



PEMODELAN GENERASI HARMONIK KRISTAL PEROVSKITE METILAMMONIUM TIMBAL IODIDA (MAPbI_3) MENGGUNAKAN MODEL IKAT HIPERPOLARISABILITAS PADA SEMBARANG SUDUT POLARISASI CAHAYA

INDRA RAMDHANI



**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2022**

- 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 mengumumkannya 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 Pemodelan Generasi Harmonik Kristal Perovskite Methyllummonium Timbal Iodida (MAPbI₃) Menggunakan Model Ikat Hiper polarisabilitas Pada Sembarang Sudut Polarisasi Cahaya adalah benar karya saya dengan arahan dari komisi pembimbingan dan belum diajukan dalam bentuk apapun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain yang telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian skripsi ini.

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

Bogor, Juni 2022

Indra Ramdhani
NIM G74160031

- 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.

ABSTRAK

INDRA RAMDHANI. Pemodelan Generasi Harmonik Kristal Perovskite Methylammonium Timbal Iodida (MAPbI_3) Menggunakan Model Ikat Hiper polarisabilitas Pada Sembarang Sudut Polarisasi Cahaya. Dibimbing oleh HENDRADI HARDHIENATA dan SIDIKRUBADI PRAMUDITO

Methylammonium timbal iodide (MAPbI_3) merupakan kristal dengan karakteristik memiliki fase yang berbeda tergantung pada suhu, MAPbI_3 memiliki struktur sentrosimetrik untuk point grup permukaan berupa $4/mmm$ (simetri D_{4h}) dan $mm2$ (Simetri C_{2v}). Penelitian ini bertujuan untuk memodelkan harmonic generasi kedua (SHG) dan harmonic generasi ketiga (THG) dengan menggunakan model ikat hiperpolarisasi sederhana dengan polarisasi sudut sembarang untuk simetri C_{2v} dan D_{4h} . Harmonik generasi kedua untuk D_{4h} adalah nol dikarenakan adanya inversi simetri yang diakibatkan yang mengakibatkan elektrik dipol terinduksi SHG menjadi terlarang, sedangkan pada simetri C_{2v} tidak berlaku inversi simetri dan menghasilkan intensitas dengan dua puncak simetri yang kemudian akan berubah lokasinya pada sudut azimuthnya seiring perubahan polarisasi. Sedangkan untuk harmonic generasi ketiga intensitas mengalami kenaikan intensitas seiring perubahan sudut polarisasi dan dibatasi oleh maksimal intensitas yang dapat dicapai oleh ikatan atom dan interferensi dari ikatan atom lainnya.

Kata kunci: MAPbI_3 , model ikat Hiper polarisabilitas, harmonic tinggi, optika non linier

ABSTRACT

INDRA RAMDHANI. Modeling of Harmonic Generation Crystal Perovskite Methylammonium Lead Iodide (MAPbI_3) Using Simplified Bond-Hyperpolarizability Model for Arbitrary Polarization. Supervised by HENDRADI HARDHIENATA dan SIDIKRUBADI PRAMUDITO.

Methylammonium Lead Iodide (MAPbI_3) is a crystal with characteristic to have different phases depending on temperature, MAPbI_3 has centrosymmetric for surface group in form of $4/mmm$ (D_{4h} symmetry) and $mm2$ (C_{2v} symmetry). This study aims to model the second harmonic generation (SHG) and third harmonic generation using the simplified hyperpolarizability binding model with arbitrary polarization for symmetry D_{4h} and C_{2v} . The second harmonic generation for D_{4h} is zero due the results in electrically shear induced dipoles to be prohibited, while the C_{2v} symmetry does not apply the inversion of symmetry and produces an intensity with two symmetry peak which will then chance their location at the azimuth angle as the polarization change. As for the third harmonic generation, the intensity increases as the polarization changes and is limited by the maximum intensity that can be achieved by atomic bonds and interference from other atomic bond.

Keywords: MAPbI_3 , simplified bond-hyperpolarizability model, high harmonics, nonlinear optics



© Hak Cipta milik IPB, tahun 2022
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 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.



**PEMODELAN GENERASI HARMONIK KRISTAL PEROVSIKTE
METHYLAMMONIUM TIMBAL IODIDA (MAPbI_3) MENGGUNAKAN
MODEL IKAT HIPERPOLARISABILITAS PADA SEMBARANG SUDUT
POLARISASI CAHAYA**

©Hak cipta milik IPB University

INDRA RAMDHANI

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

2022

@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.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

1. Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si
2. Dr. Faozan, S.Si., M.Si

Judul Skripsi : Penerapan Sudut Polarisasi Sembarang Untuk Model
Generasi Harmonik Kristal Perovskite (MAPbI₃)
Menggunakan Model Ikat Hiper polarisabilitas

Nama : Indra Ramdhani
NIM : G74160031

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. rer nat Hendradi Hardhienata, S.Si., M.Si.



Pembimbing 2:
Drs. Sidikrubadi Pramudito, M.Si.



Diketahui oleh,

Ketua Departemen Fisika:
Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada, S.Si., M.Si.



Tanggal Ujian: 12 Agustus 2022

Tanggal Lulus: 12 Agustus 2022

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Dengan judul “Pemodelan Generasi Harmonik Kristal Perovskite Methylammonium Timbal Iodida (MAPbI₃) Menggunakan Model Ikat Hiper polarisabilitas pada Sembarang Sudut Polarisasi Cahaya”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada bapak Dr. rer. nat. Hendradi Hardhienata S.Si sebagai dosen pembimbing I dan bapak Drs. Sidikrubadi Pramudito M.Si sebagai pembimbing II yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Terima kasih atas do'a, kasih sayang dan semangat yang tiada putus dari keluarga penulis, serta rekan-rekan Departemen Fisika Angkatan 53 IPB yang telah berjuang bersama di Departemen Fisika.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juli 2022
Indra Ramdhani

DAFTAR ISI

DAFTAR ISI	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I. PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Perumusan Masalah	2
1.3. Tujuan	2
1.4. Manfaat Penelitian	2
II. TINJAUAN PUSTAKA	2
2.1. Optika non linier	2
2.2. Model Ikat Hiper polarisabilitas Sederhana	3
2.3. Struktur Perovskite MAPbI ₃	4
III. METODE PENELITIAN	6
3.1. Waktu dan Tempat	6
3.2. Alat dan Bahan	6
3.3. Prosedur Penelitian	6
3.3.1. Studi Pustaka	6
3.3.2. Pemodelan SBHM	6
3.3.3. Analisis Hasil Intensitas SHG	8
IV. Hasil dan Pembahasan	9
4.1. Analisis Intensitas Harmonik Generasi Kedua	9
4.2. Analisis Intensitas Harmonik Generasi Ketiga	13
V. Simpulan Dan Saran	17
5.1. Simpulan	17
5.2. Saran	17
DAFTAR PUSTAKA	18
LAMPIRAN	20
RIWAYAT HIDUP	35

DAFTAR GAMBAR

1.	(a) Geometri dari SHG (b) Level energy diagram SHG (Hardhienata <i>et. al.</i> 2013)	3
2.	(a) Geometri interaksi THG. (b) level energy description. (Hardhienata <i>et. al.</i> 2013)	3
3.	Tampilan struktur MAPbI3 (a) kubik (Nuss <i>et. al.</i> 2015) (b) tetragonal (Pradheesh <i>et.al.</i> 2012) dan (c) ortorombik (Zeb <i>et. al.</i> 2012).	5
4.	Tampilan struktur vektor ikat MAPbI3 (a) permukaan (C _{4v}) dan (b) <i>bulk</i> (Pratama 2019).	5
5.	Koordinat sistem dari cahaya masukan dan keluaran pada vektor k. orientasi bidang terpolarisasi p dan s yang digambarkan berkaitan sistem koordinat yang diterapkan (Zeb <i>et. al.</i> 2012).	7
6.	Skema konfigurasi eksperimen RA-SHG (Frohna <i>et. al.</i> 2018).	8
7.	Intensitas SHG <i>bulk</i> untuk sembarang polarisasi masukan dengan variasi step 10 ⁰ . Intensitas disajikan dalam <i>arbitrary unit</i> (×100).	10
8.	Intensitas SHG permukaan untuk sembarang polarisasi masukan dengan variasi step 10 derajat. Intensitas disajikan dalam <i>arbitrary unit</i> (×100). $\varphi=0^0$ terkait dengan polarisasi sp dan $\varphi=90^0$ terkait polarisasi pp.	12
9.	Intensitas puncak SHG untuk sembarang polarisasi masukan	12
10.	Intensitas SHG permukaan untuk sembarang polarisasi masukan dengan variasi step 10 derajat. Intensitas disajikan dalam <i>arbitrary unit</i> (×100). $\varphi=0^0$ terkait dengan polarisasi sp dan $\varphi=90^0$ terkait polarisasi ps. (a) Intensitas THG pada permukaan (b) Intensitas THG pada <i>bulk</i>	13
11.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri <i>bulk</i> THG D _{4h} untuk $\varphi=0^0$	14
12.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri permukaan THG C _{2v} untuk $\varphi=0^0$	15
13.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri <i>bulk</i> D _{4h} untuk untuk $\varphi=30^0$	15
14.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri permukaan THG C _{2v} untuk $\varphi=30^0$	15
15.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri <i>bulk</i> D _{4h} untuk $\varphi=60^0$	16
16.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri permukaan THG C _{2v} untuk $\varphi=60^0$	16
17.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri <i>bulk</i> D _{4h} untuk $\varphi=90^0$	16
18.	Intensitas THG pada setiap ikatan atom untuk simetri permukaan THG C _{2v} untuk $\varphi=90^0$	17

DAFTAR LAMPIRAN

1	Vektor ikatan atom simetri C_{2v} (permukaan) senyawa <i>Methylammonium Timbal Iodida</i>	21
2	Vektor ikatan atom simetri D_{4h} (<i>Bulk</i>) senyawa <i>Methylammonium Timbal Iodida</i>	22
3	Tabel sudut polarisasi dan intensitas pada azimuthal	23
4	Tensor <i>rank 4 Surface</i>	24
5	Tensor <i>rank 4 bulk</i>	25
6	Sintak program SBHM SHG	26
7	Sintak program SBHM THG	36
8	Diagram Alir	42

@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 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.