

STUDI DFT TERHADAP KARAKTERISTIK HETEROSTRUKTUR $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ SEBAGAI KATODA BATERAI ION ALUMINIUM

OTNIEL SITEPU



DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Studi DFT terhadap Karakteristik Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ sebagai Katoda Baterai Ion Aluminium” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Juli 2026

Otniel Sitepu
G7401221065



ABSTRAK

OTNIEL SITEPU. Studi DFT terhadap Karakteristik Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ sebagai Katoda Baterai Ion Aluminium. Dibimbing oleh FAOZAN dan HUSIN ALATAS.

Baterai ion aluminium (AIBs) merupakan alternatif penyimpan energi pasca litium yang menawarkan keunggulan seperti kelimpahan aluminium, biaya yang murah, serta relatif lebih aman. Pengembangan AIBs membutuhkan material katoda yang mampu mengakomodasi spesies Al^{3+} dan AlCl_4^- . Dalam penelitian ini dikaji karakteristik heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ sebagai material katoda AIBs menggunakan *density functional theory* (DFT). Heterostruktur terbentuk dengan stabil dan memiliki sifat semikonduktor. Analisis *charge density difference* menunjukkan adanya transfer muatan dari MoS_2 menuju Ti_2CO_2 pada antarmuka. Ditemukan bahwa Al cenderung mengisi situs yang berbeda dibanding mengisi situs di *interlayer* yang sama, teradsorpsi baik pada permukaan oksigen (energi adsorpsi sebesar -2,19 eV) dan cenderung menjadi donor elektron, sedangkan AlCl_4^- teradsorpsi lebih baik pada permukaan sulfur (energi adsorpsi sebesar -1,6 eV) dan cenderung menjadi akseptor elektron. Secara elektrokimia, kapasitas spesifik diperoleh sebesar 175 mAh g^{-1} dengan tegangan (*open circuit voltage*) 0,03-0,73 V untuk Al dan kapasitas spesifik $43,7 \text{ mAh g}^{-1}$ dengan tegangan 1,22-1,6 V untuk AlCl_4^- . Pada mobilitas ion, difusi Al memiliki energi *barrier* sebesar 0,63 eV dan pada AlCl_4^- sebesar 0,033 eV.

Kata kunci: Baterai ion aluminium, DFT, Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$, Katoda

ABSTRACT

OTNIEL SITEPU. DFT Study on the Characteristics of $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ Heterostructure as Aluminium Ion Battery Cathode. Supervised by FAOZAN and HUSIN ALATAS.

Aluminium-ion batteries (AIBs) are considered a promising post-lithium energy storage technology due to their abundance, low cost, and more safety. However, their development requires cathode materials capable of accommodating both Al^{3+} and AlCl_4^- . This study investigates the $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ heterostructure as a cathode material for AIBs using DFT. The heterostructure is found structurally stable and exhibits a semiconducting band gap. Charge density difference analysis reveals electron transfer from MoS_2 to Ti_2CO_2 at the interface. It is found that Al tends to insert into different interlayer positions rather than occupying one layer, bind strongly to oxygen surfaces (adsorption energy of -2,19 eV), and tends to be electron donor, while AlCl_4^- adsorb more favorably on sulfur surfaces (adsorption energy of -1,6 eV) and tends to be electron acceptor. Electrochemical calculations yield a theoretical specific capacity of 175 mAh g^{-1} within open circuit voltage 0,03-0,73 V for Al and specific capacity of $43,7 \text{ mAh g}^{-1}$ within 1,22-1,6 V for AlCl_4^- . Ion mobility shows diffusion barrier of 0,63 eV for Al and 0,033 eV for AlCl_4^- .

Keywords: Aluminium-ion batteries, Cathode, DFT, $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ heterostructure



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2026
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perpustakaan IPB University

STUDI DFT TERHADAP KARAKTERISTIK HETEROSTRUKTUR $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ SEBAGAI KATODA BATERAI ION ALUMINIUM

OTNIEL SITEPU

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Fisika

**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

1. Dr. Sitti Yani, S.Si., M.Si.

2. Dr. Siti Nikmatin, S.Si., M.Si.



Judul Skripsi : Studi DFT terhadap Karakteristik Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ sebagai Katoda Baterai Ion Aluminium

Nama : Otniel Sitepu
NIM : G7401221065

@Hak cipta milik IPB University

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Faozan, S.Si., M.Si
NIP. 197909232007011001

Pembimbing 2:
Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si.
NIP. 197106041998021001

Diketahui oleh

Ketua Departemen Fisika
Dr. Ir. Irmansyah, M.Si.
NIP. 196809161994031001

Tanggal Ujian: 29 Juli 2026

Tanggal Lulus:



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat dan kasih karunia-Nya sehingga karya ilmiah dengan judul “Studi DFT terhadap Karakteristik Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ sebagai Katoda Baterai Ion Aluminium” berhasil diselesaikan. Karya ilmiah ini dibuat sebagai salah satu syarat memperoleh gelar sarjana di Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Pertanian Bogor.

Terima kasih penulis ucapkan kepada Dr. Faozan, S.Si., M.Si. dan Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si. sebagai dosen pembimbing yang telah membimbing dan memberikan saran. Ungkapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada kedua orang tua, kakak, keluarga besar, serta seluruh teman-teman Fisika IPB 59 (Grup Gunung) yang telah memberi dukungan dan semangat sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian ini.

Penulis menyadari bahwa karya ilmiah ini masih memiliki banyak kekurangan. Oleh karena itu, penulis berharap adanya kritik dan saran yang membangun. Semoga karya ilmiah ini bermanfaat.

Bogor, Juli 2026

Otniel Sitepu



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	3
1.5 Ruang Lingkup	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Baterai Ion Aluminium	4
2.2 Katoda	5
2.3 Ti_2CO_2	5
2.4 MoS_2	6
2.5 Heterostruktur van der Waals	6
2.6 <i>Density Functional Theory</i>	7
2.6.1 <i>Many Body Problem</i>	7
2.6.2 Aproksimasi Born-Oppenheimer	8
2.6.3 Teorema Hohenberg-Kohn	8
2.6.4 Teorema Kohn-Sham	8
2.6.5 <i>Exchange-Correlation Energy</i>	9
2.6.6 Basis Set dan Pseudopotensial	9
III METODE PENELITIAN	10
3.1 Waktu dan Tempat	10
3.2 Alat dan Bahan	10
3.3 Prosedur Kerja	10
3.3.1 Penyusunan Ti_2CO_2 dan MoS_2	10
3.3.2 Optimasi Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$	11
3.3.3 Analisis Properti Elektronik	12
3.3.4 Simulasi Adsorpsi	12
3.3.5 Simulasi Jalur Difusi	13
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	15
4.1 Uji Konvergensi	15
4.2 Optimasi Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$	16
4.3 Properti Elektronik	17
4.4 Adsorpsi Al pada Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$	22
4.5 <i>Open Circuit Voltage</i> (OCV) dan Kapasitas Spesifik Al	23
4.6 Mobilitas Al	26



4.7	Adsorpsi AlCl_4 pada Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$	28
4.8	<i>Open Circuit Voltage</i> (OCV) dan Kapasitas Spesifik AlCl_4	29
4.9	Mobilitas AlCl_4	32
4.10	Perbandingan dengan Material Katoda Lain	33
V	SIMPULAN DAN SARAN	36
5.1	Simpulan	36
5.2	Saran	36
	DAFTAR PUSTAKA	37
	LAMPIRAN	40
	RIWAYAT HIDUP	44

DAFTAR TABEL

1	Perbandingan karakteristik litium dan aluminium	1
2	Aplikasi Ti_2CO_2 pada elektroda baterai ion	5
3	Aplikasi MoS_2 pada elektroda baterai ion	6
4	Parameter kisi ($\text{\AA}$)	11
5	Perbandingan panjang ikatan hasil optimasi heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ dengan data literatur ($\text{\AA}$)	16
6	Energi adsorpsi Al, jarak Al dengan permukaan, dan transfer muatan Al	23
7	Energi adsorpsi, OCV, dan jarak <i>interlayer</i> dengan penambahan jumlah Al	24
8	Energi adsorpsi AlCl_4 , jarak Cl dengan permukaan, dan transfer muatan AlCl_4	28
9	Energi adsorpsi, OCV, dan jarak <i>interlayer</i> dengan penambahan jumlah AlCl_4	30
10	Perbandingan kinerja heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$ dengan material lain	33

DAFTAR GAMBAR

1	Ilustrasi penyimpanan ion aluminium (Mahar <i>et al.</i> 2025)	4
2	Struktur: (a) Ti_2CO_2 (b) MoS_2 -bilayer	11
3	Proses perhitungan properti elektronik	12
4	Penentuan titik simetri kristal heksagonal	12
5	Contoh diagram energi (Sholl dan Steckel)	14
6	Uji konvergensi energi Ti_2CO_2 : (a) <i>ecutwfc</i> (b) <i>k-point</i>	15
7	Uji konvergensi energi MoS_2 : (a) <i>ecutwfc</i> (b) <i>k-point</i>	15
8	Uji konvergensi energi heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$: (a) <i>ecutwfc</i> (b) <i>k-point</i>	15
9	Heterostruktur $\text{Ti}_2\text{CO}_2/\text{MoS}_2$	17
10	Properti elektronik Ti_2CO_2 : (a) <i>bandstructure</i> -DOS (b) PDOS	18

11	Properti elektronik MoS ₂ : (a) <i>bandstructure</i> -DOS (b) PDOS	19
12	Properti elektronik heterostruktur Ti ₂ CO ₂ /MoS ₂ : (a) <i>bandstructure</i> -DOS (b) PDOS	20
13	PDOS Ti-3d dan Mo-4d sebelum dan sesudah pembentukan heterostruktur	21
14	PDOS O-2p dan S-3p sebelum dan sesudah pembentukan heterostruktur	21
15	<i>Charge density difference</i> (isosurface level: $10^{-4} \text{ e } \text{\AA}^{-3}$)	22
16	Situs adsorpsi Al pada heterostruktur Ti ₂ CO ₂ /MoS ₂	22
17	PDOS orbital O-2p, S-3p, dan Al-3p sebelum dan sesudah adsorpsi Al pada heterostruktur	23
18	Adsorpsi Al pada katoda heterostruktur	24
19	OCV katoda heterostruktur Ti ₂ CO ₂ /MoS ₂ (Al)	25
20	DOS penambahan adsorpsi Al	26
21	Mobilitas Al: (a) jalur difusi (b) Int 1 (c) Int 2	27
22	Profil energi mobilitas Al	27
23	Situs adsorpsi AlCl ₄ pada heterostruktur Ti ₂ CO ₂ /MoS ₂	28
24	PDOS orbital O-2p, S-3p, Al-3p, dan Cl-3p sebelum dan sesudah adsorpsi AlCl ₄ pada heterostruktur	29
25	Adsorpsi AlCl ₄ pada katoda heterostruktur	30
26	OCV katoda heterostruktur Ti ₂ CO ₂ /MoS ₂ (AlCl ₄)	31
27	DOS penambahan adsorpsi AlCl ₄	32
28	Mobilitas AlCl ₄ : (a) jalur mobilitas (b) Int 1 (c) Int 2	32
29	Profil energi mobilitas AlCl ₄	33

DAFTAR LAMPIRAN

1	Perhitungan energi adsorpsi	41
2	Perhitungan transfer muatan	42
3	Perhitungan OCV katoda	42
4	Perhitungan kapasitas spesifik katoda	43
5	Perhitungan energi <i>barrier</i> difusi	43