BAB I
PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Matahari adalah sumber energi terbesar dan energi yang paling berlimpah di tata surya (Peter, 2011). Saat ini para peneliti sedang mencari material sel surya dengan efisiensi tertinggi untuk diproduksi dalam skala besar untuk menghasilkan listrik berskala Terra-Watt (Isyaku, 2019). Oleh karena itu, peneliti mencari material sel surya yang sangat berlimpah di Bumi (Alharbi dkk., 2011).

Sampai saat ini, material *photovoltaic (PV) absorber* yang sudah diketahui dan dipelajari dengan baik adalah silikon. Silikon adalah material yang sangat berlimpah di Bumi, dapat ditemukan pada pasir di pantai. Namun, silikon ini memiliki banyak kekurangan, antara lain silikon memiliki celah pita energi tidak langsung (*indirect bandgap*), sehingga silikon kurang optimal, *optical absorption*-nya kecil, maka diperlukan *wafer* yang cukup tebal untuk dapat menyerap sinar matahari dengan optimal (Mitzi dkk., 2011). Karena tebalnya *wafer* ini, maka diperlukan panjang difusi pembawa muatan minoritas dan waktu hidup untuk *carrier extraction* yang cukup panjang. Sebagai akibatnya, material mentahnya harus memiliki tingkat ketidakmurnian yang rendah dan harus diproduksi secara hati-hati agar dapat meminimalkan cacat yang dapat menambah rekombinasi (Isyaku, 2019). Dari sini dapat disimpulkan bahwa diperlukan banyak energi untuk memproduksi sel surya berbahan dasar Silikon, sehingga fabrikasinya membutuhkan biaya yang tinggi.

Berdasarkan pemaparan di atas, maka dari itu peneliti harus mencari material *PV absorber* pengganti silikon yang berlimpah di Bumi, memiliki celah pita langsung, dan materialnya dapat diproduksi dengan biaya rendah. Salah satu material yang kini dipercaya dapat menggantikan silikon adalah Cu_2ZnSnS_4

Jessie Manopo, 2021

ANALISIS PENGARUH DEFEK Cu_{Zn}+Zn_{Cu} PADA KRISTAL Cu_2ZnSnS_4 SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

(CZTS). Material ini memiliki celah pita langsung dan *optical absorption* yang tinggi (Kumar & Persson, 2012).

Diketahui bahwa hal yang menentukan sifat material adalah strukturnya. Dalam fabrikasi material CZTS tentu dapat terjadi ketidaksesuaian dengan struktur CZTS ideal. Berdasarkan eksperimen, sampai saat ini teramati ada dua struktur CZTS yang mungkin ada, yaitu *kesterite* dan *stannite*, namun struktur stabilnya adalah *kesterite*. Berdasarkan perhitungan secara teoritis menggunakan Teori Fungsi Kerapatan (*Density Functional Theory*) diperoleh bahwa struktur dan orientasi kristal sangat memengaruhi propertinya. Studi terbaru mengungkapkan bahwa energi total *kesterite* dan *stannite* hanya berbeda sekitar 3 meV per atom (Walsh dkk., 2012). Maka dari itu bisa saja strukturnya merupakan campuran antara *kesterite* dan *stannite*. Salah satu penyimpangan pada struktur CZTS adalah terbentuknya fase sekunder seperti ZnS, CuS, SnS, Cu_2SnS_3. Pada CZTS, tentu saja, juga dapat terbentuk defek (*defect*), contohnya adalah ketidakteraturan pada susunan atom-atomnya. Eksperimen sejauh ini menunjukkan bahwa sel surya berbahan dasar utama CZTS dengan efisiensi di atas 8% dapat diperoleh dengan rasio Cu/(Zn+Sn) sekitar 0.8 dan Zn/Sn sekitar 1.2, atau biasa disebut sebagai kondisi *Cu-poor* dan *Zn-rich* (Xiao dkk., 2015). Pada kondisi ini, defek yang paling mudah terbentuk adalah vakansi Cu (V_{Cu}), dan Zn menggantikan Cu (Zn_{Cu}) (Schorr dkk., 2019). Sedangkan defek kompleks yang paling mudah terbentuk dalam kondisi ini adalah Zn_{Cu} + Cu_{Zn} (Walsh dkk., 2012). Berdasarkan eksperimen difraksi neutron, (Schorr dkk., 2007) menemukan bahwa struktur *kesterite* yang sebagian acak juga ditemukan, yaitu posisi atom pada lapisan Cu/Zn (001) tersusun secara acak, sedangkan susunan atom pada lapisan Cu/Sn (001) tetap berada pada posisi aslinya, defek ini disebut sebagai defek *antisite*. Hal ini disebabkan karena ukuran dan sifat kimia atom Cu dan Sn sangat berbeda, sehingga ketidakteraturan yang mungkin terjadi adalah *disorder* antara Cu dan Zn.

Defek pada sel surya dapat meningkatkan performa sel surya, contohnya pada CIGS, defek pada CIGS dapat meningkatkan efisiensi (Walsh dkk., 2012).

Defek dapat meningkatkan konduktivitas karena defek dapat menentukan konsentrasi lubang (*hole*) dan elektron setimbang. Selain itu, defek juga dapat bersifat merugikan, defek dengan tingkat akseptor/tingkat donor yang mendalam dapat berperan sebagai pusat rekombinasi (Walsh dkk., 2012).

Karena defek memegang peranan penting pada performa sel surya, maka pada penelitian ini, peneliti menganalisis pengaruh defek terhadap sifat-sifat listriknya. Pada penelitian ini difokuskan pada defek yang tetap mempertahankan stoikiometrik CZTS, yaitu Zn_{Cu} + Cu_{Zn}, karena seperti dijelaskan sebelumnya, defek ini merupakan defek kompleks yang paling mudah terbentuk pada kondisi terbaik eksperimental (Walsh dkk., 2012). Rasio jumlah masing-masing atom dibuat tetap, namun pada penelitian ini dilihat bagaimana efeknya jika posisi atom Cu dan Zn masing-masing ditukar. Pada penelitian ini diteliti bagaimana pengaruh defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} terhadap sifat-sifat listrik CZTS.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan hal-hal yang dijelaskan pada latar belakang, maka peneliti merumuskan masalah sebagai berikut, “Bagaimana pengaruh defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada struktur, sifat elektronik dan sifat optik material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis?”

Sehingga pertanyaan penelitiannya adalah sebagai berikut.

1. Bagaimana pengaruh defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada struktur material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis?
2. Bagaimana energi formasi defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis?
3. Bagaimana pengaruh defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada sifat elektronik dan sifat optik material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Menganalisis pengaruh defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada struktur material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis.
2. Menganalisis energi formasi defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis.
3. Menganalisis pengaruh defek *antisite* Zn_{Cu} + Cu_{Zn} pada sifat elektronik dan sifat optik material Cu_2ZnSnS_4 sebagai material sel surya lapisan tipis.

1.4 Manfaat Penelitian

Penulis mengharapkan penelitian ini memberikan manfaat yaitu mengisi celah penelitian sebelumnya. Jika defek *antisite* dapat meningkatkan performa CZTS, penulis berharap agar peneliti yang lain dapat memanfaatkan properti ini.

1.5 Struktur Organisasi Skripsi

Skripsi ini disusun dalam lima bab, yaitu Pendahuluan, Kajian Pustaka, Metodologi Penelitian, Hasil dan Pembahasan serta Kesimpulan. Rinciannya sebagai berikut:

Bab I Pendahuluan berisi latar belakang, rumusan masalah, tujuan, manfaat penelitian dan struktur organisasi skripsi. Bab II Kajian Pustaka berisi struktur CZTS, sistem kuantum, pendekatan Born-Oppenheimer, Teori Fungsi Kerapatan, formalisme Hartree-Fock, skema Kohn-Sham, fungsi korelasi pertukaran, set basis, potensial semu, dan metode *projector augmented-wave*, energi formasi defek, profil rapat arus pada sel surya, *spectroscopic limited maximum efficiency* (SLME), dan sifat optik material. Bab III Metodologi Penelitian berisi keterangan mengenai waktu dan tempat penelitian, desain penelitian, diagram alir penelitian, tahapan komputasi, prosedur analisis data, dan jadwal penelitian. Bab IV Hasil dan Pembahasan berisi pembahasan dan analisis data perubahan sifat struktural CZTS akibat adanya defek, energi formasi defek, dan perubahan sifat listrik CZTS akibat adanya defek. Bab V Kesimpulan berisi kesimpulan hasil-hasil dari analisis data hasil komputasi.