

## INTISARI

### **Kajian *Machine Learning* untuk Pengembangan Sel Surya Perovskite: Optimasi Model dan Pencarian Konfigurasi Baru**

Oleh:

Frendy Jaya K  
22/499465/SPA/00846

Optimasi kinerja sel surya perovskite (*perovskite solar cell*, PSC) dengan pendekatan komputasi dan eksperimen memakan waktu yang lama dan biaya yang tinggi. Pendekatan berbasis data dengan mengembangkan model *machine learning* (ML) dapat menjadi solusi yang cepat dan murah. Namun, ML yang telah dikembangkan pada penelitian sebelumnya masih belum memberikan performa yang memuaskan. Penelitian ini meninjau pengembangan ML dan penerapannya dalam optimasi kinerja PSC. Secara umum, penelitian ini dibagi berdasarkan basis data yang digunakan, yaitu data hasil perhitungan *density functional theory* (DFT) dan eksperimen. Model yang dikembangkan dengan basis data DFT digunakan untuk memprediksi properti yang berkaitan dengan efisiensi dan kestabilan material ketika diaplikasikan pada bidang fotovoltaik, yaitu energi formasi ( $\Delta E_f$ ), kestabilan termodinamika ( $\Delta E_{\text{hull}}$ ), celah pita ( $E_g$ ), dan sifat celah pita. Algoritme seleksi fitur *meta-heuristic* dapat meningkatkan performa model prediksi  $\Delta E_f$ ,  $E_g$ , dan sifat celah pita hingga melampaui penelitian sebelumnya. Dari 67.538 konfigurasi perovskite baru yang dibentuk, model berhasil menyaring 42 material yang memiliki  $\Delta E_f$  negatif,  $\Delta E_{\text{hull}} < 0,04$  eV/atom,  $E_g$  pada rentang 1 – 1,8 eV, dan memiliki sifat celah pita langsung. Model yang dikembangkan dengan basis data eksperimen digunakan untuk memprediksi kestabilan dan efisiensi PSC. Model tersebut memiliki performa yang melampaui penelitian sebelumnya. Sebanyak 29.016 konfigurasi PSC baru dibentuk dengan variasi komposisi perovskite, arsitektur perangkat, dan jenis *transport layers*. Selanjutnya, dilakukan penyaringan 100 konfigurasi terbaik, yang diprediksi memiliki kestabilan lebih dari 1.000 jam dan efisiensi mencapai 26,06%, melampaui PSC yang stabil pada Perovskite Database (22,3%). Penelitian ini mendemonstrasikan pendekatan ML untuk menunjang pendekatan komputasi dan eksperimen dalam mencari konfigurasi material atau perangkat dengan kinerja lebih baik dari pada yang telah ada sebelumnya.

**Kata kunci:** sel surya perovskite, *machine learning*, penyaringan material

## ABSTRACT

*Machine Learning Study for The Development of Perovskite Solar Cells:  
Model Optimization and Exploration of Novel Configurations*

Oleh:

Frendy Jaya K  
22/499465/SPA/00846

*Optimizing the performance of perovskite solar cell (PSC) through computational and experimental approaches is often time-consuming and expensive. A data-driven strategy using machine learning (ML) offers a faster and more cost-effective alternative, though previous ML models have often shown limited predictive performance. This study reviews the development of ML for PSC optimization, categorized by the type of data used: density functional theory (DFT) and experimental datasets. The model developed using DFT data is designed to predict key material properties relevant to photovoltaic efficiency and stability, including formation energy ( $\Delta E_f$ ), thermodynamic stability ( $\Delta E_{\text{hull}}$ ), band gap ( $\Delta E_g$ ), and nature of the band gap. By applying a meta-heuristic feature selection algorithm, the predictive performance for  $\Delta E_f$ ,  $\Delta E_g$ , and the nature of the band gap surpassed previous studies. Out of 67,538 newly generated perovskite compositions, the model screened 42 candidates with negative  $\Delta E_f$ ,  $\Delta E_{\text{hull}}$  below 0.04 eV/atom,  $\Delta E_g$  in the range of 1 – 1.8 eV, and a direct band gap. In parallel, models trained on experimental data were used to predict PSC stability and efficiency, also showing improved performance. From 29,016 newly generated device configurations, based on variations in perovskite composition, architecture, and transport layers, the top 100 candidates were screened with predicted operational stability beyond 1,000 hours and efficiencies reaching 26.06%, surpassing the highest-performing stable PSC (22.3%) recorded in the Perovskite Database. These findings demonstrate the potential of ML to complement computational and experimental efforts in discovering new materials and device configurations with superior performance.*

**Keywords:** *perovskite solar cell, machine learning, materials screening*