

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
HALAMAN PERNYATAAN .....	ii
PRAKATA.....	iii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR GAMBAR .....	vi
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	ix
INTISARI.....	x
ABSTRACT.....	xi
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	9
1.3 Batasan Masalah.....	9
1.4 Tujuan Penelitian .....	10
1.5 Kebaruan Penelitian .....	10
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	12
2.1 Capaian penelitian sebelumnya.....	12
2.2 Arahan dari penelitian sebelumnya.....	24
2.3 <i>State of the art</i> .....	27
BAB III LANDASAN TEORI.....	29
3.1 Sel Surya Perovskite.....	29
3.1.1 Properti optimal perovskite untuk aplikasi sel surya .....	29
3.1.2 Struktur sel surya perovskite.....	33
3.2 <i>Machine Learning</i> untuk Penemuan Material Baru .....	34
3.2.1 Basis data material .....	37
3.2.2 Penanganan distribusi data tidak seimbang .....	38
3.2.3 Ekstraksi fitur .....	38
3.2.5 Algoritme optimasi <i>meta-heuristic</i> .....	40
3.2.6 Seleksi fitur .....	42
3.2.7 Model <i>machine learning</i> .....	43
3.2.8 Validasi model .....	43
3.2.9 Evaluasi model.....	44
BAB IV METODE PENELITIAN .....	46
4.1 Rencana Implementasi .....	46
4.1.1 Pengembangan ML dengan basis data DFT.....	47
4.1.1.1 Pengumpulan data .....	47
4.1.1.2 Rancang bangun ML .....	47
4.1.1.3 Penyaringan material baru.....	52
4.1.2 Pengembangan ML dengan basis data Eksperimen .....	53
4.1.2.1 Pengumpulan data .....	53
4.1.2.2 Rancang bangun ML.....	54
4.2.2.3 Penyaringan konfigurasi baru lapisan sel surya perovskite .....	56

BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	57
5.1 Pengembangan ML dengan Basis Data DFT .....	57
5.1.1 Pemrosesan data dan ekstraksi fitur .....	57
5.1.2 Model stabilitas .....	59
5.1.2.1 Prediksi energi formasi.....	60
5.1.2.2 Klasifikasi kestabilan termodinamika.....	63
5.1.3 Model celah pita.....	67
5.1.3.1 Klasifikasi konduktor dan nonkonduktor.....	68
5.1.3.2 Prediksi nilai celah pita .....	70
5.1.3.3 Klasifikasi sifat celah pita .....	72
5.1.4 Tinjauan seleksi fitur.....	74
5.1.5 Tinjauan model dan keterbatasannya .....	75
5.1.6 Penyaringan material baru.....	86
5.2 Pengembangan ML dengan Basis Data Eksperimen.....	88
5.2.1 Pemrosesan data dan ekstraksi fitur .....	88
5.2.2 Model celah pita .....	91
5.2.3 Model stabilitas .....	92
5.2.4 Model PCE.....	94
5.2.5 Tinjauan model dan keterbatasannya .....	95
5.2.6 Penyaringan konfigurasi sel surya perovskite baru.....	101
BAB VI KESIMPULAN .....	111
6.1 Kesimpulan.....	111
6.2 Saran.....	112
DAFTAR PUSTAKA .....	113
LAMPIRAN .....	125