

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Material termoelektrik merupakan salah satu kandidat teknologi energi yang menarik karena kemampuannya mengonversi energi panas secara langsung menjadi energi listrik, serta sebaliknya, tanpa memerlukan bagian bergerak dan tanpa menghasilkan emisi gas buang. Karakteristik tersebut menjadikan teknologi termoelektrik relevan untuk pemanfaatan panas limbah industri, sistem pendinginan solid-state, serta aplikasi energi berkelanjutan dalam skala kecil hingga menengah (Li et al., 2020; Baghel & Kumar, 2024). Selain itu, termoelektrik memiliki keunggulan berupa stabilitas operasi yang tinggi, umur pakai yang panjang, serta kemampuan bekerja pada berbagai rentang temperatur, sehingga terus menjadi fokus penelitian dalam bidang fisika material dan ilmu material terapan (Chen et al., 2018; Chauhan et al., 2021).

Kinerja suatu material termoelektrik umumnya dievaluasi melalui parameter *figure of merit* (ZT), yang merepresentasikan efisiensi material dalam mengonversi energi panas menjadi energi listrik. Nilai ZT ditentukan oleh keterkaitan antara sifat transport elektronik dan sifat transport termal material, khususnya koefisien Seebeck, konduktivitas listrik, dan konduktivitas termal (Gusmao et al., 2018; Snyder & Toberer, 2008). Dalam pengembangan material termoelektrik, peningkatan ZT menjadi tantangan utama karena parameter-parameter tersebut saling berkaitan dan sering kali menunjukkan hubungan yang saling berlawanan, sehingga optimasi satu parameter dapat berdampak negatif pada parameter lainnya (Heremans et al., 2013; Pei et al., 2011).

Dalam konteks optimasi performa termoelektrik, faktor daya sering digunakan sebagai indikator awal karena secara langsung mencerminkan kemampuan material dalam menghasilkan daya listrik dari proses transport muatan. Koefisien Seebeck berkaitan dengan kemampuan material menghasilkan beda potensial listrik akibat gradien suhu, sedangkan konduktivitas listrik menunjukkan

kemudahan pembawa muatan bergerak di dalam material (Ziman, 1960; Goldsmid, 2010). Faktor daya menjadi penting karena daya listrik yang dihasilkan tidak hanya bergantung pada besar tegangan yang terbentuk, tetapi juga pada efisiensi aliran muatan, sehingga keseimbangan antara koefisien Seebeck dan konduktivitas listrik menjadi kunci dalam desain material termoelektrik berkinerja tinggi (Snyder & Ursell, 2003; Rowe, 2006).

Salah satu pendekatan yang paling banyak digunakan untuk meningkatkan faktor daya dan performa termoelektrik adalah doping, yaitu penambahan unsur tertentu ke dalam kisi kristal untuk memodifikasi struktur elektronik dan konsentrasi pembawa muatan. Doping dapat mengubah posisi energi Fermi, meningkatkan densitas keadaan di sekitar energi Fermi, serta memodifikasi struktur pita energi material (Kim et al., 2019; Zhang et al., 2018). Namun demikian, efek doping sangat bergantung pada jenis unsur doping dan mekanisme substitusi atom, sehingga peningkatan konduktivitas listrik yang diperoleh sering kali diiringi oleh penurunan koefisien Seebeck akibat meningkatnya konsentrasi pembawa muatan (Pei et al., 2011; Heremans et al., 2013). Berbagai studi terdahulu telah melaporkan penerapan strategi doping pada material termoelektrik berbasis chalcogenide, khususnya SnSe. Doping unsur tanah jarang seperti Yb dilaporkan mampu meningkatkan faktor daya SnSe secara signifikan pada temperatur tinggi melalui peningkatan konsentrasi pembawa muatan (Yuan et al., 2022; Wei et al., 2016). Selain itu, penelitian mengenai doping ganda, seperti kombinasi Bi/Zn, menunjukkan bahwa pendekatan multi-dopan dapat menghasilkan peningkatan faktor daya yang lebih besar dibandingkan doping tunggal (Al Bouzief et al., 2023; Chen et al., 2018). Meskipun demikian, sebagian besar penelitian tersebut masih berfokus pada hasil eksperimen tanpa pembahasan mendalam mengenai mekanisme perubahan struktur elektronik pada tingkat atomistik.

Material *tin selenide* (SnSe) menjadi salah satu material termoelektrik yang paling banyak mendapat perhatian dalam satu dekade terakhir. SnSe termasuk dalam kelompok monokalkogenida berlapis golongan IV dan dikenal sebagai material termoelektrik bebas timbal yang ramah lingkungan (Zhao et al., 2014; Li

et al., 2015). Secara eksperimen, SnSe dilaporkan memiliki konduktivitas termal kisi yang sangat rendah serta nilai ZT yang tinggi pada temperatur menengah hingga tinggi, yang berkaitan erat dengan struktur kristalnya yang terdistorsi dan ikatan kovalen yang relatif lemah (Zhao et al., 2014; Wei et al., 2016). Namun demikian, performa termoelektrik SnSe pada temperatur rendah hingga menengah masih relatif terbatas, sehingga diperlukan strategi modifikasi material yang lebih efektif.

Dalam pengembangan SnSe, doping logam transisi mulai dipertimbangkan sebagai alternatif selain unsur golongan utama dan tanah jarang. Logam transisi memiliki konfigurasi elektron d yang khas, yang memungkinkan terjadinya hibridisasi kuat dengan orbital p dari atom Sn dan Se, sehingga berpotensi memodifikasi struktur pita energi di sekitar energi Fermi secara signifikan (Zhang et al., 2018; González-Romero et al., 2018). Dibandingkan logam transisi lain, nikel (Ni) dipilih dalam penelitian ini karena konfigurasi elektron $3d^8$ yang relatif stabil serta kecenderungannya untuk tidak menimbulkan efek magnetik kuat yang dapat memperumit interpretasi sifat elektronik dan termoelektrik material (González-Romero et al., 2018; Sootsman et al., 2009).

Untuk memahami pengaruh doping Ni terhadap sifat elektronik dan termoelektrik SnSe secara fundamental, penelitian ini menggunakan pendekatan komputasi berbasis Density Functional Theory (DFT). Metode DFT memungkinkan perhitungan sifat elektronik material dari prinsip pertama tanpa parameter empiris, sehingga memberikan gambaran yang akurat mengenai struktur pita energi dan densitas keadaan akibat doping (Kohn & Sham, 1965; Martin, 2004). Dibandingkan metode eksperimental, DFT memungkinkan eksplorasi sistem terdoping secara sistematis dengan biaya dan waktu yang lebih efisien serta telah terbukti mampu mereproduksi tren sifat termoelektrik pada material chalcogenide dengan baik (Lee, 2017; Sholl & Steckel, 2009).

Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji pengaruh doping logam transisi Ni terhadap sifat elektronik dan termoelektrik material SnSe melalui pendekatan komputasi DFT. Kebaruan penelitian ini terletak pada analisis terperinci hubungan

antara perubahan struktur pita energi, densitas keadaan, dan respons faktor daya akibat doping Ni, yang masih relatif jarang dibahas dalam studi sebelumnya. Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi ilmiah dalam pengembangan strategi doping logam transisi yang lebih efektif untuk meningkatkan performa termoelektrik SnSe pada berbagai rentang temperatur.

1.2 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Menjelaskan pengaruh doping Nikel (Ni) terhadap sifat elektronik dan transport dari material termoelektrik SnSe
2. Menganalisis potensi doping Nikel (Ni) sebagai alternatif untuk meningkatkan performa material termoelektrik SnSe.

1.3 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dari penelitian ini, yaitu:

Menambah pemahaman mendalam atas pelacakan dan peninjauan mengenai pengaruh doping Nikel (Ni) terhadap sifat-sifat termoelektrik material SnSe.