



**UNIVERSITAS PERTAHANAN RI**

**SIFAT MEKANIS DAN OPTOELEKTRONIK PEROVSKIT  
KUBIK  $KM_nX_3$ ,  $X = F, Cl, Br, I$  DENGAN *DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY (DFT)***

**AURA MONALISA RAHMAN**

**320210304006**

**Skripsi yang Ditulis untuk Memenuhi Sebagian Persyaratan dalam  
Mendapatkan Gelar Sarjana**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM MILITER  
PROGRAM STUDI FISIKA**

**BOGOR 2025**



**UNIVERSITAS PERTAHANAN RI**

**SIFAT MEKANIS DAN OPTOELEKTRONIK PEROVSKIT  
KUBIK  $KM_nX_3$ ,  $X = F, Cl, Br, I$  DENGAN *DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY (DFT)***

**AURA MONALISA RAHMAN**

**320210304006**

**Skripsi yang Ditulis untuk Memenuhi Sebagian Persyaratan dalam  
Mendapatkan Gelar Sarjana**

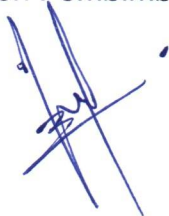
**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM MILITER  
PROGRAM STUDI FISIKA**

**BOGOR 2025**

## LEMBAR PERSETUJUAN SKRIPSI

Nama : Aura Monalisa Rahman  
NIM : 320210304006  
Program Studi : Fisika  
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Judul : Sifat Mekanis dan Optoelektronik Perovskit Kubik  $KMnX_3$ ,  $X=F, Cl, Br, I$  dengan *Density Functional Theory* (DFT)

Dosen Pembimbing I



Khazali Fahmi, S.Pd., M.Si.  
NIP. 199208142022031002  
Tanggal: 6 Agustus 2025

Dosen Pembimbing II



Dr. Nadya Amalia, S.Si., M.Si.  
NIP. 199101132020122006  
Tanggal: 6 Agustus 2025

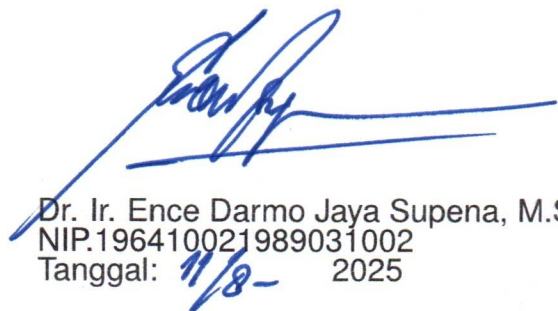
Mengetahui,

Kepala Program Studi Fisika



M. Zuhnr Piliang., S.Si., M.Eng.  
Kolonel Tek. NRP. 522657  
Tanggal: 7 Agustus 2025




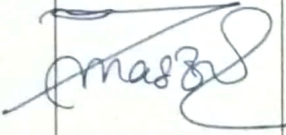
Dekan Fakultas Matematika dan  
Ilmu Pengetahuan Alam Militer



Dr. Ir. Ence Darmo Jaya Supena, M.Si.  
NIP. 196410021989031002  
Tanggal: 11/8- 2025

## LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

Nama : Aura Monalisa Rahman  
NIM : 320210304006  
Program Studi : Fisika  
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Judul : Sifat Mekanis dan Optoelektronik Perovskit Kubik  $\text{KMnX}_3$ ,  $X=\text{F, Cl, Br, I}$  dengan *Density Functional Theory* (DFT)

No	Nama	Tanda Tangan	Tanggal
1	<b>Dosen Pembimbing I:</b> Khazali Fahmi, S.Pd., M.Si. Penata Tingkat III/c NIP. 199208142022031002		06/25 /08
2	<b>Dosen Pembimbing II:</b> Dr. Nadya Amalia, S.Si., M.Si. Penata Tingkat I / III d NIP. 199101132020122006		06/25 /08
3	<b>Dosen Penguji I:</b> Diyana Parwatiningtyas, S.Si., M.T., M.Sc. Penata Tingkat I / III b NIP. 197801222024212001		06/25 /08
4	<b>Dosen Penguji II:</b> Imastuti, S.Pd., M.Han. NUPTK. 2033772673230323		06/25 /08-25

## PERNYATAAN ORISINALITAS

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya atau bagian karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan jenjang apapun di suatu Perguruan Tinggi; dan sepanjang sepengetahuan saya juga tidak terdapat istilah, frasa, kalimat, paragraph, subbab atau bab dari karya yang pernah ditulis atau diterbitkan; kecuali yang secara tertulis diajukan dalam naskah ini dan disebutkan dalam Daftar Referensi.

Apabila di kemudian hari terbukti bahwa terdapat plagiat dalam skripsi ini, saya bersedia menerima sanksi sesuai ketentuan peraturan/undang-undang yang berlaku.

Bogor, 11 Agustus 2025



Aura Monalisa Rahman

**SURAT PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH  
UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Yang bertanda tangan di bawah ini, saya :

Nama : Aura Monalisa Rahman

NIM : 320210304006

Perguruan Tinggi : Universitas Pertahanan Republik Indonesia

Alamat Kampus : Kawasan IPSC Sentul, Sukahati, Kec. Citeureup,  
Kabupaten Bogor, Jawa Barat 16810

Alamat Rumah : Desa Margo Mulyo, RT 016 / RW 005, Kecamatan  
Tumijajar, Kabupaten Tulang Bawang, Provinsi  
Lampung

Dengan ini menyetujui untuk memberikan ijin kepada pihak **Universitas Pertahanan Republik Indonesia**, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif (*Non-exclusive Royalti-Free Right*) atas karya ilmiah kami yang berjudul: "**Sifat Mekanis dan Optoelektronik Perovskit Kubik  $KMnX_3$ ,  $X=F, Cl, Br, I$  dengan *Density Functional Theory* (DFT)**", beserta perangkat yang diperlukan (apabila ada).

Dengan **Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif** ini pihak **Universitas Pertahanan Republik Indonesia** berhak menyimpan, mengalih-media atau format-kan, mengelolanya dalam pangkalan data (*database*), mendistribusikannya dan menampilkan atau mempublikasikannya di *internet* atau media lain untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari kami selama tetap mencantumkan nama kami sebagai penulis/pencipta karya ilmiah tersebut.

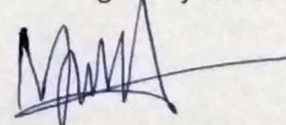
Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak **Universitas Pertahanan Republik Indonesia**, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Bogor

Pada tanggal : 15 Juli 2025

Yang menyatakan,



**Aura Monalisa Rahman**

## KATA PENGANTAR

Puji Syukur atas kehadiran Tuhan Yang Maha Esa, karena berkat Rahmat dan karunia-Nya, penulisan skripsi dengan judul “Sifat Mekanis dan Optoelektronik Perovskit Kubik  $\text{KMnX}_3$ ,  $X=\text{F, Cl, Br, I}$  Dengan *Density Functional Theory* (DFT) ” dapat diselesaikan.

Penyusunan skripsi ini ditujukan sebagai salah satu syarat dalam memperoleh gelar sarjana pada Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Militer Universitas Pertahanan RI. Penyusunan skripsi ini dapat selesai berkat bantuan dan dukungan dari berbagai pihak baik secara langsung maupun tidak langsung. Untuk itu pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terima kasih kepada :

1. Letnan Jenderal TNI (Purn.) Dr. Anton Nugroho, M.MDS., M.A. selaku Rektor Universitas Pertahanan Republik Indonesia yang telah memberikan fasilitas yang lengkap, menciptakan lingkungan akademik yang kondusif dan mendukung pengembangan ilmu pengetahuan serta kemampuan penulis selama menempuh pendidikan di universitas ini.
2. Dr. Ir. Ence Darmo Jaya Supena, M.Si. selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam yang telah memfasilitasi perizinan, serta menyediakan sarana dan prasarana yang sangat membantu selama proses penyusunan skripsi ini.
3. M. Zuhnr P., S.Si., M.Eng selaku Kaprodi Fisika yang selalu mendorong mahasiswa Fisika untuk berkembang lebih jauh dalam pendidikan.
4. Khazali Fahmi, S.Pd, M.Si sebagai dosen pembimbing I penulis, karena atas bimbingan serta arahan sehingga penelitian dan penulisan skripsi ini dapat berjalan dengan baik.
5. Dr. Nadya Amalia, S.Si, M.Si sebagai dosen pembimbing II penulis, atas bimbingan dan arahan sehingga hingga penulisan skripsi ini dapat diselesaikan.
6. Diyan Parwatiningsyas, S.Si., M.T., M.Sc. dan Imastuti, S.Pd., M.Han.

sebagai dosen penguji I dan II, atas bimbingan dan masukan sehingga hingga penulisan skripsi ini dapat menjadi lebih baik.

7. Dosen dan staf Program Studi Fisika yang telah memberikan ilmu, pengalaman, serta bantuan dalam menjalani keseharian di kampus UNHAN RI.
8. Suparjiyem dan Abdul Rahman, selaku orang tua penulis yang selalu memberikan nasihat dan doa-doa yang tiada henti.
9. Wisnu Murti Khalifaturrahman selaku kakak kandung yang senantiasa membantu secara materil dan non-materil penulis selama pembuatan skripsi ini.

Semoga Tuhan Yang Maha Esa membalas kebaikan pihak-pihak tersebut. Saya menyadari bahwa skripsi ini masih kurang sempurna, oleh karena itu dengan kerendahan hati mengharapkan kritik dan saran yang konstruktif demi kesempurnaan skripsi ini. Akhir kata, semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat terhadap pengembangan ilmu dan berguna bagi *stakeholder* terkait dalam upaya memajukan teknologi dan ilmu pengetahuan di bidang industri pertahanan nasional dan menuju universitas berkelas dunia.

Bogor, 15 Juli 2025

Aura Monalisa Rahman

## ABSTRAK

### SIFAT MEKANIS DAN OPTOELEKTRONIK PEROVSKIT KUBIK $\text{KMnX}_3$ , $X = \text{F, Cl, Br, I}$ DENGAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)

Peningkatan kebutuhan energi ramah lingkungan mendorong eksplorasi material baru untuk aplikasi energi terbarukan. Perovskit halida merupakan kandidat material bebas timbal  $\text{KMnX}_3$  ( $X = \text{F, Cl, Br, I}$ ) yang berpotensi dalam perangkat optoelektronik dan fotovoltaik. Penelitian ini mengkaji sifat mekanis dan optik  $\text{KMnX}_3$ , serta menilai pengaruh variasi anion halida terhadap kestabilan struktur dan performa optiknya. Simulasi dilakukan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) dengan pendekatan *generalized gradient approximation plus Hubbard U* (GGA+U) berbasis perangkat Quantum ESPRESSO. Hasil menunjukkan bahwa  $\text{KMnF}_3$  memiliki stabilitas mekanik tertinggi dengan nilai modulus *bulk*, Young dan geser berturut-turut 60,057 GPa, 71,762 GPa dan 27,586 GPa. Rasio Poisson mengindikasikan sifat daktail. Sebaliknya,  $\text{KMnBr}_3$  menunjukkan kekakuan tertinggi serta respon optik paling kuat di daerah tampak dan infra merah dengan koefisien absorpsi mendekati 1. Selain itu,  $\text{KMnBr}_3$  dan  $\text{KMnI}_3$  memiliki *band gap* sempit masing-masing 1,3 eV dan 0 eV untuk *spin up* serta 3,2 eV dan 1,7 eV untuk *spin down* yang mendukung penyerapan cahaya pada energi rendah. Variasi anion halida memengaruhi sifat material secara signifikan. Peningkatan massa atom anion menyebabkan penurunan band gap dan modulus elastisitas sekaligus meningkatkan kemampuan absorpsi cahaya. Berdasarkan kombinasi kestabilan struktur dan performa optik,  $\text{KMnBr}_3$  dinilai paling optimal untuk aplikasi energi terbarukan.

**Kata kunci :**  $\text{KMnX}_3$ , perovskit halida, *density functional theory*, sifat mekanis, sifat optik energi terbarukan

## ABSTRACT

### **MECHANICAL AND OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF CUBIC PEROVSKITE $\text{KMnX}_3$ , $X = \text{F, Cl, Br, I}$ USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)**

*The growing demand for environmentally friendly energy drives the exploration of new materials for renewable energy applications. Lead-free halide perovskites  $\text{KMnX}_3$  ( $X = \text{F, Cl, Br, I}$ ) are promising candidates for optoelectronic and photovoltaic devices. This study investigates the mechanical and optical properties of  $\text{KMnX}_3$  and evaluates the influence of halide anion variation on structural stability and optical performance. Simulations were performed using density functional theory (DFT) with the generalized gradient approximation plus Hubbard  $U$  (GGA+ $U$ ) implemented in the Quantum ESPRESSO package. The results show that  $\text{KMnF}_3$  exhibits the highest mechanical stability with bulk, Young's, and shear moduli of 60.057 GPa, 71.762 GPa, and 27.586 GPa respectively. The Poisson's ratio indicates ductile behavior. In contrast,  $\text{KMnBr}_3$  exhibits high rigidity along with the strongest optical response in the visible and infrared regions with an absorption coefficient approaching 1. Moreover,  $\text{KMnBr}_3$  and  $\text{KMnI}_3$  possess narrow band gaps measured at 1.3 eV and 0 eV for spin-up and 3.2 eV and 1.7 eV for spin-down states which enhance low-energy light absorption. Halide anion variation significantly affects material properties. Increasing the atomic mass of the halide reduces both the band gap and elastic modulus while improving light absorption capability. Among the materials studied,  $\text{KMnBr}_3$  offers the most balanced combination of structural stability and optical performance which makes it the most promising candidate for renewable energy applications.*

**Keywords:**  $\text{KMnX}_3$  , halide perovskite, density functional theory, mechanical properties, optical properties, renewable energy

## DAFTAR ISI

SAMPUL DEPAN .....	i
HALAMAN JUDUL .....	ii
LEMBAR PERSETUJUAN SKRIPSI .....	iii
LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI .....	iv
PERNYATAAN ORISINALITAS .....	v
SURAT PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH .....	vi
KATA PENGANTAR .....	vii
ABSTRAK (Bahasa Indonesia) .....	ix
ABSTRACT (Bahasa Inggris) .....	x
DAFTAR ISI .....	xi
DAFTAR GAMBAR .....	xii
DAFTAR TABEL .....	xiii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian .....	4
1.4 Manfaat .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....	5
2.1 Landasan Teori .....	5
2.2 Hasil Penelitian Terdahulu .....	19
2.3 Kerangka Berpikir .....	20
2.4 Hipotesis .....	21
BAB III METODOLOGI PENELITIAN .....	22
3.1 Metode dan Desain Penelitian .....	22
3.2 Tempat Dan Waktu Penelitian .....	22
3.3 Alat dan Bahan .....	23
3.4 Variabel Penelitian .....	24
3.5 Prosedur Penelitian .....	25
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	29
4.1 Cek Konvergensi .....	29
4.2 Optimasi Struktur .....	30
4.3 Sifat Elektronik .....	32
4.4 Sifat Optik .....	39
4.5 Sifat Mekanis .....	45
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN .....	49
5.1 Kesimpulan .....	49
5.2 Saran .....	51
DAFTAR PUSTAKA .....	51
LAMPIRAN 1 .....	58
LAMPIRAN 2 .....	65

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Perovskit Kubik .....	12
Gambar 2.2 <i>Flow-chart</i> Perhitungan <i>Self-Consistent Field</i> (SCF) ..	18
Gambar 2.3 Kerangka Berpikir .....	20
Gambar 3.1 Prosedur Penelitian .....	25
Gambar 4.1 Struktur Perovskit $\text{KMnF}_3$ .....	30
Gambar 4.2 <i>Bands Structure Spin Up</i> dan DOS $\text{KMnF}_3$ .....	33
Gambar 4.3 <i>Bands Structure Spin Down</i> dan DOS $\text{KMnF}_3$ .....	33
Gambar 4.4 <i>Bands Structure Spin Up</i> dan DOS $\text{KMnCl}_3$ .....	33
Gambar 4.5 <i>Bands Structure Spin Down</i> dan DOS $\text{KMnCl}_3$ .....	34
Gambar 4.6 <i>Bands Structure Spin Up</i> dan DOS $\text{KMnBr}_3$ .....	34
Gambar 4.7 <i>Bands Structure Spin Down</i> dan DOS $\text{KMnBr}_3$ .....	34
Gambar 4.8 <i>Bands Structure Spin Up</i> dan DOS $\text{KMnI}_3$ .....	35
Gambar 4.9 <i>Bands Structure Spin Down</i> dan DOS $\text{KMnI}_3$ .....	35
Gambar 4.10 <i>Projected Density of States</i> (PDOS) untuk $\text{KMnF}_3$ : (a) <i>Spin Up</i> dan (b) <i>Spin Down</i> .....	35
Gambar 4.11 <i>Projected Density of States</i> (PDOS) untuk $\text{KMnCl}_3$ : (a) <i>Spin Up</i> dan (b) <i>Spin Down</i> .....	36
Gambar 4.12 <i>Projected Density of States</i> (PDOS) untuk $\text{KMnBr}_3$ : (a) <i>Spin Up</i> dan (b) <i>Spin Down</i> .....	37
Gambar 4.13 <i>Projected Density of States</i> (PDOS) untuk $\text{KMnI}_3$ : (a) <i>Spin Up</i> dan (b) <i>Spin Down</i> .....	37
Gambar 4.14 Konstanta Dielektrik <i>Real</i> ( $\epsilon_1$ ) dan <i>Imaginer</i> ( $\epsilon_2$ ) untuk: (a) $\text{KMnF}_3$ , (b) $\text{KMnCl}_3$ , (c) $\text{KMnBr}_3$ , dan (d) $\text{KMnI}_3$ .....	39
Gambar 4.15 Koefisien Absorpsi .....	41
Gambar 4.16 Konduktivitas .....	42
Gambar 4.17 Koefisien Ekstinsi .....	43
Gambar 4.18 Fungsi Kehilangan Elektron .....	44
Gambar 4.19 Indeks Bias .....	44
Gambar 4.20 Reflektivitas .....	45

## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1	Penelitian Terdahulu	19
Tabel 3.1	Jadwal Kegiatan Penelitian Tahun 2025	23
Tabel 4.1	Hasil Cek Konvergensi	29
Tabel 4.2	Hasil Optimasi Struktur	30
Tabel 4.3	<i>Band Gap</i>	32
Tabel 4.4	<i>Stiffness Tensor</i>	45
Tabel 4.5	<i>Sifat Mekanis</i>	46