

Pencarian Material Perovskit Halida Organik-Anorganik Hibrida Bebas Timbal Baru Menggunakan Conditional Variational Autoencoder Generator = The Discovery of Novel Lead-Free Organic-Inorganic Hybrid Halide Perovskite Materials using Conditional Variational Autoencoder Generator

Helya Chafshoh Nafisah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920544228&lokasi=lokal>

Abstrak

Kebutuhan material perovskite sebagai sel surya mengharuskan banyak penelitian dilakukan untuk mendapatkan energi celah pita yang dapat menghasilkan efisiensi tinggi. Penelitian ini bertujuan untuk menemukan material organik inorganic hybrid perovskites (OIHPs) baru bebas timbal dengan sifat target utama energi celah pita dan sifat identitas keberadaan material berupa volume per atom, energi atomisasi, dan densitas menggunakan metode conditional variational autoencoder (CVAE). Dataset yang dikonstruksi terdiri dari 192 molekul yang didapatkan dari database serta 23 data tambahan yang dihasilkan dari simulasi DFT. Pelatihan dataset dengan model prediktor ANN menghasilkan nilai R² 89% pada energi celah pita dan kurva pembelajaran yang baik. Pengambilan dan validasi data dilakukan dengan simulasi DFT menggunakan XC GGA-PW91 dan menghasilkan perbedaan antara 2% hingga 7%. Studi lebih lanjut dilakukan dengan mendeposisikan film tipis material hasil CVAE dengan metode spin coating berupa CH₃NH₃CaI₃ yang terdiri dari komponen organik garam methyllumonium iodida dan komponen anorganik Ca. Material ini mempunyai tipe energi celah pita tak langsung sebesar 3,409 eV dan memiliki error kurang dari 10% terhadap hasil model prediktor, generator, maupun simulasi DFT. Hasil ini menunjukkan potensi CH₃NH₃CaI₃ untuk diaplikasikan menjadi material optoelektronik.

.....High demand for perovskite materials as solar cells requires a lot of research to obtain band gap energy that can produce high efficiency. This research aims to find new lead-free organic inorganic hybrid perovskites (OIHPs) materials with the main target properties of band gap energy and the identity properties of material existence in the form of volume per atom, atomic energy, and density using the conditional variational autoencoder (CVAE) method. The constructed dataset consists of 192 molecules with properties retrieved from database as well as 23 additional data generated from DFT simulations. Training the dataset with the ANN predictor model resulted in an R² value of 89% in band gap energy and a good learning curve. Results comparison with DFT simulations using the XC GGA-PW91 yielded differences between 2% to 7%. Further studies were carried out by depositing thin films of CVAE material using spin coating method in the form of CH₃NH₃CaI₃ which consists of organic component methyllumonium iodide salt and inorganic component Ca. This material has an indirect band gap energy type of 3.409 eV and has an error of less than 10% against the results of predictor models, generators, and DFT simulations. These findings demonstrate the potential of CH₃NH₃CaI₃ for the application as an optoelectronic material, as suggested by the CVAE study and supported by DFT simulation.