

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Konsumsi energi dunia meningkat hingga 31 exajoule (EJ) atau sekitar 8.61 *Terawatt-hour* (TWh) pada tahun 2021. Konsumsi energi meningkat jika dibandingkan dengan tingkat konsumsi pada tahun 2019. Hal ini didorong oleh peningkatan konsumsi energi negara-negara berkembang yang berusaha bangkit dari pandemi COVID-19. Sumber pertumbuhan energi primer antara 2019 dan 2021 sepenuhnya berasal dari sumber energi terbarukan (BP Global, 2022). Pemanfaatan energi terbarukan di Indonesia berpotensi mendukung penyelenggaraan pertahanan negara. Pemanfaatan energi ini mampu mengurangi penggunaan devisa dari pemanfaatan energi berbasis fosil sehingga mampu meningkatkan ketahanan di dalam negeri (Kementerian Pertahanan Republik Indonesia, 2024). Salah satu dari tiga sumber energi terbarukan terbesar adalah energi surya yang perlu dikonversi menjadi energi listrik dengan sel *Photovoltaic* (PV) (International Renewable Energy Agency (IRENA), 2024).

Sel PV adalah sambungan semikonduktor tipe p dan n atau perangkat penghalang Schottky (A.Messenger & Ventre, 2005). Seiring perkembangan teknologi, material sel PV menjadi semakin bervariasi. Terdapat empat jenis material pada generasi ketiga teknologi sel PV diantaranya *dye-sensitized*, organik, *nanocrystal*, dan perovskit. Perkembangan material baru seperti perovskit sangat berkontribusi dalam peningkatan efisiensi sel PV hingga 20%, yang relatif tinggi di fase awal (Solak & Irmak, 2023)

Perovskit pertama kali ditemukan oleh mineralog Prussia, Gustav Rose pada tahun 1839 dan diberi nama sesuai dengan nama ahli mineral terkenal Rusia Count Lev A. Perovsky (Jena et al., 2019). Struktur perovskit merupakan struktur kristal *corner-sharing* dengan stoikiometri umum ABX_3 (atau yang setara). Kerangka struktur perovskit menawarkan berbagai kemampuan dan sifat fisik luar biasa seperti ferroelektrisitas, perilaku magnetik, multiferroisitas, superkonduktivitas, karakteristik semikonduktor, dan keunggulan dalam aplikasi optoelektronik (Dhole et al., 2022). Meskipun keberadaan perovskit di alam terbatas, sintesis perovskit dapat menggunakan hampir seluruh unsur tabel periodik yang mudah ditemukan, perovskit juga dapat dijumpai dalam banyak rumus kompleks seperti logam $MgCNi_3$ (Akkerman & Manna, 2020). Dengan menggunakan material organik dan inorganik halida perovskit, peningkatan terhadap performa sel surya dapat dilakukan bahkan melampaui efisiensi tertinggi material semikonduktor seperti CdTe dan CIGS (*Copper Indium Gallium Selenide*) (Jena et al., 2019). Meskipun begitu, perovskit halida organik memiliki kecenderungan tidak stabil di kondisi atmosfer yang secara alami

disebabkan oleh kelembapan dan interaksi dengan cahaya yang diikuti oleh interaksi material dengan oksigen. Perovskit halida inorganik secara umum lebih stabil dibandingkan dengan organik maupun hibrida sehingga dapat bertahan lebih lama di kondisi atmosfer (Alsalamah et al., 2023).

Di antara material perovskit halida, material logam-halida perovskit memiliki potensial yang begitu besar untuk berbagai aplikasi seperti *photovoltaics*, *optoelectronic*, dan fotokatalisis. Perovskit logam-halida menjadi terkenal karena penerapannya di sel surya, laser, *light emitting diode* (LED), *water splitting*, pendingin laser, dan lain-lain (Ha et al., 2017). Logam-halida perovskit memiliki kelebihan dalam sintesis yang mudah, rendah biaya, serta memiliki sifat optik dan elektronik yang dapat disesuaikan dengan kebutuhan (Dong et al., 2023). Banyak penelitian dari material ini yang berbasis timbal (Pb) seperti CsPbX_3 , MAPbX_3 , dan FAPbX_3 . Padahal, penggunaan timbal berbahaya bagi lingkungan dan kesehatan manusia. Pb merupakan logam berat tinggi toksisitas yang mampu menyebabkan gangguan neurologis, kelainan fisik, gangguan otot, masalah genetik dan keturunan, atau efek akut seperti muntah, dehidrasi, kantuk, mual, gagal ginjal, dan nyeri perut (Collin et al., 2022). Di sisi lain, timbal juga mampu menghambat pertumbuhan tanaman seperti menghambat pertumbuhan akar, tanaman kerdil, sistem akar dan kekurangan klorofil (klorosis) (Hadi & Aziz, 2015). Maka dari itu, perlu dilakukan penelitian material perovskit tanpa menggunakan unsur timbal guna mengurangi penggunaan timbal.

Variasi anion pada perovskit logam-halida sering kali dilakukan oleh peneliti untuk mendapatkan sifat dan struktur yang diinginkan. Berdasarkan penelitian (Steele et al., 2020) variasi anion akan mempengaruhi struktur kristal celah pita (*bandgap*), dan stabilitas pada perovskit halida timbal. Struktur geometri dan stabilitas perovskit dipengaruhi oleh jari-jari ion penyusunnya. Pertukaran anion akan memberikan berbagai peluang atau potensi untuk menciptakan keragaman struktur, sifat fisik, dan sifat optik pada material. Selain itu, pertukaran anion menjadi alat penting untuk meningkatkan fleksibilitas dan keragaman sifat optik dan elektronik material tanpa perlu merancang ulang sintesis awalnya.

Penelitian material perovskit KMnF_3 telah dilakukan oleh R. T. Wang et al. (2019), yang menunjukkan bahwa material ini mampu mempertahankan struktur ABX_3 di dalam perendaman air selama 12 jam. Pemilihan unsur-unsur ini mendukung kestabilan kimia karena adanya perbedaan besar dalam keelektronegatifan ion-ion di unsur kalsium (K), Mangan (Mn) dan Fluorin (F). Disisi lain, menurut data base Ricci et al. (2017) yang ada pada website *data base Material Project*, kubik KMnF_3 memiliki celah pita atau *band gap* sebesar 2,68 eV yang menandakan bahwa material ini termasuk semikonduktor. Hal ini membuktikan bahwa material KMnF_3 memiliki sifat semikonduktor yang berpotensi digunakan

sebagai alat optik. Namun, penelitian kurang mengkaji secara mendalam tentang sifat mekanis dan optoelektronik pada material ini. Selain itu, struktur kristal kubik dari senyawa KMnX_3 baru dilaporkan untuk KMnF_3 , sementara varian dengan anion Cl, Br, dan I belum banyak dikaji dalam struktur kubik.

Berdasarkan latar belakang di atas, penulis akan melakukan karakterisasi struktur elektronik, mekanis dan optik dari material perovskit halida KMnX_3 , X adalah variasi unsur F, Cl, Br dan I dengan Metode simulasi kuantum *Density Functional Theory* (DFT). Metode ini mampu melakukan perhitungan sifat material dalam skala atomistik dan memprediksi sifat material dari interaksi yang rumit antara inti dan elektron (Hung et al., 2023). Metode DFT memiliki efisiensi tinggi dibandingkan eksperimen tradisional, terutama dalam hal kecepatan analisis, biaya rendah, dan kemampuan untuk mempelajari sistem pada skala atomik. DFT memungkinkan simulasi sifat material di bawah kondisi ekstrim yang sulit dijangkau secara eksperimen, seperti tekanan tinggi atau suhu ekstrim. Selain itu, DFT dapat memprediksi sifat elektronik, struktur, dan energi material dengan akurasi tinggi, sehingga eksperimen dapat lebih terarah.

Fokus dari penelitian ini adalah menganalisis hasil prediksi sifat mekanis seperti modulus *bulk*, *shear*, elastisitas dan rasio Poisson serta sifat optoelektronik seperti *band gap*, konstanta dielektrik, absorpsi cahaya (α), konduktivitas (σ), fungsi kehilangan elektron (L), koefisien ekstingsi (K), indeks bias (n), dan reflektivitas (R) akibat variasi anion perovskit KMnX_3 dari perhitungan metode DFT. Selain itu, penelitian ini memiliki kelebihan diantaranya tidak menggunakan unsur timbal, menggunakan metode yang memiliki efisiensi tinggi, dan jenis material yang digunakan, yaitu material perovskit logam-halida, lebih tahan terhadap kondisi lingkungan, sintesis yang mudah, rendah biaya, serta memiliki sifat optik yang dapat disesuaikan dengan kebutuhan.

1.2 Rumusan Masalah

Permasalahan penelitian dapat dirumuskan sebagai berikut:

- a. Bagaimana struktur elektronik, termasuk struktur pita energi dan *projected density of states* (PDOS), dari perovskit KMnX_3 (X = F, Cl, Br, I) ?
- b. Bagaimana sifat optik dari KMnX_3 yang meliputi konstanta dielektrik, koefisien absorpsi, indeks bias (n), konduktivitas optik (σ), fungsi kehilangan energi elektron (L), koefisien ekstingsi (K), dan reflektivitas (R)?
- c. Bagaimana sifat mekanis KMnX_3 yang meliputi modulus *bulk*, *shear*, elastisitas dan rasio Poisson dari perovskit KMnX_3 (X = F, Cl, Br, I)?
- d. Bagaimana variasi anion halida (X = F, Cl, Br, I) memengaruhi sifat mekanis dan optoelektronik material KMnX_3 ?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian menunjukkan sasaran yang harus dicapai sesuai dengan rumusan masalah. Tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut

- a. Menganalisis sifat elektronik KMnX_3 , ($X = \text{F, Cl, Br, I}$) melalui struktur pita energi dan *projected density of states* (PDOS)
- b. Menganalisis sifat optik seperti konstanta dielektrik, absorpsi cahaya (α), konduktivitas (σ), fungsi kehilangan elektron (L), koefisien ekstinsi (K), indeks bias(n), dan reflektivitas (R) dari perovskit KMnX_3 ($X = \text{F, Cl, Br, I}$).
- c. Menghitung sifat mekanis material KMnX_3 ($X = \text{F, Cl, Br, I}$), seperti modulus elastisitas, modulus *bulk*, modulus *shear* dan rasio Poisson.
- d. Mengevaluasi pengaruh variasi anion halida ($X = \text{F, Cl, Br, I}$) terhadap sifat mekanis dan optoelektronik material.

1.4 Manfaat

1.4.1 Manfaat Teoritis

- a. Memberikan pendekatan teoritis tentang sifat mekanis dan optoelektronik perovskit KMnX_3 untuk mendukung pengembangan material berbasis perovskit.
- b. Memperkaya literatur ilmiah terkait material perovskit halida, khususnya KMnX_3 .
- c. Menyediakan dasar teoritis untuk penelitian lanjutan tentang aplikasi material perovskit dalam perangkat energi terbarukan.

1.4.2 Manfaat Praktis

- a. Memberikan informasi praktis tentang sifat material KMnX_3 yang dapat digunakan dalam desain perangkat energi, seperti sel surya, LED, dan perangkat penyimpanan energi.
- b. Mendukung inovasi teknologi material untuk ketahanan energi nasional melalui pengembangan material yang lebih efisien dan stabil.
- c. Memberikan referensi untuk pengembangan material perovskit dalam aplikasi energi terbarukan, dengan fokus pada efisiensi, kestabilan mekanis, dan kinerja optoelektronik.