Strategi doping pada Material Perovskite $CsPbI_3$ untuk Meningkatkan Efisiensi Sel Surya : Studi DFT, SCAPS-1D, dan Machine Learning

Riset PPMI KK Fisika dan Teknologi Material Maju 2026

Fitri Aulia Permatasari [1], Ferry Iskandar [1], Fatimah Arofiati Noor [1], Pipit Fitriani [1], Toto Winata [1], Pepen Arifin [1], Mikrajuddin Abdullah [1].

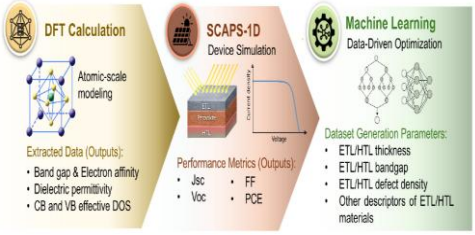
[1] KK Fisika dan Teknologi Material Maju Institut Teknologi Bandung

Pendahuluan

Sel surya berbasis perovskit berpotensi menjadi teknologi energi surya yang efisien berkat kemampuan penyerapan cahaya yang tinggi. Penelitian ini mengkaji penambahan mangan (Mn) pada material $CsPbI_3$ dengan menggabungkan perhitungan DFT, simulasi sel surya, dan machine learning untuk memahami pengaruh sifat material terhadap kinerja sel surya dan mengidentifikasi faktor penentu efisiensinya. Hasil penelitian ini diharapkan menjadi panduan untuk merancang sel surya yang lebih efisien.

Keyword: $CsPbI_3$, Doping Mn, Sel Surya Perovskit.

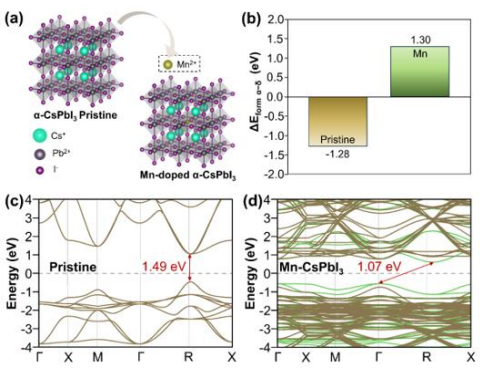
Metode



Perhitungan DFT digunakan untuk mempelajari kestabilan struktur dan sifat elektronik $CsPbI_3$. Hasilnya menjadi masukan untuk simulasi SCAPS-1D guna mengevaluasi kinerja sel surya, termasuk arus, tegangan, dan efisiensi. Selanjutnya, *machine learning* dan analisis SHAP digunakan untuk mengidentifikasi faktor-faktor yang paling memengaruhi kinerja sel surya.

Hasil penelitian

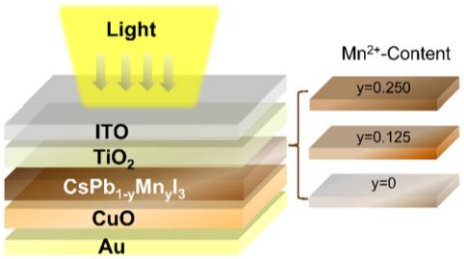
- Doping Mangan meningkatkan kestabilan $CsPbI_3$ dan menurunkan celah pita dari 1,49 menjadi 1,07 eV sehingga memperluas penyerapan cahaya material tersebut.



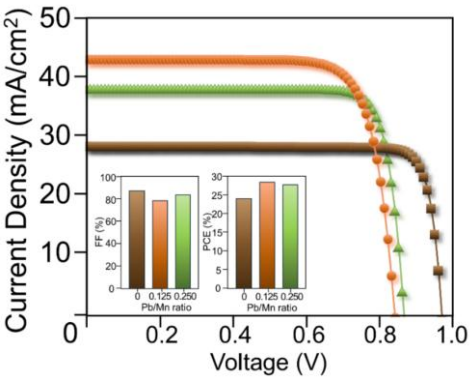
Gambar 1. Struktur kristal, kestabilan fase, dan struktur pita $CsPbI_3$

- Properti material yang didapat dari perhitungan DFT akan digunakan untuk mensimulasikan sebuah sel surya menggunakan SCAPS-1D

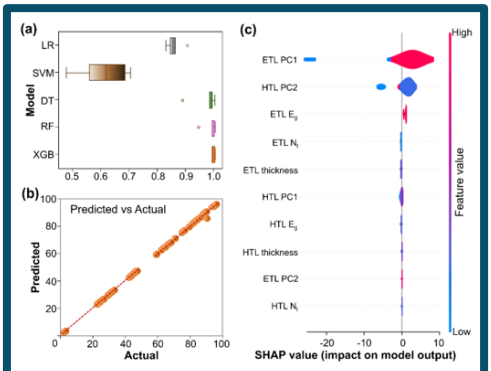
Simulai Sel Surya Berbasis SCAPS-1D



Performa Sel Surya



Gambar 2. Arsitektur sel surya $CsPb_{1-y}Mn_yI_3$ dan Performanya



Gambar 3. Analisis machine learning

- Analisis ML menunjukkan bahwa lapisan pengangkut elektron (ETL) merupakan bagian yang paling berpengaruh terhadap efisiensi sel surya.

Kesimpulan

- PCE meningkat ~1.18 kali lipat menjadi 28,30% pada doping Mn 12,5%.
- Penelitian ini dapat menjadi panduan untuk mengembangkan sel surya perovskit yang lebih efisien dan stabil.

Ucapan Terimakasih

Penelitian didukung oleh Riset PPMI KK Fisika dan Teknologi Material Maju 2026, Institut Teknologi Bandung

Luaran

Basmalah, M., Rinding, G. R. A., et al. 2026. Multiscale Insights into the Rational Design of Mn-Doped $CsPbI_3$ Solar Cells through DFT, SCAPS-1D, and Machine Learning. Materials Reports: Energy. (Under review)