

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

BAB III METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dengan komputasi dilakukan pada September-Oktober 2020. Komputasi dilakukan menggunakan *High Performance Computer* (HPC) milik Pusat Penelitian Nanosains dan Nanoteknologi (PPNN), Institut Teknologi Bandung yang terletak pada Gedung Center for Advance Sciences, Lt. 1-3 Jl. Ganesha no. 10 Bandung. Penelitian dilakukan di rumah pribadi penulis dan memanfaatkan *remote server* dari komputer HPC PPNN ITB.

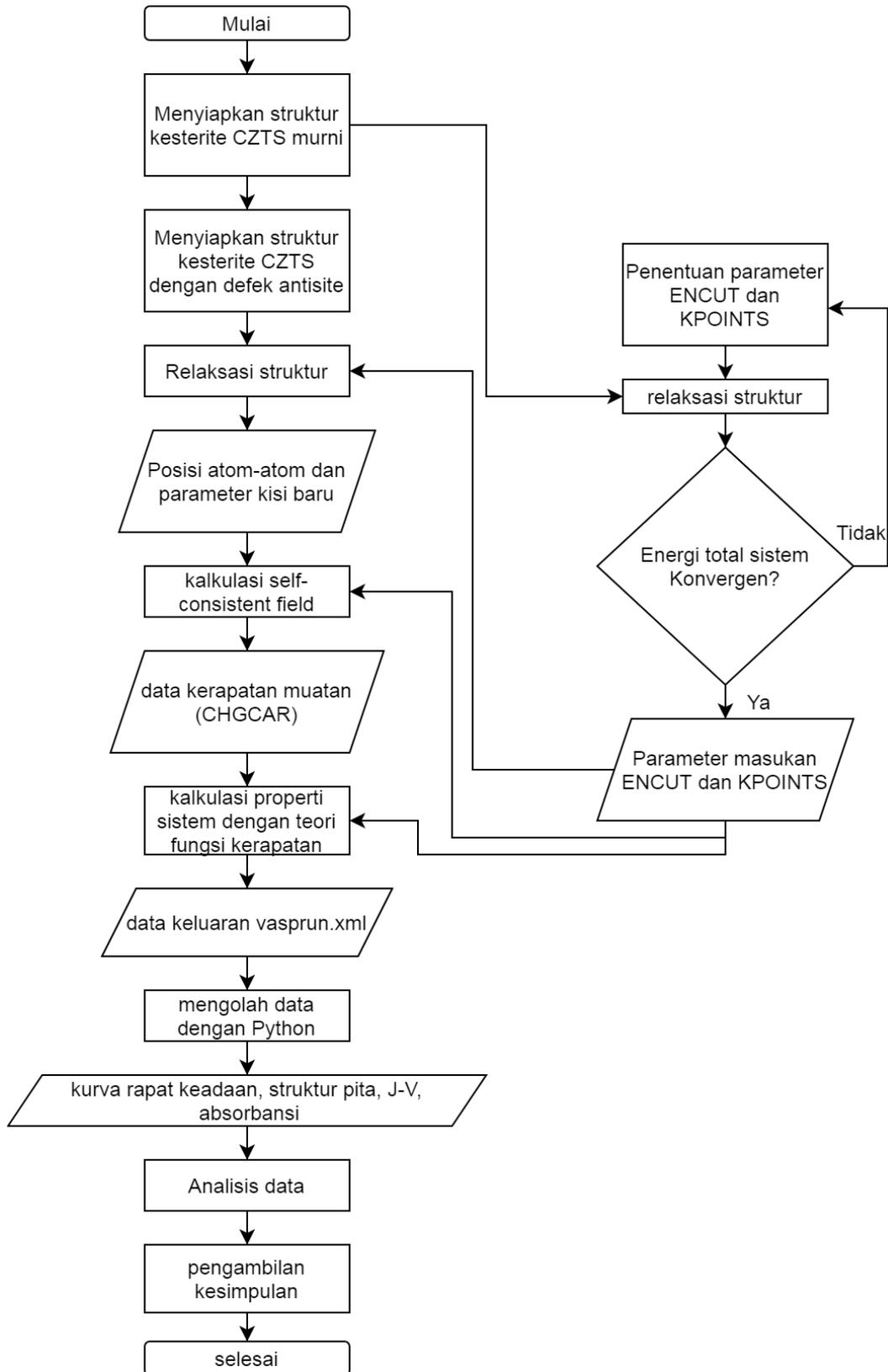
3.2 Desain Penelitian

Penelitian dilakukan dengan metode kuantitatif yaitu menggunakan komputasi. Menyiapkan struktur *kesterite* CZTS dengan VESTA. Kalkulasi properti elektronik dengan teori fungsi kerapatan menggunakan *Vienna ab-initio simulation package* (VASP).

Dalam perhitungannya, digunakan metode *projector augmented wave* (PAW) yang diimplementasikan pada kode VASP. Metode ini merupakan kombinasi metode dari penggunaan gelombang datar (*plane wave*), potensial semu, dan metode *linear augmented wave* (Blöchl, 1994). Fungsi korelasi pertukaran yang digunakan untuk relaksasi struktur pada komputasi ini adalah *Generalized Gradient Approximation* (GGA) yang dikembangkan oleh Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Fungsi korelasi pertukaran yang digunakan untuk kalkulasi rapat keadaan adalah *hybrid functional* HSE-06. Fungsi korelasi pertukaran yang digunakan untuk kalkulasi struktur pita dan sifat optik adalah PBE+U.

3.3 Diagram Alir Penelitian

Diagram alir untuk penelitian ini ditunjukkan pada Gambar 3.1.



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

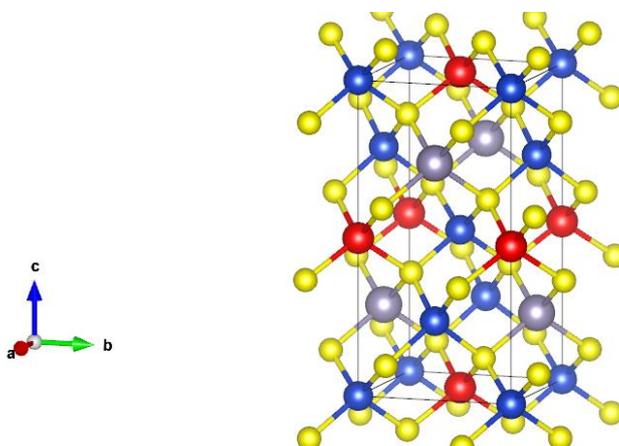
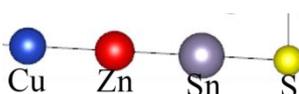
Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

3.4 Tahapan Komputasi

Tahapan komputasi secara garis besar terdiri dari dua tahap, yaitu menyiapkan struktur *kesterite* CZTS dan kalkulasi properti sistem. Namun, sebelum melakukan kalkulasi properti sistem, ada dua tahap yang perlu dilewati, yaitu optimasi parameter komputasi dan kalkulasi medan swapangah (*self consistent field*).

3.4.1 Menyiapkan struktur *kesterite* CZTS

Kristalografi CZTS dapat didapatkan dari internet, biasanya berupa berkas yang memiliki ekstensi (.cif). Struktur kristal CZTS dapat dilihat menggunakan perangkat lunak VESTA. Namun, posisi-posisi atom tersebut belum tentu benar, harus memastikan agar benar dan ikatan-ikatannya sesuai. Untuk memastikan agar posisi-posisi atom ini benar dan ikatan-ikatannya sesuai, dapat dibandingkan dengan posisi-posisi atom dan ikatan yang ada pada literatur. Gambar 3.1 menunjukkan struktur CZTS *kesterite* yang sesungguhnya, beserta keterangan nama-nama atom yang bersesuaian pada Gambar 3.2.

Gambar 3.2 Struktur *Kesterite* CZTS

Jessie Manopo, 2021

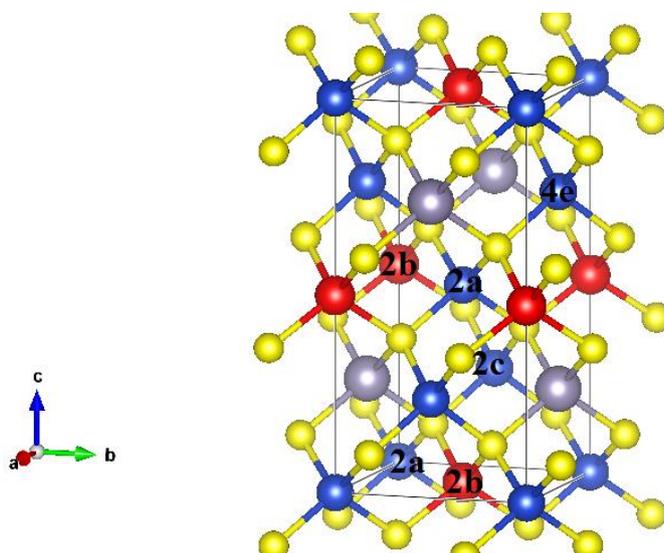
ANALISIS PENGARUH DEFEK $Cu_{Zn}+Zn_{Cu}$ PADA KRISTAL Cu_2ZnSnS_4 SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

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

Gambar 3.3 Keterangan nama atom

Setelah struktur *kesterite* CZTS diperoleh dengan baik, kemudian membuat struktur CZTS dengan defek, yaitu menukar sebagian atom Cu dengan Zn.

Posisi-posisi atom pada suatu kristal biasanya dinyatakan dalam posisi Wyckoff. Struktur *kesterite* CZTS dikategorikan dalam *space group* $I\bar{4}$ (Walsh dkk., 2012). Posisi Wyckoff untuk atom Cu dan Zn pada unit sel kristal CZTS dengan *space group* $I\bar{4}$ ditunjukkan pada Gambar 3.4. Karena ada dua atom Cu yang berada pada posisi Wyckoff yang sama yaitu (2a), maka atom Cu yang ada di tengah unit sel dituliskan dengan notasi (2a*). Selain itu, atom Zn juga sama, yaitu (2b), maka atom Zn yang ada di tengah unit sel itu dituliskan sebagai (2b*).



Gambar 3.4 Posisi Wyckoff atom Cu dan Zn pada *kesterite* CZTS

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

Tabel 3.1 menunjukkan seluruh kemungkinan defek $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$ yang ada jika hanya satu pasang atom yang ditukar. Tabel 3.2 menunjukkan seluruh kemungkinan defek $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$ yang ada jika dua pasang atom yang ditukar.

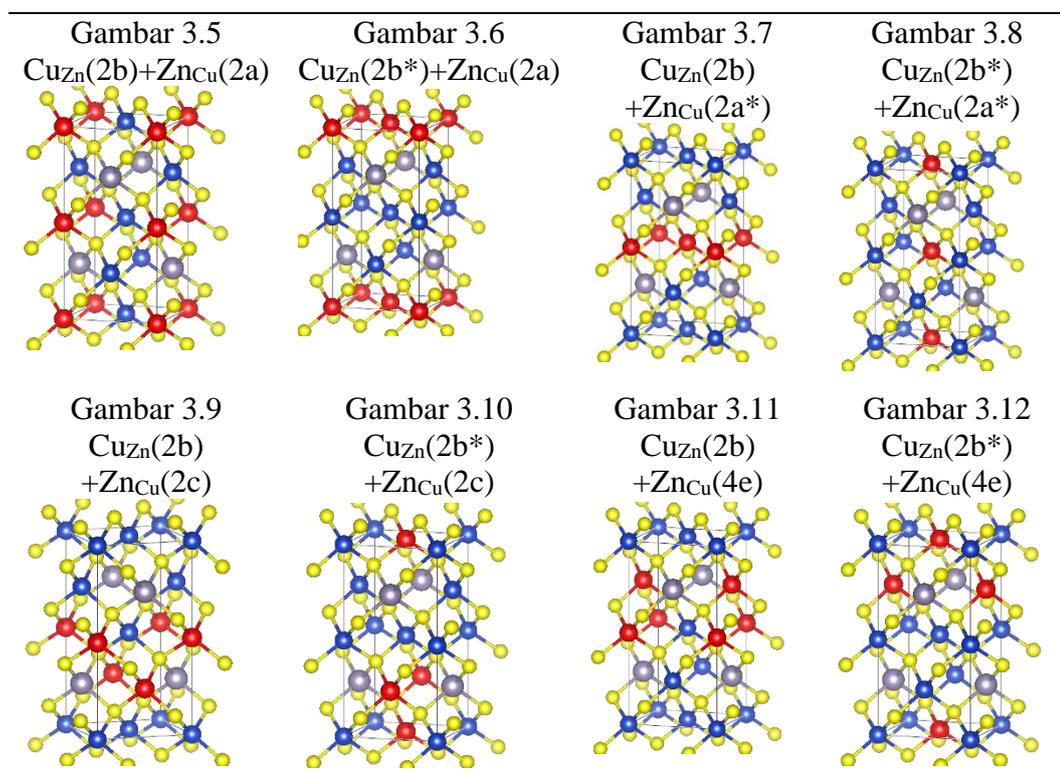
Karena atom-atom telah ditukarkan, maka pastilah posisi-posisi atom pada keadaan optimum ini tidak sama dengan posisi-posisi atom sebelumnya. Posisi-posisi atom ini dapat direlaksasi dengan optimasi energi pada teori fungsi kerapatan, sedemikian sehingga energi totalnya minimum. Algoritma yang digunakan untuk relaksasi struktur adalah *conjugate gradient algorithm*. Prosedur ini dapat dilakukan dengan menggunakan *Vienna ab-initio simulation package* (VASP).

Jessie Manopo, 2021

ANALISIS PENGARUH DEFEK $\text{Cu}_{\text{Zn}} + \text{Zn}_{\text{Cu}}$ PADA KRISTAL $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

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

Tabel 3.1 Daftar kemungkinan defek $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ jika hanya satu pasang atom yang ditukar



Untuk dapat melakukan hal ini, perlu disiapkan menyiapkan berkas masukan untuk VASP, yaitu POSCAR, POTCAR, KPOINTS, dan INCAR. Berkas POSCAR berisi informasi mengenai posisi atom-atom pada CZTS, ini bisa didapat dari VESTA. Berkas POTCAR berisi informasi mengenai potensial yang digunakan, dijelaskan pada bagian selanjutnya bahwa peneliti menggunakan metode potensial semu. Berkas ini diperoleh dari basis data pada VASP. Berkas INCAR berisi informasi mengenai pengaturan yang dibutuhkan dalam komputasi seperti jumlah langkah maksimum yang diambil, syarat konvergensi komputasi, algoritma yang digunakan, pengaturan presisi, dan lain-lain. Berkas KPOINTS berisi informasi mengenai pilihan besar *K-point mesh*. *K-point mesh* diperlukan untuk menyederhanakan kalkulasi, yaitu dengan mengganti integrasi terhadap ruang (tak-hingga) dengan integrasi terhadap daerah Brillouin (berhingga) pada ruang resiprok. Langkah ini dapat menyederhanakan kalkulasi sebab sifat-sifat

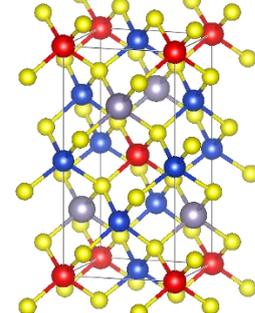
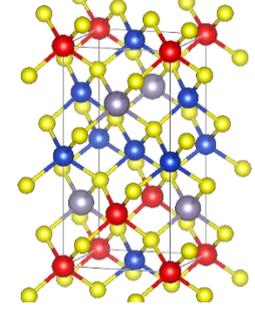
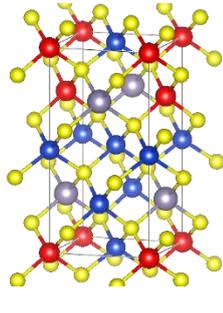
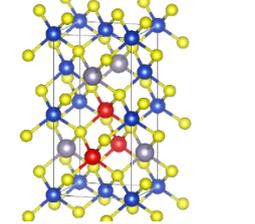
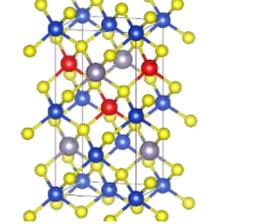
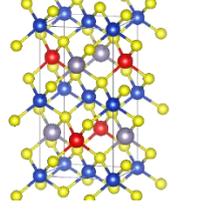
Jessie Manopo, 2021

ANALISIS PENGARUH DEFEK $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ PADA KRISTAL $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

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

material seperti energi memiliki simetri yang tinggi pada ruang resiprok, sehingga hanya perlu menghitung properti sistem berdasarkan beberapa titik pada ruang resiprok. Integral tersebut dilakukan dengan menjumlahkan fungsi pada integran pada beberapa titik pada daerah Brillouin, titik-titik tersebut disebut sebagai *k-point mesh*. Pada VASP, digunakan Monkhorst-Pack mesh.

Tabel 3.2 Seluruh kemungkinan defek $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ jika dua pasang atom ditukar

Gambar 3.13 [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b})$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{a})$] + [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b}^*)$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{a}^*)$]	Gambar 3.14 [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b})$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{a})$] + [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b}^*)$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{c})$]	Gambar 3.15 [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b})$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{a})$] + [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b}^*)$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(4\text{e})$]
		
Gambar 3.16 [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b})$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{c})$] + [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b}^*)$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{a}^*)$]	Gambar 3.17 [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b})$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(4\text{e})$] + [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b}^*)$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{a}^*)$]	Gambar 3.18 [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b})$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(2\text{c})$] + [$\text{Cu}_{\text{Zn}}(2\text{b}^*)$ + $\text{Zn}_{\text{Cu}}(4\text{e})$]
		

Setelah dilakukan relaksasi struktur, didapatkan energi total sistem yang paling minimum beserta posisi-posisi atom setelah relaksasi. Dari ke-14 struktur yang direlaksasi, dipilih empat struktur yang energinya paling minimum untuk kemudian dianalisis sifat-sifat listriknya.

Hasil keluaran komputasi terdiri dari banyak berkas. Namun, berkas yang penting dari hasil optimasi struktur hanyalah berkas CONTCAR. Di dalam berkas ini berisi posisi-posisi atom yang sudah dioptimasi. Hasil ini bisa dimasukkan ke dalam berkas POSCAR yang baru untuk kalkulasi properti elektronik.

Jessie Manopo, 2021

ANALISIS PENGARUH DEFEK $\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ PADA KRISTAL $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

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

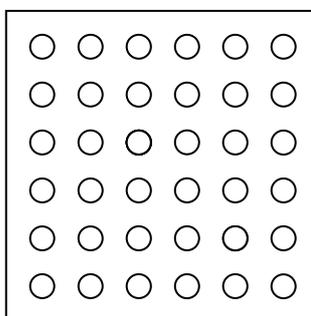
3.4.2 Optimasi Parameter Komputasi

Seperti dijelaskan pada bagian 2.8.1, parameter energi potong ini perlu dioptimasi. Hal ini dilakukan agar komputasi yang dilakukan dapat menjelaskan sistem dengan baik meskipun tidak menggunakan seluruh fungsi gelombang set basisnya. Optimasi ini dapat dilakukan dengan relaksasi struktur CZTS pada berbagai energi potong (ENCUT) dan diperoleh energi total sistem. Tinjau pada ENCUT berapakah energi total tersebut mulai konvergen menuju nilai tertentu, dan dapat menggunakan nilai ENCUT tersebut untuk kalkulasi selanjutnya.

Selain parameter energi potong, parameter yang perlu dioptimasi adalah *k-point mesh*. Penjelasan mengenai *k-point mesh* adalah sebagai berikut.

3.4.2.1 K-Points dan Daerah Brillouin

Persamaan seperti persamaan 2.5 perlu diselesaikan dengan mengintegrasikan suatu fungsi terhadap ruang yang besarnya tak-berhingga. Hal ini dapat disederhanakan dengan transformasi Fourier terhadap ruang resiprok (ruang \vec{k}). Karena kristal memiliki simetri yang sangat tinggi, integral terhadap ruang resiprok ini hanya perlu diselesaikan pada daerah Brillouin pertama saja. Secara numerik, integral terhadap ruang resiprok dapat diubah menjadi penjumlahan fungsi integran dikalikan dengan bobot integrasinya. Penjumlahan ini hanya dilakukan pada beberapa titik tertentu saja pada daerah Brillouin pertama. Pengambilan titik apa saja yang mau digunakan pada daerah Brillouin pertama disebut sebagai *k-points sampling/k-point mesh*. Daerah Brillouin pertama diilustrasikan pada Gambar 3.19.



Jessie Manopo, 2021

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

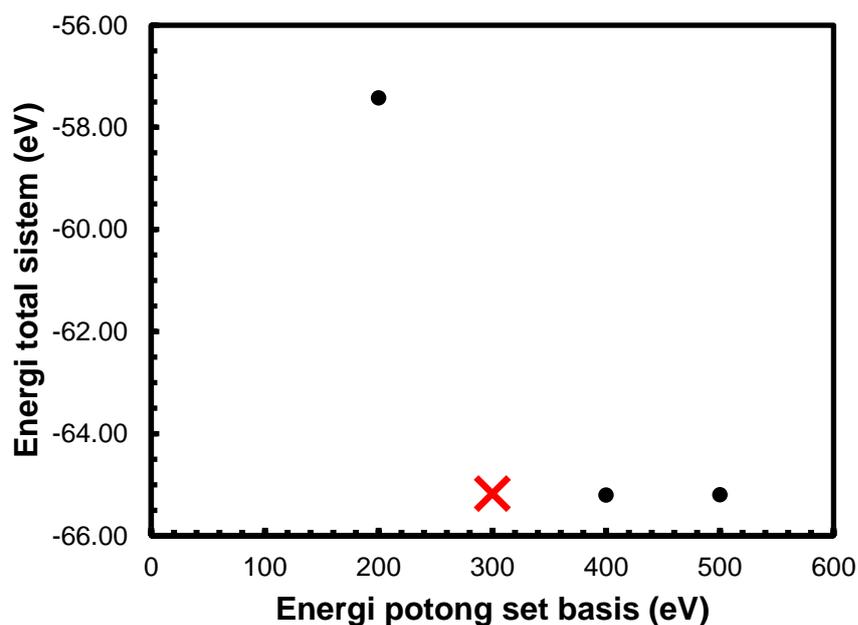
Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

Gambar 3.19 Ilustrasi daerah Brillouin pertama dan *K-point mesh*

Pada gambar tersebut juga diilustrasikan bahwa digunakan *k-point mesh* sebesar 6x6. Besar *k-point mesh* ini perlu dioptimasi agar hasil kalkulasi dapat menggambarkan sistem CZTS dengan baik. Caranya sama dengan optimasi besar energi potong.

3.4.2.2 Hasil Optimasi Parameter Komputasi

Optimasi parameter komputasi dilakukan menggunakan fungsi korelasi pertukaran GGA dalam bentuk PBE. Telah dibahas pada bagian 2.8.1 mengenai parameter energi potong (*cut-off*), parameter ini perlu dioptimasi agar komputasi menggunakan parameter ini dapat menggambarkan sistem dengan baik. Untuk struktur unit sel CZTS, dilakukan relaksasi struktur dengan variasi energi potong pada berkas masukan. Ketika selesai melakukan relaksasi struktur, maka diperoleh nilai energi total dari sistem CZTS.



Gambar 3.20 Grafik energi total sistem terhadap energi potong

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

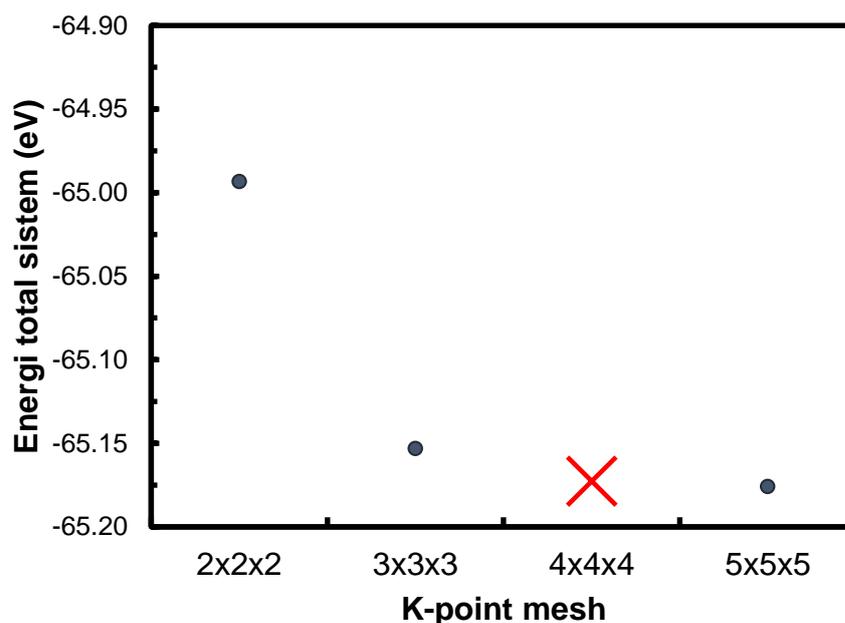
Pada Gambar 3.20, diperoleh bahwa jika dipilih energi potong sebesar 300eV atau lebih, dapat dilihat nilai energi total sistem cenderung sudah konvergen menuju nilai tertentu. Sebetulnya jika semakin besar energi potong yang digunakan, maka semakin banyak pula fungsi gelombang yang digunakan, sehingga semakin baik pula komputasi DFT dalam menggambarkan sistem. Namun, jika energi potong semakin besar, maka semakin berat pula kerja komputer. Maka dari itu, cukup diambil energi potong tertentu saja agar sistem dapat digambarkan dengan baik. Pada penelitian ini, untuk kalkulasi struktur elektronik digunakan energi potong sebesar 300eV.

Selain parameter energi potong, besar *k-point mesh* yang baik perlu dipilih agar dapat menggambarkan sistem dengan baik. Hal-hal mengenai *k-point mesh* sudah dijelaskan pada bagian 3.4.2.1. Pada Gambar 3.21, dapat dilihat bahwa jika dipilih besar *k-point mesh* sebesar 3x3x3, besar energi total sistem sudah mulai konvergen ke harga tertentu. Seperti pada bagian sebelumnya, jika dipilih *k-point mesh* yang lebih besar, maka semakin baik dalam menggambarkan sistem. Namun jika terlalu besar *k-point mesh*-nya, maka semakin berat pula kerja komputer. Maka dari itu cukup diambil *k-point mesh* tertentu saja. Pada penelitian ini, untuk kalkulasi sifat elektronik diambil besar *k-point mesh* sebesar 4x4x4.

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



Gambar 3.21 Grafik energi total sistem terhadap besar *k-point mesh*

3.4.3 Kalkulasi Medan Swapangah

Setelah optimisasi struktur, dilakukan kalkulasi medan swapangah (*self-consistent field* [SCF]). Pada kalkulasi ini, posisi-posisi atom dibiarkan tetap, tetapi pada setiap loop, derajat kebebasan elektron kembali dioptimasi, sehingga diperoleh informasi mengenai kerapatan muatan yang paling optimum. Pada kalkulasi ini, peneliti menggunakan berkas POSCAR yang diperoleh dari optimisasi struktur. Kemudian peneliti menggunakan POTCAR dan KPOINTS yang sama pada saat kalkulasi optimisasi struktur. Namun, berkas INCAR sedikit berbeda dari berkas INCAR yang digunakan untuk optimisasi struktur, yaitu dengan menetapkan agar posisi atom-atom tetap, dan menggunakan algoritma yang berbeda dibandingkan relaksasi struktur. Hasil keluaran komputasi ini juga terdiri dari banyak berkas, namun berkas yang penting hanyalah CHGCAR, yang berisi informasi mengenai kerapatan muatan. Berkas ini diperlukan untuk kalkulasi properti elektronik.

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

3.4.4 Kalkulasi Properti Elektronik CZTS

Kalkulasi properti elektronik CZTS seperti rapat keadaan, struktur pita dan lain-lain dicari menggunakan *Vienna ab-initio simulation package*.

3.4.4.1 Kalkulasi DFT untuk memperoleh Rapat Keadaan (*Density of State*)

Pada kalkulasi ini, peneliti menggunakan berkas POTCAR dan POSCAR yang sama dengan kalkulasi SCF. Pada kalkulasi ini, digunakan berkas CHGCAR yang merupakan keluaran dari kalkulasi SCF. Untuk berkas INCAR, peneliti menetapkan agar kalkulasi ini tidak dimulai dari awal, tetapi membaca berkas CHGCAR. Kemudian peneliti menetapkan agar hasil kalkulasi ini dapat mengeluarkan berkas DOSCAR dan PROCAR. Algoritma komputasi yang digunakan tepat sama dengan algoritma penyelesaian persamaan Kohn-Sham seperti dijelaskan pada bagian 2.6.

3.4.4.2 Kalkulasi DFT untuk memperoleh Struktur Pita

Pada kalkulasi ini, peneliti menggunakan POSCAR, POTCAR, CHGCAR, dan INCAR yang sama pada saat kalkulasi rapat keadaan. Untuk kalkulasi ini, peneliti wajib memilih k-path dengan simetri tinggi yang tepat. Karena seperti telah dijelaskan pada bagian sebelumnya, sering kali celah pita energi yang diperoleh dari kalkulasi rapat keadaan berbeda dari hasil kalkulasi struktur pita. Untuk memilih k-path yang tepat, peneliti bisa mendapatkan rekomendasi dari *package* pymatgen (Ong dkk., 2013) pada program aplikasi Python. Algoritma komputasi yang digunakan tepat sama dengan algoritma penyelesaian persamaan Kohn-Sham seperti dijelaskan pada bagian 2.6.

3.4.5 Kalkulasi Properti Optik CZTS

3.4.5.1 Kalkulasi DFT untuk Memperoleh Tensor Dielektrik

Pada kalkulasi ini, peneliti menggunakan INCAR yang berbeda. Pada kalkulasi ini, diambil jumlah pita sebesar 240 (pada kalkulasi lain, hanya 100). Digunakan `ALGO = Exact` (menghitung diagonalisasi dengan eksak) dan `LOPTICS = True` (menghitung tensor dielektrik). Karena keterbatasan komputer

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

yang digunakan, maka besar energi potong diubah menjadi 185eV dan hanya menggunakan fungsi korelasi pertukaran PBE+U, yaitu PBE dengan koreksi *on-site Coulomb interaction*. Parameter nilai U yang digunakan untuk orbital Cu-3d, Zn-3d, Sn-4d dalam kalkulasi ini masing-masing adalah 5.2, 6.5, dan 3.5eV (Huang & Persson, 2013). Sedangkan koreksi U untuk orbital atom-atom S tidak diperhitungkan. Pada kalkulasi ini, digunakan *database* potensial semu yang mengasumsikan elektron Cu pada orbital 3p dan Sn pada orbital 4d sebagai elektron valensi. Pada kalkulasi ini digunakan asumsi partikel independen dan digunakan *Random Phase Approximation*. Algoritma komputasi yang digunakan tepat sama dengan algoritma penyelesaian persamaan Kohn-Sham seperti dijelaskan pada bagian 2.6.

3.5 Prosedur Analisis Data

Keluaran hasil komputasi dari VASP (berupa berkas *vasprun.xml*) kemudian dirajah menggunakan program aplikasi Python. Dari hasil rajah ini dapat dianalisis sesuai teori-teori yang ada.

3.5.1 Analisis Sifat Struktural CZTS

Sifat struktural CZTS setelah relaksasi struktur diperoleh pada berkas *CONTCAR*, yaitu berisi konstanta kisi dan posisi atom setelah relaksasi struktur.

3.5.2 Analisis Data Kerapatan Keadaan CZTS

Keluaran hasil komputasi dari VASP (berupa berkas *vasprun.xml*) kemudian dirajah menggunakan program aplikasi Python. Pada penelitian ini digunakan *package* *pymatgen* untuk membaca hasil keluaran VASP. Data tersebut kemudian dirajah menggunakan *package* *matplotlib*.

3.5.3 Analisis Data Struktur Pita CZTS

Data keluaran komputasi dari VASP berupa berkas *vasprun.xml*. Data ini kemudian dirajah menggunakan aplikasi Python dengan *package* *pymatgen*. Dari data struktur pita ini juga dapat diperoleh besarnya massa efektif pembawa muatan. Kurva pita valensi maksimum dan kurva pita konduksi minimum (sebetulnya bentuk kurva apa pun di dekat nilai maksimum atau minimum dapat didekati

Jessie Manopo, 2021
ANALISIS PENGARUH DEFEEK $Cu_{Zn}+Zn_{Cu}$ PADA KRISTAL Cu_2ZnSnS_4 SEBAGAI MATERIAL SEL SURYA MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

dengan persamaan parabola) dapat didekati menggunakan persamaan (3.1) (Kittel, 2004).

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (3.1)$$

Definisi ini juga dapat dianalogikan dengan perilaku elektron bebas yang memiliki hubungan dispersi energi $\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}$. Karena kurva pita konduksi minimum dari struktur pita mirip parabola, elektron berperilaku seperti partikel bebas yang memiliki massa efektif tertentu. Untuk menentukan massa efektif elektron, perlu meninjau pita konduksi minimum. Sedangkan untuk menentukan massa efektif hole, perlu ditinjau pita valensi maksimum.

Penentuan massa efektif ini dibantu oleh *package* sumo (M Ganose dkk., 2018). Dari kurva struktur pita didapat beberapa parabola pada kurva pita valensi maksimum. Massa efektif dari setiap parabola ini kemudian dirata-ratakan.

3.5.4 Analisis Sifat Optik

Keluaran hasil komputasi dari VASP, berupa berkas `vasprun.xml` menyediakan nilai tensor dielektrik sebagai fungsi dari energi foton yang diserap. Dari tensor dielektrik ini dapat diperoleh besaran koefisien absorpsi seperti ditunjukkan oleh persamaan (2.67). Tensor dielektrik yang diperoleh tidak bersifat diagonal. Pada tensor ini terdapat 3 komponen yang independen, ϵ_{xx} ($= \epsilon_{yy}$), ϵ_{zz} , dan ϵ_{xy} . Namun elemen di luar diagonal tersebut nilainya sangat kecil, sehingga pada penelitian ini diabaikan. Karena pada kalkulasi ini tidak ditetapkan arah polarisasi medan listrik gelombang elektromagnetik yang mau dikenai pada CZTS, maka dari itu digunakan rata-rata dari elemen diagonal tensor dielektrik untuk merepresentasikan fungsi dielektrik material tersebut, seperti dilakukan oleh Bercx, dkk (Marnik Bercx dkk., 2016). Kemudian, untuk keperluan analisis, koefisien absorpsi dinyatakan dalam besaran penyerapan (*absorbance*) (A), ditunjukkan oleh persamaan (3.2).

$$A \equiv \frac{\alpha t}{\ln(10)} \quad (3.2)$$

Jessie Manopo, 2021

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

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

Dengan t adalah ketebalan material yang ditetapkan besarnya sebesar $1 \mu m$. Penyerapan kemudian dirajah terhadap energi foton yang diserap menggunakan Python. Data penyerapan ini juga disimpan dalam berkas berekstensi “.dat” untuk kemudian dianalisis menggunakan metode SLME untuk diperoleh tegangan rangkaian terbuka (Voc) dan kerapatan arus hubung singkat (Jsc).

3.5.5 Analisis Spectroscopic Limited Maximum Efficiency (SLME)

Analisis SLME dilakukan menggunakan persamaan-persamaan yang tertera pada subbab 2.12 dan 2.13. Integrasi numerik pada persamaan (2.59) dan (2.60) dilakukan menggunakan metode Simpson yang diimplementasikan pada kode Python. Data spektrum matahari pada keadaan AM1.5G diperoleh dari situs <https://www.nrel.gov/grid/solar-resource/spectra-am1.5.html>.

Kalkulasi efisiensi dilakukan menggunakan persamaan (3.3)

$$effisiensi = \frac{P_m}{P_{in}} \quad (3.3)$$

Dengan P_m adalah daya listrik maksimum yang dapat dihasilkan oleh sel surya. P_{in} dihitung menggunakan data iradians yang diperoleh dari situs di atas diintegrasikan secara numerik terhadap panjang gelombang menggunakan metode Simpson, ditunjukkan pada persamaan (3.4).

$$P_{in} = \int_0^{\infty} P(\lambda) d\lambda \quad (3.4)$$

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