

ABSTRAK

Material termoelektrik merupakan material fungsional yang mampu mengonversi energi panas secara langsung menjadi energi listrik, sehingga memiliki potensi besar dalam pemanfaatan panas limbah dan pengembangan sistem energi berkelanjutan. Kinerja material termoelektrik sangat ditentukan oleh sifat elektronik dan transport pembawa muatannya, sehingga pemahaman pada tingkat atomistik menjadi sangat penting. Salah satu material yang menarik perhatian dalam beberapa tahun terakhir adalah timah selenida (SnSe), yang dikenal memiliki performa termoelektrik yang tinggi. Pada penelitian ini dilakukan studi komputasi berbasis Density Functional Theory (DFT) untuk menganalisis pengaruh doping atom Ni terhadap sifat elektronik dan termoelektrik material SnSe. Perhitungan dilakukan pada struktur unit cell, supercell, serta SnSe terdoping Ni, dengan fokus pada analisis band structure, projected density of states, koefisien Seebeck, konduktivitas listrik, dan faktor daya pada temperatur 300 K dan 600 K. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa SnSe murni, baik pada model unit cell maupun supercell, memiliki karakter semikonduktor indirect band gap dengan nilai celah pita masing-masing sebesar 0,566 eV dan 0,496 eV. Pembentukan supercell tidak mengubah sifat elektronik dasar material, melainkan hanya menimbulkan penyesuaian kecil pada struktur pita. Substitusi atom Sn oleh Ni menyebabkan perubahan signifikan pada struktur elektronik, yang ditandai dengan munculnya impurity states Ni-3d di sekitar energi Fermi sehingga band gap tertutup dan sifat konduktif material meningkat, sebagaimana didukung oleh hasil analisis projected density of states. Dari sisi termoelektrik, SnSe murni menunjukkan nilai koefisien Seebeck yang relatif tinggi pada kedua temperatur. Sebaliknya, penambahan doping Ni menyebabkan penurunan nilai koefisien Seebeck akibat meningkatnya konsentrasi pembawa muatan dan berkurangnya asimetri densitas keadaan di sekitar energi Fermi. Meskipun doping Ni meningkatkan konduktivitas listrik, peningkatan tersebut belum mampu mengimbangi penurunan koefisien Seebeck, sehingga faktor daya SnSe terdoping Ni masih lebih rendah dibandingkan SnSe murni. Hal ini menunjukkan bahwa, pada konfigurasi dan konsentrasi doping yang digunakan dalam penelitian ini, peningkatan performa termoelektrik SnSe belum sepenuhnya tercapai karena perubahan struktur elektronik lebih dominan meningkatkan sifat konduktif dibandingkan respons termoelektriknya. Secara keseluruhan, hasil penelitian ini menegaskan bahwa SnSe tetap merupakan material dengan potensi termoelektrik yang besar, serta menunjukkan bahwa modifikasi melalui doping memerlukan pengaturan jenis dan konsentrasi doping yang lebih lanjut agar peningkatan performa termoelektrik dapat dicapai secara lebih optimal.

Kata Kunci : SnSe, doping Nikel, Density Functional Theory, sifat elektronik, Band gap, sifat termoelektrik, koefisien Seebeck, transport Boltzmann