

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Landasan Teori

2.1.1 Sifat Elektronik

Struktur elektronik kini menjadi elemen penting dalam ilmu fisika untuk menciptakan material dan sistem baru yang bermanfaat. Kemampuan untuk memprediksi komposisi dan struktur yang stabil merupakan kunci dalam hal ini. Dengan kemajuan komputer, perhitungan energi dapat dilakukan untuk banyak struktur dan menerapkan berbagai metode untuk menemukan material dengan sifat yang diinginkan. Prediksi ini dilakukan karena mampu menerapkan kondisi yang sulit dicapai melalui eksperimen secara langsung (M.Martin, 2016). Sifat elektronik dalam material meliputi konduktivitas listrik, *band gap*, mobilitas elektron, densitas elektron, permitivitas listrik, efek hall, dan efek thermolistrik. Pada penelitian ini, sifat elektronik yang diamati adalah *band gap*, dan densitas elektron.

band gap atau celah pita adalah wilayah di dalam spektrum energi yang menunjukkan tidak adanya keadaan elektron yang tersedia. Hal ini menunjukkan bahwa tidak ada orbital elektron yang dapat ditempati dalam rentang energi tersebut. Kristal akan berperilaku seperti insulator jika celah pita antara pita-pita energi cukup besar, karena dalam kondisi ini tidak ada elektron yang dapat bergerak di bawah pengaruh medan listrik. Dalam logam, pita valensi dan pita konduksi sering kali saling tumpang tindih atau memiliki sebagian besar keadaan energi yang tersedia. Ini memungkinkan elektron untuk bergerak bebas dalam kristal, sehingga logam dapat menghantarkan listrik dengan baik (Kittel, 2005).

Struktur pita energi mempengaruhi sifat optik suatu material. Pada suhu rendah, pita valensi umumnya terisi penuh sedangkan pita konduksi kosong. Ketika foton di tembakkan dan berinteraksi dengan elektron di pita valensi, elektron tersebut dapat tereksitasi ke pita konduksi apabila foton memiliki cukup energi. Material yang memiliki celah pita yang memungkinkan elektron valensi tereksitasi ke pita konduksi oleh cahaya adalah material semikonduktor (Vella & Houard, 2016).

Biasanya, posisi momentum elektron pada puncak pita valensi tidak sama dengan posisi momentum pada dasar pita konduksi. Pada semikonduktor dengan celah pita langsung, puncak pita valensi atau *valence band maksimum* (VBM) dan dasar pita konduksi atau *conduction band minimum* (CBM) berada pada nilai momentum yang sama. Sedangkan celah pita tidak langsung, VBM dan CBM berada pada nilai momentum yang berbeda. Semikonduktor dengan celah pita langsung efisien untuk perangkat optoelektronik (LED, laser) karena elektron bisa langsung memancarkan atau menyerap cahaya tanpa perubahan momentum besar. Sedangkan semikonduktor dengan celah pita tidak langsung memerlukan bantuan fonon untuk perubahan momentum (University of Cambridge, 2025).

Density of States (DOS) adalah konsep dalam fisika materi yang menggambarkan jumlah keadaan kuantum yang tersedia untuk elektron dalam suatu material pada rentang energi tertentu. DOS penting dalam memahami bagaimana elektron mendistribusikan energi mereka dan bagaimana material berperilaku dalam hal konduktivitas listrik dan sifat optik (Kittel, 2005). Persamaan *Density of States* didefinisikan sebagai berikut:

$$n = \int_0^{\infty} g(E)f(E) dE, \quad (2.1)$$

dengan :

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \quad (2.2)$$

adalah fungsi rapat keadaan , m adalah massa elektron, E adalah energi , \hbar adalah konstanta Planck tereduksi , dan

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/(k_B T)} + 1}. \quad (2.3)$$

adalah fungsi distribusi Fermi-Dirac, E_f adalah energi Fermi, K_B adalah konstanta Boltzman, serta T adalah suhu.

Substitusikan hingga persamaan menjadi:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \sqrt{E} \cdot \frac{1}{e^{(E-E_f)/(k_B T)} + 1} dE. \quad (2.4)$$

Untuk ($T = 0$), integral menjadi lebih sederhana:

$$n = \int_0^{E_f} g(E) dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_f} \sqrt{E} dE. \quad (2.5)$$

Hasil integralnya:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{2}{3} E_f^{3/2}. \quad (2.6)$$

n adalah rapat keadaan total, $g(E)$ adalah rapat keadaan, $f(E)$ adalah fungsi distribusi Fermi-Dirac, dan E_f adalah energi fermi.

2.1.2 Sifat Optik

Sifat optik merujuk pada respon suatu material terhadap radiasi elektromagnetik, terutama terhadap cahaya tampak (William D. Callister & Rethwisch, 2018) Sifat optoelektronik mencakup berbagai karakteristik material yang mempengaruhi interaksi material dengan cahaya dan medan listrik. Dasar dari optoelektronik adalah optik dan fisika zat padat (Wilson & Hawkes, 1998).

Sifat optik yang dikaji dalam penelitian ini antara lain konstanta dielektrik, absorpsi cahaya (α), konduktivitas (σ), fungsi kehilangan elektron (L), koefisien ekstinsi (K), indeks bias (n), dan reflektivitas (R).

Indeks bias adalah ukuran seberapa banyak cahaya dibiaskan ketika melewati batas antara dua media, yang berkaitan langsung dengan kecepatan cahaya dalam media tersebut. Ketika gelombang elektromagnetik melalui medium dielektrik, osilasi medan listrik mempolarisasi molekul dari medium dan akan menginduksi molekul dipol menjadi berpasangan. Semakin kuat interaksi antara medan listrik dan dipol, maka semakin lama propagasi dari gelombang (Kasap, 2001).

Absorpsi adalah kemampuan material untuk menyerap cahaya, yang penting dalam aplikasi seperti detektor foton atau sel surya, di mana penyerapan maksimum diperlukan untuk konversi energi yang efisien. Koefisien absorpsi adalah ukuran yang menggambarkan seberapa efektif suatu material menyerap cahaya atau radiasi elektromagnetik pada panjang gelombang tertentu. Koefisien atenuasi α didefinisikan sebagai penurunan fraksional dalam intensitas cahaya I dari suatu gelombang per satuan jarak sepanjang propagasi Z .

$$\alpha = -\frac{dI}{dz} \quad (2.7)$$

Jika intensitas berkurang, $\frac{dI}{dz}$ akan bernilai negatif dan koefisien atenuasi akan bernilai positif. Jika atenuasi hanya disebabkan oleh absorpsi, maka α disebut dengan koefisien absorpsi (Kasap, 2001).

Reflektivitas (R) adalah properti optik dari suatu material. Ketika cahaya jatuh pada permukaan suatu material (atau batas antara dua media), cahaya tersebut akan kembali ke medium dari mana cahaya itu berasal. Refleksi cahaya bergantung pada sifat-sifat antarmuka seperti indeks bias dan kekasaran permukaan. Reflektansi digunakan untuk secara kuantitatif menggambarkan refleksi cahaya dan didefinisikan sebagai fraksi cahaya yang dipantulkan dibandingkan dengan cahaya yang jatuh pada antarmuka tersebut (Hu et al., 2019).

Konduktivitas optik (σ) adalah karakteristik material yang

menggambarkan hubungan antara densitas arus yang terbentuk di dalam material dan kekuatan medan listrik yang menyebabkan arus tersebut, pada berbagai frekuensi (Schrieffer, 2007). Sedangkan *extinction Coeficient* adalah ukuran yang menggambarkan seberapa efektif suatu zat dalam menyerap atau memantulkan cahaya atau radiasi pada panjang gelombang tertentu. Sifat ini tergantung pada struktur atom dan komposisi kimia dari zat tersebut (Ubi et al., 2022).

Dielektrik (ϵ) adalah material yang memiliki resistivitas listrik yang tinggi. Oleh karena itu, dielektrik yang baik juga merupakan isolator yang baik, tetapi tidak selalu berlaku sebaliknya. Dielektrik digunakan dalam rangkaian arus bolak-balik (AC) untuk melakukan fungsi-fungsi selain isolasi komponen. Struktur dipol listrik (muatan positif dan negatif yang dipisahkan oleh jarak) yang dimiliki dalam medan listrik langsung dan bolak-balik, adalah hal penting untuk memahami sifat dan penggunaannya. Sebuah kapasitor terdiri dari dua pelat konduktor paralel dengan luas A, dipisahkan oleh jarak L oleh ruang vakum (Ohring, 1995).

Dalam penelitian Alsalamah et al. (2023) persamaan yang digunakan untuk menghitung sifat-sifat optik material perovskit dari perhitungan DFT adalah sebagai berikut:

Absorpsi (α)

$$\alpha(\omega) = \left(\frac{\omega}{c}\right) \left(2 \left\{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)\right\}^{\frac{1}{2}} - \epsilon_1^2(\omega)\right)^{\frac{1}{2}} \quad (Arb.Unit) \quad (2.8)$$

Fungsi Kehilangan Elektron (L)

$$L(\omega) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} \quad (2.9)$$

Indeks Bias (n)

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}[\epsilon_1(\omega) + \{\epsilon_1^2(\omega) - \epsilon_2^2(\omega)\}^{\frac{1}{2}}]} \quad (Arb.Units) \quad (2.10)$$

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{4\pi}(\omega\epsilon_0\epsilon_2(\omega)) \quad (S/m) \quad (2.11)$$

$$K(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}[-\varepsilon_1(\omega) + \sqrt{\{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)\}}]} \quad (\text{Arb. Units}) \quad (2.12)$$

$$R(\omega) = \left[\frac{\sqrt{-\varepsilon_1(\omega) - 1 + i\varepsilon_2(\omega)}}{\sqrt{\varepsilon_1(\omega) + 1 + i\varepsilon_2(\omega)}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.13)$$

ω adalah frekuensi foton (Hz) , ε_1 adalah konstanta dielektrik real, dan ε_2 adalah konstanta dielektrik imajiner.

2.1.3 Sifat Mekanis

Modulus Bulk (B) adalah ukuran sejauh mana zat tersebut dapat menahan kompresi yang seragam. Modulus ini didefinisikan sebagai perbandingan antara perubahan tekanan terhadap perubahan volume relatif yang dihasilkannya (Capuano et al., 2017). Modulus Young (E) adalah parameter material yang menjelaskan hubungan antara peregangan material (tanpa satuan), atau regangan (ϵ), dan tegangan (gaya per unit area) (σ). Biasanya, modulus Young digambarkan dengan hubungan linier $E = \frac{\sigma}{\epsilon}$, terutama pada regangan yang rendah, dan diukur dalam satuan Pascal (Pa) atau N/m^2 (Vincent & Engler, 2011). Modulus geser (G) adalah ukuran bagaimana material bereaksi terhadap deformasi geser. Modulus ini adalah rasio antara tegangan geser dan regangan geser. Sifat ini penting karena menunjukkan seberapa tahan suatu material terhadap deformasi geser. Material yang sangat tahan terhadap geseran akan dapat mentransmisikan energi geser dengan cepat (Rajput & Thakur, 2016). Rasio Poisson (ν) menunjukkan hubungan antara regangan ($\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0}$) dari suatu material ke arah transversal (ϵ_t) dan arah longitudinal (ϵ_L) ketika sampel tersebut dikenakan tegangan atau kompresi. Nilai ν pada rentang 0-0,26 material akan bersifat getas atau mudah patah sedangkan jika nilai $\nu > 0,26$ maka material tersebut akan bersifat daktail (Kojima, 2024) . Rasio Poisson didefinisikan sebagai:

$$\nu = -\frac{\epsilon_t}{\epsilon_L} \quad (2.14)$$

Dalam pengukuran modulus-modulus tersebut dengan metode

aproksimasi Voigt dan Reuss, nilai modulus ini dapat dicari dengan menggunakan konstanta elastisitas dan dengan formula sebagai berikut:

Voigt Approximation:

$$B_v = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (2.15)$$

$$G_v = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2.16)$$

B adalah modulus *Bulk* (GPa), G adalah modulus geser (GPa), E adalah modulus elastisitas (GPa) dan ν adalah rasio *poisson*. C_{11} , C_{12} , dan C_{44} adalah komponen-komponen dari tensor kekakuan (*stiffness tensor*) yang menggambarkan hubungan antara tegangan dan regangan pada material (Alam et al., 2024). C_{11} , merupakan komponen kekakuan yang mengukur respons material terhadap tegangan normal pada arah x (sering disebut sebagai arah utama). C_{12} merupakan komponen kekakuan yang menggambarkan hubungan antara tegangan normal pada satu arah (misalnya arah x) dan regangan normal pada arah lainnya (misalnya arah y). C_{44} merupakan komponen yang menggambarkan respons material terhadap tegangan geser (*shear stress*) dalam arah tertentu.

Reuss Approximation:

$$B_R = B_v \quad (2.17)$$

$$G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (2.18)$$

Voigt-Reuss-Hill Average of the two approximations:

$$B = \frac{B_R + B_V}{2} \quad (2.19)$$

$$G = B = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (2.20)$$

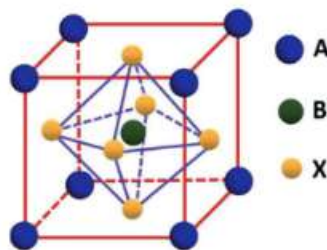
Dengan modulus-modulus ini, kita dapat menghitung modulus Young dan rasio Poisson untuk kedua aproksimasi

$$E = \frac{9B_v G_v}{3B_v + G_v} \quad (2.21)$$

$$\nu = \frac{3B_v - 2G_v}{2(3B_v + G_v)} \quad (2.22)$$

2.1.4 Perovskit

Struktur paling sederhana dari kristal perovskit adalah *simple cubic cell* dengan rumus kimia ABX_3 per satuan sel (Roth, 1957). Struktur kristal ini memiliki *corner-sharing* dengan A dan B adalah kation dan X anion (Akkerman & Manna, 2020). Unsur A biasanya merupakan kation dari material logam alkali tanah atau bahkan logam tanah jarang, unsur B biasanya adalah logam transisi dan X adalah anion yang merupakan ion halida atau oksida. Untuk menjaga netralitas muatan, muatan total ion A dan B harus sama dengan muatan total ion X (Ahmed, 2021).



Gambar 2.1: Struktur Perovskit Kubik

Sumber: P. A. Sechenykh, 2023

Perovskit pertama kali ditemukan oleh mineralog Prussia, Gustav Rose pada tahun 1839 dan diberi nama sesuai dengan nama ahli mineral terkenal Rusia Count Lev A. Perovsky (Jena et al., 2019). Kerangka struktur perovskit memiliki beragam kemampuan dan sifat fisik yang luar biasa, termasuk ferroelektrisitas, sifat magnetik, multiferroisitas, superkonduktivitas, karakteristik semikonduktor, serta keunggulan dalam aplikasi optoelektronik (Dhole et al., 2022). Walaupun perovskit jarang

ditemukan secara alami, material ini dapat disintesis menggunakan hampir seluruh unsur dalam tabel periodik yang mudah diperoleh. Selain itu, perovskit juga dapat ditemukan dalam berbagai rumus kimia kompleks, seperti logam MgNiC_3 (Akkerman & Manna, 2020). Dengan memanfaatkan material perovskit halida organik dan anorganik, performa sel surya dapat ditingkatkan hingga melampaui efisiensi maksimal material semikonduktor seperti CdTe dan CIGS (*Copper Indium Gallium Selenide*) (Jena et al., 2019). Namun, perovskit halida organik cenderung kurang stabil dalam kondisi atmosfer, terutama karena pengaruh kelembapan serta interaksi dengan cahaya yang kemudian berlanjut dengan reaksi material terhadap oksigen. Sebaliknya, perovskit halida anorganik umumnya memiliki stabilitas yang lebih tinggi dibandingkan material organik atau hibrida, sehingga lebih tahan terhadap kondisi atmosfer (Alsalamah et al., 2023).

Kristal perovskit umumnya dibagi menjadi 2 kelas yaitu perovskit inorganik oksida dan perovskit halida. Perovskit inorganik dibagi lagi menjadi perovskit intrinsik dan doping. Perovskit intrinsik memiliki *power conversion efficiency* (PCE) yang tinggi dibandingkan dengan jenis lainnya, sedangkan perovskit doping, dengan menggunakan penambahan timbal atau halida, nilai efisiensi konversi energi yang dimiliki material tersebut akan meningkat bersamaan dengan stabilitas material sehingga, batas absorpsi panjang gelombang dari material dapat ditingkatkan. Di sisi lain, jenis perovskit halida dibagi lagi menjadi dua yaitu perovskit alkali halida yang memiliki nilai *energy loss* yang rendah serta celah pita yang lebih luas, dan perovskit organomaterial yang mampu memberikan *carrier mobility* dan PCE yang lebih tinggi pada alat optoelektronik (Sahoo et al., 2018).

Perovskit Logam Halida atau *Metal Halide Perovskite* (MHP) adalah material kristal yang terdiri dari logam (metal) dan halida yang membentuk struktur perovskit. Struktur perovskit merupakan struktur kristal *corner-sharing* dengan stoikiometri umum ABX_3 (atau yang setara) (Akkerman &

Manna, 2020). MHP umumnya dibagi menjadi 2 berdasarkan motif struktur kristal yaitu struktur 3D dan 2D (berlapis) perovskit. Struktur 3D perovskit memiliki formula umum AMX_3 sedangkan struktur 2D memiliki formula A_2MX_4 dimana M adalah logam divalensi seperti Pb atau Sn, X adalah halida (Cl, Br, atau I), dan A adalah kation yang dapat berupa inorganik ataupun organik (Ha et al., 2017).

Logam halida perovskit menjadi terkenal karena penerapannya di sel surya, laser, *light emitting diode* (LED), *water splitting*, pendingin laser, dan lain-lain. Material ini sangat cocok digunakan sebagai dalam alat opto-elektronik karena memiliki performa yang tinggi, melimpah, dan murah. Efisiensi dari sel surya naik hingga 20% sejak timbal halida perovskit digunakan oleh Miyasaka pada tahun 2009 (Ha et al., 2017). Logam-halida perovskit memiliki keunggulan berupa kemudahan sintesis, biaya produksi yang rendah, serta sifat optik dan elektronik yang dapat diatur sesuai kebutuhan (Dong et al., 2023). Sebagian besar penelitian mengenai material ini berfokus pada varian berbasis timbal (Pb), seperti $CsPbX_3$, $MAPbX_3$, dan $FAPbX_3$. Namun, penggunaan timbal menimbulkan resiko signifikan terhadap lingkungan dan kesehatan manusia. Timbal merupakan logam berat dengan tingkat toksisitas tinggi yang dapat memicu gangguan neurologis, kelainan fisik, gangguan otot, masalah genetik, serta dampak akut seperti muntah, dehidrasi, kantuk, mual, gagal ginjal, dan nyeri perut (Collin et al., 2022). Selain itu, timbal juga dapat menghambat pertumbuhan tanaman, seperti memperlambat perkembangan akar, menyebabkan tanaman kerdil, merusak sistem akar, dan memicu kekurangan klorofil (klorosis) (Hadi & Aziz, 2015). Oleh karena itu, penelitian terhadap material perovskit bebas timbal menjadi penting untuk mengurangi penggunaan timbal.

Penelitian menunjukkan bahwa variasi anion dalam perovskit logam-halida sering digunakan untuk mengatur sifat dan struktur material sesuai kebutuhan. Menurut Steele et al. (2020), perubahan jenis anion

dapat memengaruhi struktur kristal, celah pita energi (*bandgap*), serta stabilitas material perovskit halida timbal. Jari-jari ion penyusun material juga memainkan peran penting dalam menentukan geometri dan stabilitasnya. Melalui pertukaran anion, berbagai struktur dan sifat baru dapat dihasilkan, termasuk sifat fisik dan optik yang beragam. Teknik ini memberikan fleksibilitas tinggi dalam mengoptimalkan sifat optik dan elektronik material tanpa perlu mengubah prosedur sintesis awal.

Material perovskit KMnF_3 adalah salah satu kandidat menarik dalam aplikasi optoelektronik karena menunjukkan sifat yang mendukung kinerja tinggi sekaligus stabilitas yang baik. Material ini memiliki *bandgap* sekitar 2,68 eV yang membuatnya bersifat semikonduktor (Ricci et al., 2017). Selain itu, material ini terbukti stabil terhadap kelembapan dan mempertahankan fase kristalnya selama 12 jam dalam kondisi perendaman air. Keunggulan stabilitas kimia material ini disebabkan oleh perbedaan besar dalam keelektronegatifan antara ion-ion pembentuknya, yaitu K, Mn, dan F. Perbedaan ini menciptakan ikatan yang kuat dalam struktur ABX_3 , yang mendukung kestabilan termal dan lingkungan (R. T. Wang et al., 2019). Unsur K, Mn dan F secara berturut-turut memiliki nilai elektronegatifan sebesar 0,82; 1,55 dan 3,98. Perbedaan nilai elektronegatifan F yang bahkan lebih besar dari kali nilai elektronegatifan K dan Mn mendukung kestabilan termal dan lingkungan. Sebagai variasi, unsur Cl, Br, dan I juga memiliki nilai elektronegatifan yang cukup tinggi yaitu 3,16; 2,96 dan 2,66.

2.1.5 Density Functional Theory(DFT)

Density Functional Theory (DFT) adalah metode komputasi yang digunakan dalam kimia kuantum, fisika material, dan ilmu material untuk menghitung struktur elektron dari sistem banyak partikel. DFT mampu melakukan perhitungan dalam skala atomistik dan memperhitungkan sifat material berdasarkan interaksi antara inti dan elektron-elektronnya. Dalam DFT, energi total sistem dihitung sebagai fungsi dari densitas elektron, dan

persamaan Kohn-Sham digunakan untuk mengaproksimasi masalah banyak partikel menjadi sistem non-interaksi yang lebih sederhana (Hung et al., 2023). Metode ini sangat berguna dalam prediksi sifat elektronik, struktur kristal, dan reaktivitas kimia material, serta menjadi alat penting dalam desain material.

Pada 1964-1965, Hohenberg, Kohn, dan Sham memperkenalkan Teori Fungsi Kerapatan (DFT). DFT kini menjadi dasar dalam mempelajari struktur materi terkondensasi. Teori DFT dari Kohn-Sham membangun sistem tambahan untuk menghitung kerapatan dan energi total dari sistem interaksi secara akurat. Fokus DFT terletak pada sifat-sifat tertentu, seperti kerapatan dan energi keadaan dasar. Di dalam DFT terdapat fungsi pertukaran-korelasi yang menggabungkan efek pertukaran dan korelasi sehingga mampu melakukan pendekatan kerapatan lokal dan gradien umum, menggunakan informasi dari perhitungan gas elektron dan telah memicu banyak penelitian untuk mengembangkan fungsi yang lebih baik (M.Martin, 2016).

Persamaan **Kohn-Sham** sebagai berikut:

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + \mathcal{V}_{\text{ef}}[n(\mathbf{r})] \right\} \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (2.23)$$

di mana potensial efektif $\mathcal{V}_{\text{ef}}[n(\mathbf{r})]$ diberikan oleh

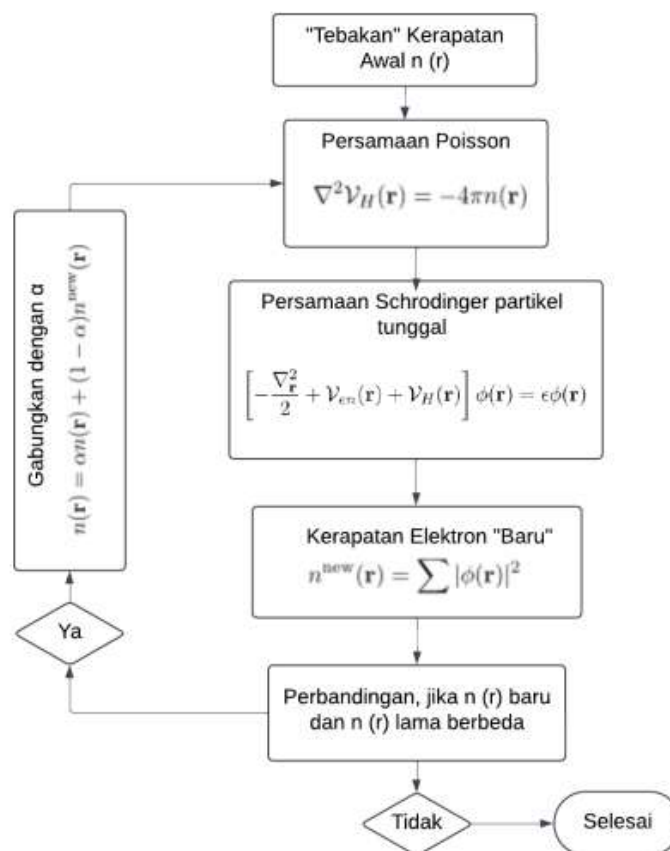
$$\mathcal{V}_{\text{ef}}[n(\mathbf{r})] = \mathcal{V}_{\text{en}}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta \mathcal{E}_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}, \quad (2.24)$$

dengan:

∇^2 adalah operator Laplace, $\phi_i(\mathbf{r})$ adalah fungsi orbital Kohn-Sham ke- i , ϵ_i adalah energi orbital ke- i dalam satuan *atomic unit* (a.u), $\mathcal{V}_{\text{en}}(\mathbf{r})$ adalah potensial eksternal yang berasal dari inti (ion), suku kedua merupakan potensial Hartree \mathcal{V}_H yang merepresentasikan interaksi Coulomb klasik antar elektron,

Dalam perhitungan dengan DFT, terdapat metode iteratif SCF

(Self-Consistent Field) yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger elektron secara pendekatan. Metode ini bertujuan menemukan fungsi gelombang elektron yang konsisten dengan medan listrik yang dihasilkannya sendiri. Proses SCF dimulai dengan membuat tebakan awal terhadap fungsi gelombang atau kepadatan elektron, kemudian menghitung medan listrik yang dihasilkan berdasarkan tebakan tersebut. Setelah itu, persamaan Schrödinger diselesaikan menggunakan medan listrik tersebut untuk mendapatkan fungsi gelombang baru. Fungsi gelombang atau kepadatan elektron ini kemudian diperbarui dan proses diulang hingga konvergen, yaitu ketika perubahan antar iterasi menjadi sangat kecil. Metode SCF menjadi dasar bagi pendekatan seperti Hartree-Fock dan Kohn-Sham DFT yang sering digunakan dalam simulasi molekul dan material (Sun et al., 2020)



Gambar 2.2: Flow-chart Perhitungan Self-Consistent Field (SCF)

Sumber: Diolah oleh peneliti berdasarkan data dari Nguyen et al., 2023

2.2 Hasil Penelitian Terdahulu

Referensi yang digunakan dalam penelitian ini antara lain:

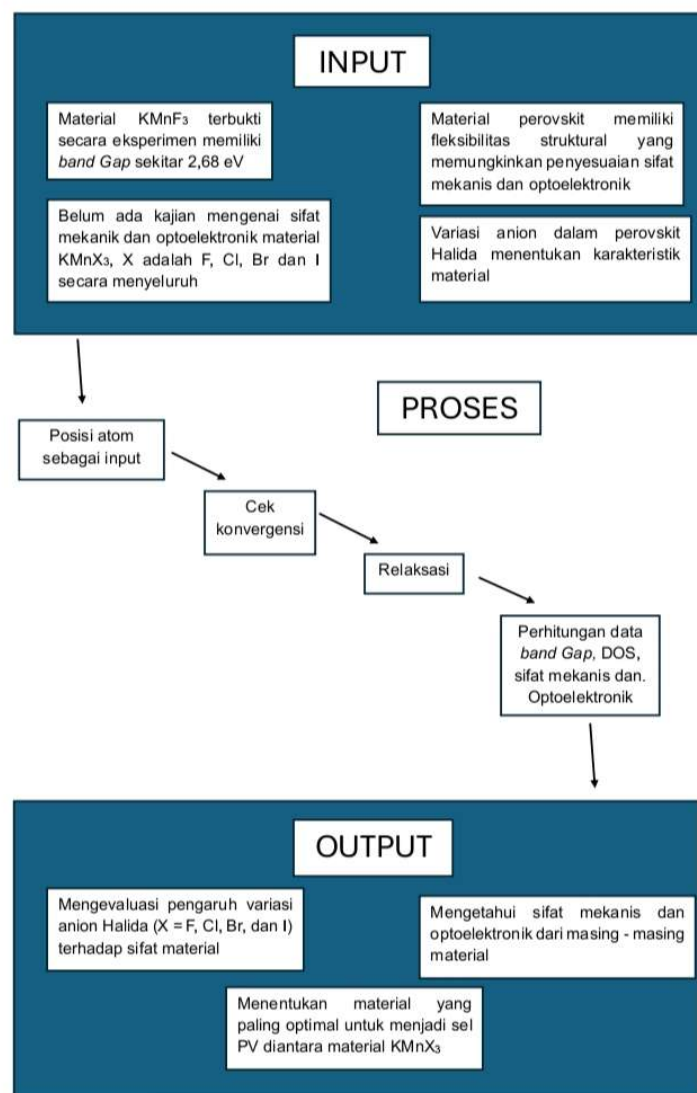
Tabel 2.1: Penelitian Terdahulu

No	Peneliti	Judul Penelitian	Persamaan	Perbedaan
1	Ryan Taoran Wang, Edward Guangqing Tai, Jason Yuanzhe Chen, Gu Xu, Ray LaPierre, Nebile Isik Goktas dan Nanxing Hu pada tahun 2019	A KMnF_3 perovskite structure with improved stability, low bandgap and high transport properties	Mengidentifikasi struktur elektronik dan optoelektronik material KMnF_3	Penelitian tersebut tidak melakukan perhitungan mengenai sifat optoelektronik seperti konstanta dielektrik, konduktivitas (σ), fungsi kehilangan elektron (L), koefisien ekstinsi (K), indeks bias (n), dan reflektivitas (R) serta sifat mekanis seperti modulus <i>Bulk</i> , <i>Young</i> dan geser pada perovskit KMnF_3
2	Ibtihal M. Alsalamah, Amiruddin Shaari, Norah A.M. Alsaif, Shehu Aminu Yamusa, G. Lakshminarayana dan Najeh Rekik pada tahun 2023	Exploring the structural properties and the optoelectronic features of RbPbX_3 (X = Cl, F) perovskite crystals for solar cells sollicitations: Showcasing the DFT predictions	Menggunakan metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT) untuk menghitung sifat mekanis dan optoelektronik dengan menggunakan platform Quantum ESPRESSO	Material yang digunakan pada penelitian ini adalah RbPbCl_3
3	Md. Khairul Alam, Md. Nadim Mahamud Nobin dan Md. Lokman Ali pada tahun 2024	Pressure-induced Tuning of Physical Properties in High-throughput Metal Halide MSn_2Br_5 (M = K, Cs) Perovskites for Optoelectronic Applications	Mengidentifikasi modulus elastisitas, bulk modulus, dan rasio Poisson pada material perovskit halida menggunakan metode <i>Voigt–Reuss–Hill averaging technique</i> serta mengamati sifat opto elektronik konstanta dielektrik, konduktivitas (σ), fungsi kehilangan elektron (L), koefisien ekstinsi (K), indeks bias (n), dan reflektivitas (R)	Penelitian ini menggunakan material MSn_2Br_5 dimana M = K, Cs

Selain yang telah tercantum pada tabel di atas, keterbaharuan dari penelitian ini juga mencakup karakterisasi material KMnCl_3 , KMnBr_3 , dan KMnI_3 dalam struktur kristal kubik, yang hingga saat ini belum banyak dilaporkan dalam literatur

2.3 Kerangka Berpikir

Penelitian ini bertujuan untuk melakukan karakterisasi material perovskit KMn_3 dengan menggunakan metode *Density Fuctional Theory* (DFT).



Gambar 2.3: Kerangka Berpikir

Sumber: diolah oleh peneliti.

2.4 Hipotesis

- a. Variasi anion halida ($X = \text{F, Cl, Br, I}$) pada material KMnX_3 memengaruhi sifat mekanis, termasuk modulus elastisitas, bulk modulus, shear modulus, dan rasio Poisson.
- b. Variasi anion halida juga memengaruhi sifat optoelektronik, seperti energi gap elektronik, indeks bias, dan spektrum absorpsi optik.
- c. KMnX_3 dengan variasi anion tertentu memiliki sifat mekanis dan optoelektronik yang optimal untuk aplikasi energi terbarukan.