

**ANALISIS PENGARUH DEFEK Cu_n+Zn_{Cu} PADA KRISTAL Cu₂ZnSnS₄
SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN
TEORI FUNGSI KERAPATAN**

SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Sains



Jessie Manopo

1700484

PROGRAM STUDI FISIKA

DEPARTEMEN PENDIDIKAN FISIKA

FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA

2021

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

Oleh
Jessie Manopo

Diajukan untuk memenuhi sebagian syarat dalam memperoleh gelar Sarjana Sains
Departemen Pendidikan Fisika Program Studi Fisika
Konsentrasi Fisika Material
FPMIPA UPI

© Jessie Manopo
Universitas Pendidikan Indonesia
Maret 2021

Hak cipta dilindungi Undang-Undang.
Skripsi ini tidak boleh diperbanyak seluruhnya atau sebagian, dengan dicetak
ulang, difotocopy atau cara lainnya tanpa izin dari penulis.

LEMBAR PENGESAHAN
JESSIE MANOPO

ANALISIS PENGARUH DEFEK Cu_{Zn}+Zn_{Cu} PADA KRISTAL Cu₂ZnSnS₄
SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN
TEORI FUNGSI KERAPATAN

disetujui dan disahkan oleh:

Pembimbing I



Dr. Endi Suhendi, M.Si.

NIP. 197905012003121001

Pembimbing II



Dr. Eka Cahya Prima, S.Pd., M.T.

NIP. 199006262014041001

Mengetahui,

Ketua Departemen Pendidikan Fisika



Dr. Taufik Ramlan Ramalis, M.Si

NIP. 195904011986011001

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “ANALISIS PENGARUH DEFEK $Cu_{Zn}+Zn_{Cu}$ PADA KRISTAL Cu_2ZnSnS_4 SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN” ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri. Saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika ilmu yang berlaku dalam masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung resiko/sanksi apabila di kemudian hari ditemukan adanya pelanggaran etika keilmuan atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya ini.

Bandung, Desember 2020

Yang membuat pernyataan

Jessie Manopo

NIM 1700484

KATA PENGANTAR

Segala puji syukur penulis ucapkan kepada Tuhan Yang Maha Esa, atas berkat dan rahmatnya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Analisis Pengaruh Defek Cu_{Zn}+Zn_{Cu} pada Kristal Cu₂ZnSnS₄ Sebagai Material Sel Surya Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan”.

Skripsi ini telah disusun untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains. Namun penulis juga menyadari bahwa tulisan ini masih jauh dari kata sempurna. Kritik dan saran sangat ditunggu oleh penulis. Semoga tulisan ini dapat bermanfaat bagi pembaca. Akhir kata, saya ucapkan terima kasih.

Bandung, Desember 2020

Jessie Manopo

NIM 1700484

UCAPAN TERIMA KASIH

Pada bagian ini, penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya pada seluruh pihak yang telah memberikan dukungan selama penulisan skripsi ini, yaitu:

1. Bapak Dr. Endi Suhendi, M.Si., selaku Dosen Pembimbing I dan Ketua Prodi Fisika yang telah memberikan semangat, bimbingan, motivasi dan fasilitas.
2. Bapak Dr. Eka Cahya Prima, S.Pd., M.T., selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan bimbingan, motivasi, dan saran selama penulis mengerjakan skripsi.
3. Bapak Ganes Shukri, Ph.D., selaku dosen Teknik Fisika Institut Teknologi Bandung yang telah memberikan banyak masukan, bimbingan, dan saran selama penulis melakukan komputasi di ITB.
4. Ibu Dr. Selly Feranie, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik penulis.
5. Bapak Dr. Taufik Ramlan Ramalis, M.Si., selaku Ketua Departemen Fisika FPMIPA UPI.
6. Kedua orangtua penulis yang senantiasa memberikan dukungan.
7. Michael Yoshua dan Kevin Octavian selaku teman tim riset yang telah memberikan arahan dan menjadi teman diskusi selama melakukan komputasi.
8. Teman-teman tim riset sel surya, khususnya Anggi Datiatur Rahmat yang telah memberikan gambaran mengenai CZTS dari segi eksperimental.

v

Jessie Manopo, 2021

ANALISIS PENGARUH DEFEK Cu_{Zn}+Zn_{Cu} PADA KRISTAL Cu₂ZnSnS₄ SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

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

9. Adik-adik penulis yang selalu memotivasi penulis selama mengerjakan skripsi.
10. Nagia, serta teman-teman penulis yang selalu memberikan dukungan pada penulis selama menyelesaikan skripsi ini.
11. Seluruh pihak yang telah memberikan motivasi dan semangat pada penulis.

ABSTRAK

$\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) biasa digunakan sebagai lapisan *absorber* pada sel surya lapisan tipis. Dalam fabrikasi CZTS, sampai saat ini, diperoleh bahwa rasio $\text{Cu}/(\text{Zn}+\text{Sn})$ dan Zn/Sn yang optimum sekitar 0.8 dan 1.2. Pada kondisi ini defek kompleks yang paling mudah terbentuk adalah $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$. Pada penelitian ini dianalisis pengaruh defek kompleks $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ terhadap sifat optik dan sifat listrik CZTS menggunakan teori fungsi kerapatan. Berdasarkan penelitian ini diperoleh bahwa adanya defek $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ dapat dan rapat arus hubung singkat (J_{sc}) sekitar 6-19% serta sedikit memperkecil celah pita energi. Akan tetapi, defek ini menyebabkan *deficit* tegangan rangkaian terbuka (V_{oc}) sebesar 2-16%. Namun demikian, defek $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ dapat meningkatkan efisiensi sel surya sekitar 1% dibandingkan dengan menggunakan CZTS murni. Hal ini terkait dengan mengecilnya massa efektif pembawa muatan pada CZTS ketika terdapat defek ini. Oleh karena itu, dapat disimpulkan bahwa salah satu penyebab optimumnya rasio $\text{Cu}/(\text{Sn}+\text{Zn})=0.8$ dan $\text{Zn}/\text{Sn}=1.2$, adalah akibat adanya defek ini.

Kata kunci: czts, sel surya, teori fungsi kerapatan

ABSTRACT

$\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) is commonly used as an *absorber* layer in thin film solar cells. In CZTS fabrication, to date, it has been found that the optimum Cu / (Zn + Sn) and Zn / Sn ratios are around 0.8 and 1.2. In this condition, the easiest defect complexes to form is $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$. In this study, the effect of the $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$ defect complexes on the optical and electrical properties of CZTS was studied using density function theory. Based on this research, it was found that the $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$ defect can increase the short circuit current density (J_{sc}) by about 6-19% and slightly reduce the band gap. However, this defect causes an open circuit voltage deficit (V_{oc}) of 2-16%. However, the $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$ defect could increase solar cell efficiency by about 1% compared to using pure CZTS. This is related to the reduced charge carrier effective mass of the CZTS when this defect is present. Therefore, it can be concluded that this defect is one of the reasons for the optimum ratio of Cu / (Sn + Zn) is 0.8 and Zn / Sn is 1.2.

Keywords: czts, density functional theory solar cell

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN.....	iii
KATA PENGANTAR	iv
UCAPAN TERIMA KASIH.....	v
ABSTRAK	vii
ABSTRACT	viii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Manfaat Penelitian.....	4
1.5 Struktur Organisasi Skripsi	4
BAB II KAJIAN PUSTAKA	5
2.1 Struktur kristal CZTS	5
2.2 Sistem Kuantum	6
2.3 Pendekatan Born-Oppenheimer	7
2.4 Teori Fungsi Kerapatan	8
2.4.1 Teorema Hohenberg-Kohn.....	9
2.4.2 Model Thomas-Fermi.....	10
2.5 Metode Penyelesaian Persamaan Schrödinger berbasis Fungsi Gelombang: Formalisme Hartree-Fock.....	11

2.6	Skema Kohn-Sham.....	13
2.7	Fungsi Korelasi-Pertukaran.....	15
2.7.1	Local Density Approximation (LDA).....	15
2.7.2	Generalized-Gradient Approximation (GGA)	16
2.7.3	GGA+U	16
2.7.4	meta-GGA	17
2.7.5	Fungsi korelasi pertukaran <i>hybrid</i>	17
2.8	Set Basis	18
2.8.1	Set Basis Gelombang Datar	18
2.9	Potensial semu	19
2.10	Metode Projector Augmented-Wave (PAW).....	19
2.11	Energi Formasi Defek	21
2.12	Profil Rapat Arus pada Sel Surya Persambungan p-n	22
2.13	Spectroscopic Limited Maximum Efficiency (SLME).....	23
2.14	Sifat Optik Material	23
	BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	26
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	26
3.2	Desain Penelitian	26
3.3	Diagram Alir Penelitian.....	26
3.4	Tahapan Komputasi	28
3.4.1	Menyiapkan struktur <i>kesterite CZTS</i>	28
3.4.2	Optimasi Parameter Komputasi	33
3.4.3	Kalkulasi Medan Swapanggah.....	36
3.4.4	Kalkulasi Properti Elektronik CZTS	37
3.4.5	Kalkulasi Properti Optik CZTS.....	37
3.5	Prosedur Analisis Data	38
3.5.1	Analisis Sifat Struktural CZTS	38
3.5.2	Analisis Data Kerapatan Keadaan CZTS	38

3.5.3	Analisis Data Struktur Pita CZTS	38
3.5.4	Analisis Sifat Optik	39
3.5.5	Analisis Spectroscopic Limited Maximum Efficiency (SLME)	40
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		41
4.1	Perubahan Sifat Struktural CZTS akibat Adanya Defek	41
4.2	Energi Formasi Defek	43
4.3	Perubahan Sifat Listrik dan Sifat Optik CZTS akibat Adanya Defek....	45
BAB V SIMPULAN DAN SARAN		56
5.1	Simpulan.....	56
5.2	Saran	56
DAFTAR PUSTAKA		57
LAMPIRAN		65

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Potensial kimia dalam (eV) untuk atom Cu, Zn, Sn ketika kestabilan CZTS terjadi.....	21
Tabel 3.1 Daftar kemungkinan defek $Cu_{Zn}+Zn_{Cu}$ jika hanya satu pasang atom yang ditukar	31
Tabel 3.2 Seluruh kemungkinan defek $Cu_{Zn}+Zn_{Cu}$ jika dua pasang atom ditukar	32
Tabel 4.1 konstanta kisi dan energi formasi yang diperoleh dari hasil relaksasi struktur	41
Tabel 4.2 Energi formasi defek dengan jumlah atom S yang memiliki ikatan $l_{Cu_mZn_nS_n}$	43
Tabel 4.3 Cela pita energi dengan defek $Cu_{Zn}+Zn_{Cu}$	46
Tabel 4.4 Prediksi Voc, Jsc, Efisiensi, dan perhitungan massa efektif pembawa muatan	48

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Konsep mutasi kation pada semikonduktor multikomponen	5
Gambar 2.2 Kemungkinan struktur semikonduktor multi-komponen	6
Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian	28
Gambar 3.2 Struktur <i>Kesterite CZTS</i>	28
Gambar 3.3 Keterangan nama atom.....	29
Gambar 3.4 Posisi Wyckoff atom Cu dan Zn pada <i>kesterite CZTS</i>	29
Gambar 3.5 Cu _{Zn} (2b)+Zn _{Cu} (2a)	31
Gambar 3.6 Cu _{Zn} (2b*)+Zn _{Cu} (2a)	31
Gambar 3.7 Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2a*).....	31
Gambar 3.8 Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (2a*).....	31
Gambar 3.9 Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2c).....	31
Gambar 3.10 Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (2c).....	31
Gambar 3.11 Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (4e).....	31
Gambar 3.12 Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (4e).....	31
Gambar 3.13 [Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2a)] + [Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (2a*)].....	32
Gambar 3.14 [Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2a)] + [Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (2c)]	32
Gambar 3.15 [Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2a)] + [Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (4e)]	32
Gambar 3.16 [Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2c)] + [Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (2a*)]	32
Gambar 3.17 [Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (4e)] + [Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (2a*)].....	32
Gambar 3.18 [Cu _{Zn} (2b) +Zn _{Cu} (2c)] + [Cu _{Zn} (2b*) +Zn _{Cu} (4e)].....	32
Gambar 3.19 Ilustrasi daerah Brillouin pertama dan <i>K-point mesh</i>	34

Gambar 3.20 Grafik energi total sistem terhadap energi potong	34
Gambar 3.21 Grafik energi total sistem terhadap besar <i>k-point mesh</i>	36
Gambar 4.1 Posisi Wyckoff atom Cu dan Zn pada <i>kesterite</i> CZTS	42
Gambar 4.2 Rapat keadaan seluruh orbital elektron pada CZTS murni, garis putus-putus menunjukkan tingkat energi Fermi.....	47
Gambar 4.3 Rapat keadaan seluruh orbital elektron pada CZTS dengan defek Cu _{Zn} (2b)+Zn _{Cu} (2a), garis putus-putus menunjukkan tingkat energi Fermi.	47
Gambar 4.4 Grafik penyerapan terhadap panjang gelombang.....	50
Gambar 4.5 Perbandingan koefisien absorpsi dengan berbagai referensi.....	51
Gambar 4.6 Grafik absobansi terhadap panjang gelombang untuk CZTS murni jika dikalkulasi menggunakan energi potong sebesar 200eV	52
Gambar 4.7 Kurva J-V dari kelima struktur yang dianalisis pada temperatur 20 ⁰ C dan ketebalan 1 μ m	53
Gambar 4.8 Struktur pita CZTS murni	54
Gambar 4.9 Struktur pita CZTS dengan defek Cu _{Zn} (2b)+Zn _{Cu} (2a)	54

DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN 1. INCAR untuk relaksasi struktur	65
LAMPIRAN 2. INCAR untuk kalkulasi self-consistent field	66
LAMPIRAN 3. INCAR untuk kalkulasi kerapatan keadaan	67
LAMPIRAN 4. INCAR untuk kalkulasi tensor dielektrik.....	68
LAMPIRAN 5. KPOINTS yang digunakan untuk seluruh kalkulasi	69
LAMPIRAN 6. Kode Python yang digunakan untuk menghitung penyerapan dari tensor dielektrik.....	70
LAMPIRAN 7. Kode Python yang digunakan untuk menghitung J_{sc} dan V_{oc} menggunakan SLME.....	71
LAMPIRAN 8. Kode Python yang digunakan untuk merajah kurva kerapatan keadaan.....	74
LAMPIRAN 9. Kode Python yang digunakan untuk merajah kurva struktur pita	79
LAMPIRAN 10. Kurva kerapatan keadaan untuk CZTS dengan defek $Cu_{Zn}(2b^*)+Zn_{Cu}(2a^*)$, garis putus-putus menunjukkan tingkat energi fermi	81
LAMPIRAN 11. Kurva kerapatan keadaan untuk CZTS dengan defek $[Cu_{Zn}(2b) + Zn_{Cu}(2a)] + [Cu_{Zn}(2b^*) + Zn_{Cu}(2a^*)]$, garis putus-putus menunjukkan tingkat energi Fermi	82
LAMPIRAN 12. Kurva kerapatan keadaan untuk CZTS dengan defek $[Cu_{Zn}(2b) + Zn_{Cu}(2c)] + [Cu_{Zn}(2b^*) + Zn_{Cu}(4e)]$, garis putus-putus menunjukkan tingkat energi Fermi	83
LAMPIRAN 13. Kurva struktur pita untuk CZTS dengan defek $Cu_{Zn}(2b^*)+Zn_{Cu}(2a^*)$	84
LAMPIRAN 14. Kurva struktur pita untuk CZTS dengan defek $[Cu_{Zn}(2b) + Zn_{Cu}(2a)] + [Cu_{Zn}(2b^*) + Zn_{Cu}(2a^*)]$	85
LAMPIRAN 15. Kurva struktur pita untuk CZTS dengan defek $[Cu_{Zn}(2b) + Zn_{Cu}(2c)] + [Cu_{Zn}(2b^*) + Zn_{Cu}(4e)]$	86