkk., 2018). Dari beberapa kandidat kation, Zhu dkk., (2018) menunjukkan bahwa Sn^{2+} paling berpotensi karena berada dalam grup tabel sistem periodik unsur yang sama dan mempunyai konfigurasi elektron valensi yang sama ($ns^2 np^2$) dengan Pb. Hasil penelitian Yao dkk. (2020) menunjukkan bahwa perovskit CsSnBr_3 mempunyai sifat optoelektronik yang sama, bahkan lebih baik dibandingkan CsPbBr_3 . Secara khusus, CsSnBr_3 memiliki mobilitas pembawa muatan yang lebih tinggi dan band gap yang lebih sempit dibandingkan CsPbBr_3 (Stoumpos dkk., 2013).

Meskipun demikian, perovskit berbahan dasar timah mudah teroksidasi dari Sn^{2+} menjadi Sn^{4+} (suhu ambien), sehingga mengurangi aktivitas optoelektronik meskipun memiliki stabilitas termal intrinsik (Nasti & Abate, 2020; Pascual dkk., 2020). Oleh karena itu, meningkatkan stabilitas CsSnBr_3 tetap menjadi tantangan penting. Salah satu strategi yang efektif adalah doping pada sisi B dengan kation divalen atau trivalen, seperti Mg^{2+} , Mo^{4+} , Te^{4+} (Kholil dkk., 2021), Pd^{2+} , Sb^{3+} , Eu^{3+} , Te^{4+} (Wang dkk., 2022), dan Bi^{3+} (Bala & Kumar, 2020; Chen dkk., 2019; Yao dkk., 2020). Di antara dopan ini, Bi^{3+} telah menarik perhatian yang cukup besar. Doping Bi pada perovskit halida telah dilaporkan dapat menekan transisi fasa, memodulasi struktur elektronik, dan meningkatkan mobilitas pembawa muatan, sehingga menghasilkan peningkatan kinerja optoelektronik (Hasegawa dkk., 2017; Hu dkk., 2017; Lee dkk., 2020).

Untuk memahami peningkatan ini pada level atom, pendekatan eksperimental dan teoretis dapat digunakan. Pendekatan teori menggunakan kimia

komputasi dilaporkan mampu menjelaskan struktur dan sifat-sifat optoelektronik dari material zat padat. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Density Functional Theory* (DFT). DFT menjadi alat untuk memprediksi dan menganalisis sifat struktur dan optoelektronik material sebelum validasi eksperimental. DFT telah banyak diterapkan pada berbagai sistem perovskit seperti BaLiX_3 ($X = \text{F, Cl, Br, atau I}$) oleh Pingak dkk. (2023), CsXBr_3 ($X = \text{Be, Mg, Ca}$) oleh Ikot dkk. (2023), CsSnBr_3 terdoping Mn oleh Hidaoui dkk. (2023), CsSnBr_3 terdoping Mo dan Tc oleh Kholil dkk. (2021). Studi tersebut membuktikan bahwa DFT mampu memberikan pemahaman dasar mengenai hubungan struktur dan sifat-sifatnya dalam material perovskit.

Meskipun beberapa penelitian telah menyelidiki CsSnBr_3 terdoping Bi, sebagian besar terbatas pada konsentrasi doping tunggal atau rendah (Adib dkk., 2023; Chaudhary dkk., 2023). Namun, pemahaman sistematis tentang bagaimana variasi konsentrasi Bi memengaruhi sifat struktur, elektronik, dan optik CsSnBr_3 masih kurang, khususnya terkait dengan distorsi struktural lokal dan dampaknya pada perilaku optoelektronik. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk secara sistematis menyelidiki sifat struktur, elektronik, dan optik CsSnBr_3 terdoping Bi menggunakan perhitungan prinsip pertama DFT. Dalam penelitian ini, atom Sn sebagian digantikan oleh Bi pada berbagai konsentrasi (12,5%, 25%, 37,5%, dan 50%) untuk menjelaskan hubungan antara substitusi Bi, distorsi struktural lokal, dan sifat optoelektronik yang dihasilkan.

I.2 Rumusan Masalah

1. Menentukan pengaruh doping Bi terhadap energi dan panjang kisi CsSnBr_3 .
2. Menentukan pengaruh doping Bi terhadap sifat optoelektronik.

I.3 Tujuan Penelitian

1. Menentukan pengaruh doping Bi terhadap energi dan panjang kisi CsSnBr_3 .

2. Menentukan pengaruh doping Bi terhadap sifat optoelektronik.

I.4 Manfaat Penelitian

1. Penelitian ini sebagai uji pendahuluan sebelum pengujian lebih lanjut secara eksperimen perovskit CsSnBr_3 terdoping Bi