

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil simulasi dan analisis menggunakan metode Density Functional Theory (DFT) terhadap senyawa perovskit KMnX_3 ($X = \text{F, Cl, Br, I}$), dapat disimpulkan bahwa:

- a. Analisis terhadap parameter optoelektronik seperti *band gap*, konstanta dielektrik, koefisien absorpsi (α), konduktivitas optik (σ), fungsi kehilangan elektron (L), koefisien ekstinsi (K), indeks bias (n), dan reflektivitas (R) menunjukkan bahwa variasi anion halida mempengaruhi secara signifikan sifat optik masing-masing senyawa. KMnF_3 memiliki band gap *spin up* sebesar 2,7 eV dan *spin down* sebesar 5,9 eV, menunjukkan karakter semikonduktor yang lebar. Hal ini mempengaruhi sifat optik KMn_3 yang lebih responsif terhadap rentang energi cahaya yang tinggi seperti ultraviolet. Sementara itu, KMnBr_3 dan KMnI_3 memiliki band gap yang lebih sempit menjadikan keduanya lebih responsif terhadap cahaya di spektrum tampak. Daya absorpsi tinggi serta puncak pada (ϵ_2) dan konduktivitas yang signifikan pada rentang energi rendah menandakan kemampuan kuat dalam penyerapan cahaya dan konversi rentang cahaya tersebut.
- b. Perhitungan sifat mekanis menunjukkan bahwa KMnF_3 memiliki nilai modulus Bulk, modulus Young, dan modulus *shear* tertinggi dibandingkan senyawa lainnya, dengan nilai masing-masing sebesar 60,057 GPa (Bulk), 71,762 GPa (Young), dan 27,586 GPa (*shear*), serta rasio Poisson sebesar 0,305. Hal ini mengindikasikan bahwa KMnF_3 merupakan material yang paling stabil dan tahan terhadap deformasi. Sebaliknya, KMnCl_3

menunjukkan hasil negatif pada modulus *bulk* dan shear, yang menandakan ketidakstabilan mekanis. KMnBr_3 dan KMnI_3 memiliki nilai modulus sedang namun tetap cocok digunakan sebagai material semikonduktor.

- c. Variasi anion halida ($X = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) memberikan pengaruh langsung terhadap kestabilan mekanis dan karakteristik optoelektronik. Seiring bertambahnya ukuran dan massa atom halogen yang digunakan, terjadi penurunan nilai band gap dan kestabilan mekanis. Namun demikian, transisi dari anion(F) ke anion(I) cenderung meningkatkan kemampuan serapan foton dan mempersempit celah pita, menjadikan senyawa seperti KMnBr_3 dan KMnI_3 lebih cocok untuk aplikasi optoelektronik. Hal ini membuktikan bahwa variasi anion menjadi kunci penting dalam rekayasa sifat material berbasis perovskit. Senyawa KMnBr_3 dan KMnI_3 dapat digunakan sebagai material yang berpotensi dalam aplikasi perangkat energi terbarukan karena memiliki band gap yang sesuai dan daya absorpsi cahaya tinggi. Kedua material ini mampu mendukung pengembangan teknologi energi terbarukan yang efisien, murah, dan ramah lingkungan, serta dapat berkontribusi dalam memperkuat ketahanan energi nasional.

5.2 Saran

Untuk penelitian selanjutnya, disarankan melakukan optimasi terhadap parameter optik dalam perhitungan menggunakan *epsilon.x*, khususnya nilai *intersmear*, guna mengurangi noise pada fungsi dielektrik dan meningkatkan ketajaman fitur optik yang diperoleh. Pemilihan nilai *intersmear* yang lebih tepat sangat penting untuk memperoleh representasi yang akurat terhadap transisi elektronik antar pita. Selain itu, disarankan untuk mengeksplorasi struktur kristal KMnX_3 dalam bentuk selain kubik, seperti ortorombik, tetragonal, monoklinik dan lain-lain untuk mengevaluasi kemungkinan fasa yang lebih stabil serta memahami pengaruh simetri kristal terhadap sifat mekanik, elektronik, dan optik material tersebut.