

# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang Masalah

Saat ini, penelitian tentang termoelektrik mendapatkan banyak perhatian di kalangan peneliti. Karena material termoelektrik sangat penting dalam teknologi konversi energi terbarukan untuk mengatasi krisis global. Kinerja termoelektrik bergantung pada jenis material yang digunakan dan sifat sifatnya seperti koefisien seebeck, konduktivitas listrik, dan konduktivitas termal (Gayner & Kar, 2016). Terutama penelitian material termoelektrik yang memiliki performa yang baik atau nilai *Figure of Merit* (ZT) yang baik, karena nilai ZT dapat menunjukkan seberapa efisien material tersebut digunakan sebagai material termoelektrik (Setyawan & Curtarolo, 2010).

Ada berbagai jenis material yang termasuk kedalam material termoelektrik, salah satunya yaitu  $MgB_2$ . Selain itu, material  $MgB_2$  juga menjadi salah satu jenis material yang menarik untuk diteliti di bidang superkonduktor.  $MgB_2$  memiliki struktur hexagonal dengan nilai medan kritis yang tinggi untuk superkonduktor suhu rendah yaitu  $>40$  K dan  $T_c$  (suhu kritis) tinggi yaitu 39 K (Herbirowo & Pramono, 2021). Pemahaman yang lebih mendalam tentang sifat listrik dan sifat termal  $MgB_2$  dapat membuka jalan bagi pengembangan material superkonduktor yang lebih baik.

Mengetahui sifat listrik dan sifat termal suatu material tidak hanya dapat dilakukan secara eksperimen, namun dapat dilakukan secara komputasi juga. Ketika menghitung menggunakan komputasi membuat pekerjaan peneliti menjadi relatif lebih cepat dibandingkan dengan eksperimen, sehingga dapat menjadi alternatif saat melakukan

perhitungan. Terutama ketika jumlah atomnya meningkat, maka usaha untuk menyelesaikan persamaannya juga meningkat secara eksponensial terhadap jumlah atom yang terlibat, oleh karena itu diperlukan perhitungan komputasi berbasis prinsip pertama, khususnya dengan pendekatan yang dapat menghitung struktur elektron banyak partikel, yaitu pendekatan DFT (*Density Functional Theory*).

Menggunakan prinsip pertama DFT membuat peneliti dapat melakukan perhitungan yang akurat mengenai struktur elektronik material. Teori DFT ini dapat digunakan pada beberapa *software*, salah satunya QE (*Quantum Espresso*). Menggunakan teori DFT pada QE untuk mengetahui hasil perhitungan DoS (*Density of States*) yang menunjukkan berapa banyak keadaan sistem pada tingkat energi tertentu dan hasil perhitungan pada *Bands Structure* yang menunjukkan bagaimana sifat dari suatu bahan dengan menggambarkan tingkat energi yang dimiliki elektron. Analisis ini penting untuk memahami bagaimana elektron berperilaku dalam material dan kontribusi terhadap sifat superkonduktivitasnya. Selain itu, untuk mengetahui sifat termoelektrik, sifat listrik dan sifat termal suatu material dapat menggunakan *software* BoltzTraP yang didasarkan pada konsep teori *Boltzmann Transport* (Ramadhan, 2020) dan sifat termoelektriknya berdasarkan hasil dari DFT.

Berdasarkan uraian di atas, maka penulis telah melakukan analisis mendalam tentang sifat suatu material superkonduktor  $\text{MgB}_2$  secara komputasi dengan menggunakan beberapa *software* diantaranya yaitu, QE dan BoltzTraP. penelitian ini digunakan dengan prinsip pertama DFT untuk menganalisis hasil perhitungan simulasi DoS dan *Band structure* menggunakan QE, dan menganalisis hasil perhitungan simulasi sifat termoelektrik, sifat listrik dan sifat termal pada material

superkonduktor  $\text{MgB}_2$  dengan struktur kristal *database* dari materialproject, dibandingkan dengan  $\text{MgB}_2$  hasil sintesa struktur kristal *bulk* dan *wire*.

## B. Batasan Masalah

Demi terstruktur dan terarahnya permasalahan pada penelitian ini, sehingga dapat menyederhanakan masalah yang ada, maka perlu dibuatnya batasan masalah:

1. Metode komputasi yang digunakan pada penelitian ini adalah menggunakan prinsip perhitungan DFT memakai *software* QE dan BoltzTraP.
2. Sampel material yang digunakan ialah material  $\text{MgB}_2$  (*Magnesium Diboride*) hasil sintesa dengan struktur kristal pada *bulk* dan *wire*.
3. Data QE yang dihasilkan berupa *Bands Structure* dan DoS (*Density of States*)
4. Data BoltzTraP yang dihasilkan berupa data konduktivitas listrik, konduktivitas termal, koefisien seebeck, dan ZT (*Figure of Merit*)

## C. Rumusan Masalah

Mengacu pada latar belakang di atas, maka dapat dibuat rumusan masalah:

1. Bagaimana hasil perhitungan simulasi komputasi DoS dan *Band Structure* dengan menggunakan prinsip pertama DFT (*software* QE) pada material  $\text{MgB}_2$  dari hasil *database* dan sintesa?
2. Bagaimana hasil perhitungan simulasi komputasi sifat termoelektrik, sifat listrik, dan sifat termal dengan menggunakan formula Boltzmann (*software* BoltzTraP) pada material  $\text{MgB}_2$  dari hasil *database* dan sintesa?

#### **D. Tujuan Penelitian**

Dari rumusan masalah yang diperoleh, maka diambil tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Untuk mengetahui hasil perhitungan simulasi komputasi DoS dan *Band Structure* dengan menggunakan prinsip pertama DFT (*software* QE) pada material MgB<sub>2</sub> dari hasil *database* dan sintesa.
2. Untuk mengetahui hasil perhitungan simulasi komputasi sifat termoelektrik, sifat listrik, dan sifat termal dengan menggunakan formula Boltzmann (*software* BoltzTraP) pada material MgB<sub>2</sub> dari hasil *database* dan sintesa.

#### **E. Manfaat Penelitian**

Penelitian ini dilakukan guna memberikan manfaat baik secara teoritis maupun praktis. Adapun manfaat penelitian ini adalah:

##### **1. Manfaat Teoretis**

- a. Dapat menjadi referensi terkait sifat listrik dan termal pada material MgB<sub>2</sub> melalui metode komputasi
- b. Dapat menjadi referensi terkait analisis perbandingan dari *database* dan data hasil sintesa pada material MgB<sub>2</sub> (*wire* dan *bulk*)
- c. Dapat mengetahui potensi MgB<sub>2</sub> sebagai material superkonduktor
- d. Memberikan informasi terkait perbandingan antara data dari *database* dan data sampel hasil sintesa.

##### **2. Manfaat Praktis**

- a. Dapat menjadi referensi untuk penelitian selanjutnya terkait sifat termoelektrik yang memiliki material *bulk* dan *wire* MgB<sub>2</sub>, khususnya dengan menggunakan metode komputasi.

- b. Dapat berperan dalam pengembangan teknologi superkonduktor dengan material  $\text{MgB}_2$ .