

# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang

Material *perovskite* halida berbasis cesium dan timbal dengan rumus umum  $\text{CsPbX}_3$  ( $X = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) telah menjadi perhatian luas dalam penelitian material karena sifat elektroniknya yang unik, seperti celah pita energi yang dapat disesuaikan serta mobilitas pembawa muatan yang relatif tinggi. Karakteristik ini menjadikan *perovskite* halida sebagai kandidat potensial untuk berbagai aplikasi optoelektronik, termasuk sel surya, fotodetektor, dan *light-emitting devices*. Sebagian besar penelitian terdahulu berfokus pada *perovskite* dengan halogen Br dan I karena kestabilan struktural dan performa perangkatnya yang relatif baik, sementara *perovskite* dengan halogen F masih relatif jarang dikaji secara mendalam, khususnya dari sisi sifat elektroniknya (Jena et al., 2019).

Material  $\text{CsPbF}_3$  dipilih sebagai objek penelitian karena memiliki karakteristik fisik yang berbeda dibandingkan anggota keluarga *perovskite* halida lainnya. Atom fluor memiliki elektronegativitas paling tinggi di antara unsur halogen sehingga membentuk ikatan Pb–F yang lebih kuat dibandingkan ikatan Pb–Cl, Pb–Br, maupun Pb–I. Ikatan yang kuat tersebut menghasilkan struktur kristal yang lebih stabil serta memengaruhi pembentukan pita energi material. Selain itu, orbital F-2p berkontribusi dominan terhadap pita valensi sehingga keberadaan defek kekosongan atom fluor diperkirakan memberikan pengaruh yang signifikan terhadap distribusi keadaan elektronik, struktur pita energi, serta nilai *band gap*. Oleh karena itu,  $\text{CsPbF}_3$  dipilih untuk mengkaji pengaruh defek kekosongan halogen terhadap sifat elektronik material menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) (Yu & Cardona, 2010; Volonakis et al., 2016).

Dalam material semikonduktor, keberadaan defek intrinsik merupakan fenomena yang tidak dapat dihindari dan berperan penting dalam menentukan sifat elektronik. Defek seperti kekosongan atom (*vacancy*) dapat memodifikasi struktur pita energi, memperkenalkan tingkat energi lokal di dalam celah pita, serta memengaruhi proses transport muatan. Pada *perovskite* halida, defek kekosongan

halogen sering dilaporkan sebagai salah satu defek yang paling berpengaruh terhadap pembentukan *trap states* dan rekombinasi pembawa muatan, sehingga secara langsung memengaruhi performa elektronik material. Namun, pemahaman mengenai bagaimana defek kekosongan halogen memengaruhi sifat elektronik  $\text{CsPbF}_3$  secara kuantitatif masih belum komprehensif.

Pendekatan teoritis berbasis *Density Functional theory* (DFT) merupakan metode yang banyak digunakan untuk mempelajari sifat elektronik material pada tingkat atomik. DFT memungkinkan perhitungan struktur pita energi, rapat keadaan elektron, serta analisis kontribusi orbital atom terhadap sifat elektronik sistem secara akurat. Metode ini telah terbukti efektif dalam mengkaji pengaruh defek intrinsik pada material semikonduktor dan *perovskite* halida, sehingga dapat memberikan pemahaman mendalam mengenai mekanisme fisik yang mendasari perubahan sifat elektronik akibat keberadaan defek (Hohenberg & Kohn, 1964; Kohn & Sham, 1965; Jones, 2015).

Berdasarkan uraian tersebut, penelitian ini difokuskan pada kajian defek kekosongan halogen pada material *perovskite*  $\text{CsPbF}_3$  menggunakan metode *Density Functional theory*. Penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi ilmiah dalam memahami pengaruh defek kekosongan halogen terhadap struktur elektronik  $\text{CsPbF}_3$ , khususnya terkait perubahan struktur pita energi, *density of states*, dan kemungkinan terbentuknya *trap states* dalam celah pita energi. Fokus yang spesifik pada satu jenis defek dan satu material diharapkan menghasilkan analisis yang mendalam serta relevan untuk pengembangan studi *perovskite* halida berbasis komputasi.

## **B. Perumusan Masalah**

Berdasarkan latar belakang di atas, maka rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana karakteristik defek kekosongan halogen  $V_F$  pada material *perovskite*  $\text{CsPbF}_3$  berdasarkan perhitungan *Density Functional theory* (DFT)?

2. Bagaimana pengaruh defek kekosongan halogen  $V_F$  terhadap struktur elektronik material  $\text{CsPbF}_3$ , khususnya pada struktur pita energi (*band structure*), *density of states* (DOS), dan *projected density of states* (PDOS)?
3. Apakah keberadaan defek kekosongan halogen  $V_F$  menyebabkan terbentuknya *trap states* atau perubahan signifikan pada celah pita energi (*band gap*) material  $\text{CsPbF}_3$ ?

### C. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah, tujuan penelitian ini adalah:

1. Menganalisis karakteristik  $V_F$  defek kekosongan halogen fluorine pada material *perovskite*  $\text{CsPbF}_3$  berdasarkan perhitungan *Density Functional theory* (DFT).
2. Mengkaji pengaruh defek kekosongan halogen fluorine  $V_F$  terhadap struktur elektronik material  $\text{CsPbF}_3$ , khususnya pada struktur pita energi (*band structure*), *density of states* (DOS), dan *projected density of states* (PDOS).
3. Mengidentifikasi keberadaan *trap states* dan perubahan signifikan pada celah pita energi (*band gap*) material  $\text{CsPbF}_3$  akibat defek kekosongan halogen fluorine.

### D. Manfaat Penelitian

Hasil dari penelitian ini diharapkan dapat memberikan manfaat sebagai berikut:

1. Memberikan pemahaman ilmiah mengenai pengaruh defek kekosongan halogen terhadap sifat elektronik material *perovskite*  $\text{CsPbF}_3$ .
2. Menjadi referensi awal bagi penelitian lanjutan terkait kajian defek intrinsik pada *perovskite* halida berbasis fluorine yang masih relatif terbatas.
3. Mendukung pengembangan studi komputasi material berbasis *Density Functional theory* dalam analisis defek pada material *perovskite*.

### E. Batasan Masalah

Untuk menjaga fokus dan kejelasan arah penelitian, maka ruang lingkup penelitian ini dibatasi pada beberapa hal berikut:

1. Material yang dikaji dibatasi pada *perovskite*  $\text{CsPbF}_3$ .

2. Jenis defek intrinsik yang dianalisis hanya difokuskan pada defek kekosongan halogen fluorine  $V_F$ .
3. Kajian penelitian terbatas pada analisis sifat elektronik, meliputi struktur pita energi (*band structure*), *density of states* (DOS), dan *projected density of states* (PDOS).
4. Metode yang digunakan adalah *Density Functional theory* dengan pendekatan Kohn–Sham menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO.
5. Penelitian ini tidak membahas efek eksternal seperti strain, tekanan, suhu, maupun sifat optik, mekanik, dan aplikasi perangkat.

