

Penemuan Material Perovskit Halida Hibrida Organik-Anorganik Menggunakan Metode Pembelajaran Mesin Dengan Conditional Variational Auto-Encoder Generator = Discovery of Hybrid Organic Inorganic Halide Perovskite Material Using Machine Learning With Conditional Variational Auto-encoder Generator

Fernanda Hartoyo, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920526093&lokasi=lokal>

Abstrak

Perovskit sebagai basis sel surya memiliki efisiensi konversi daya besar. Akan tetapi pengembangan perovskit menghadapi kendala seperti ketidakstabilan, toksisitas timbal, dan stress akibat pemanasan sinar UV. Penelitian ini menggunakan metode komputasi untuk mencari kombinasi komposisi perovskit yang optimal dengan menggunakan metode conditional variational auto-encoder (CVAE). Perancangan program dilakukan dengan menggunakan set data yang berasal dari database hasil perhitungan DFT untuk dapat mengonstruksikan program generator material baru. Arsitektur program generator material baru ini terdiri dari model prediktor, model generator. Model generator dirancang untuk dapat memberikan kandidat komposisi material yang sesuai sifat target yang dibutuhkan. Model generator dilakukan dengan menggunakan metode CVAE berbasis deep learning. Model generator dengan metode CVAE berbasis deep learning didapatkan hasil pelatihan model enkoder dalam memetakan vektor komposisi sebesar 100% dengan nilai kerugian sebesar 31,8. Performa masing-masing model prediktor ditunjukkan dengan nilai skor R2 untuk celah pita, volume per atom, energi atomisasi, dan densitas material sebesar [0,90;0,99;0,97;0,96]. Program berhasil memprediksi 41 material baru dari hasil generasi 4 sifat target utama. Hasil prediksi menunjukkan bahwa program generator material yang dikembangkan pada penelitian ini dapat digunakan untuk menemukan kandidat komposisi perovskit halida hibrida organik-anorganik yang sesuai untuk aplikasi sel surya.

.....Perovskite, as a base for solar cells, is the ability to perform high power conversion efficiency. However, the development of perovskite encounters several challenges, including instability, lead toxicity, and stress to UV light. This study employs computational methods to identify the optimal combination of perovskite compositions using conditional variational auto-encoders (CVAE). The program's design uses a dataset from the DFT calculation results database that has previously constructed a new material generator program. The new material generator program architecture consists of predictor and generator. The generator model provides candidate material compositions that match the required target properties using the CVAE method based on deep learning. The generator model using the CVAE method based on deep learning obtained the results of training the encoder model in mapping the composition vector at 100% with a loss value of 31.8. The performance of each predictor model achieved an R2score for energy gap, volume per atom, atomization energy, and material density of [0.90; 0.99; 0.97; 0.96]. The program predicted 41 novel materials based on generating four main desired properties. The prediction results indicate that the material generator program developed in this study successfully offers recommendations for hybrid organic-inorganic perovskite halide composition candidates for solar cell.