

KOMPARASI SIFAT STRUKTURAL, OPTIK, DAN LISTRIK FILM TIPIS $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) TERHADAP MATERIAL *BULK* BERBASIS DFT+U

MUHAMMAD IZATUL AL FAJAR



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 “Komparasi Sifat Struktural, Optik, dan Listrik Film Tipis $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) terhadap Material *Bulk* Berbasis DFT+U” 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

Muhammad Izatul Al Fajar
G7401221007



@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

ABSTRAK

MUHAMMAD IZATUL AL FAJAR. Komparasi Sifat Struktural, Optik, dan Listrik Film Tipis $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) terhadap Material *Bulk* Berbasis DFT+U. Dibimbing oleh IRZAMAN dan FAOZAN.

Film tipis $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ (BST) berpotensi untuk perangkat optoelektronik, tetapi anomali sifat makroskopis akibat cacat sintesis sering mengaburkan sifat intrinsiknya. Penelitian ini bertujuan menganalisis secara komparatif sifat optik, struktural, dan listrik film tipis BST ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) berbasis eksperimen dan simulasi DFT+U. Film disintesis menggunakan metode deposisi larutan kimia di atas substrat Si(100) tipe-p. Karakterisasi meliputi spektroskopi UV-Vis, difraksi sinar-X, dan pengukuran I-V, yang disandingkan dengan kalkulasi DFT+U. Hasil menunjukkan celah pita optik eksperimen berkisar 1,73–3,29 eV, dengan anomali penurunan drastis pada $x = 0,25$ (1,73 eV) yang terbukti berasal dari keadaan subcelah pita akibat cacat struktural, bukan sifat intrinsik. Secara struktural, film membentuk fase kubik efektif dengan parameter kisi eksperimen (4,21–4,24 Å) lebih besar daripada prediksi DFT (3,92–3,96 Å) akibat regangan tarik epitaksial dari substrat. Sifat listrik mengonfirmasi kontak Schottky yang fotoresponsif. Pendekatan komparatif ini berhasil memisahkan pengaruh ekstrinsik dari sifat intrinsik material, memberikan landasan strategis untuk rekayasa film tipis BST pada aplikasi sensor cahaya.

Kata kunci: celah pita energi, deposisi larutan kimia, film tipis BST, regangan epitaksial, teori fungsional kerapatan

ABSTRACT

MUHAMMAD IZATUL AL FAJAR. Comparison of Structural, Optical, and Electrical Properties of $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0.125; 0.25; 0.375$) Thin Films and DFT+U Bulk Material. Supervised by IRZAMAN and FAOZAN.

Barium Strontium Titanate (BST) thin films are promising for optoelectronic devices, but macroscopic anomalies from synthesis defects often obscure their intrinsic properties. This study aims to comparatively analyze the optical, structural, and electrical properties of BST thin films ($x = 0; 0.125; 0.25; 0.375$) using experimental and DFT+U approaches. Films were synthesized via chemical solution deposition on p-type Si(100) substrates. Characterizations included UV-Vis spectroscopy, X-ray diffraction, and I-V measurements, which were compared with DFT+U calculations. The experimental optical band gaps ranged from 1.73 to 3.29 eV, with a drastic anomalous drop at $x = 0.25$ (1.73 eV) proven to originate from sub-band-gap states due to structural defects rather than intrinsic properties. Structurally, the films formed an effective cubic phase, with experimental lattice parameters (4.21–4.24 Å) larger than DFT predictions (3.92–3.96 Å) due to epitaxial tensile strain from the substrate. Electrical properties confirmed a photoresponsive Schottky contact. This comparative approach successfully isolates extrinsic influences from intrinsic material properties, providing a strategic foundation for engineering BST thin films in light sensor applications.

Keywords: BST thin films, chemical solution deposition, density functional theory, epitaxial strain, optical band gap



@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.

KOMPARASI SIFAT STRUKTURAL, OPTIK, DAN LISTRIK FILM TIPIS $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) TERHADAP MATERIAL *BULK* BERBASIS DFT+U

MUHAMMAD IZATUL AL FAJAR

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. Ir. Irmansyah, M.Si.

2 Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada Wijaya Puspita, S.Si, M.Si.



Judul Skripsi : Komparasi Sifat Struktural, Optik, dan Listrik Film Tipis
 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) terhadap Material *Bulk*
Berbasis DFT+U

Nama : Muhammad Izatul Al Fajar
NIM : G7401221007

@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.

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Prof. Dr. Ir. Irzaman, M.Si.
NIP. 196111011987031003

Pembimbing 2:

Dr. Faozan, S.Si., M.Si.
NIP. 197611032014092002

Diketahui oleh

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



Tanggal Ujian:
11 Agustus 2026

Tanggal Lulus:



@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.



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan November 2025 sampai bulan Juni 2026 ini ialah Film tipis Barium Strontium Titanar dengan judul “Komparasi Sifat Struktural, Optik, dan Listrik Film Tipis $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0; 0,125; 0,25; 0,375$) terhadap Material *Bulk* Berbasis DFT+U”.

Proses penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari dukungan dan bantuan berbagai pihak, penulis menyampaikan rasa hormat dan terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Ir. Irzaman, M.Si., selaku pembimbing pertama dan Pak Dr. Faozan, S.Si., M.Si., selaku pembimbing kedua yang telah membimbing dan banyak memberi saran selama penelitian ini.
2. Pak Dr. Ir. Irmansyah, M.Si., selaku dosen penguji pertama dan Prof. Dr. R. Tony Ibnu SWP, S.Si., M.Si., selaku dosen penguji kedua yang telah memberikan kritik dan saran yang membangun pada penelitian ini.
3. Bapak, Ibu, Kakak, Adek atas doa, dukungan, serta kasih sayang yang senantiasa diberikan selama proses penyusunan karya ini.
4. Keluarga kedua di Bogor, yaitu IKADA Bogor, beserta anak-anak Asrama IKADA: Kang Chakky, Kang Fahmi, Kang Farhan, Bagus, Ridho, Thanthowi, Wisnu, dan Zico, atas kebersamaan dan dukungan moral yang tak ternilai.
5. Warga Baristar, terutama Bagas, Ammar, Ezet, Ibnu, Robert, dan Adra atas semangat, bantuan, dan persahabatan selama masa perkuliahan.
6. Grup Antitipu Muslihat, yaitu Febiola, Fuji, dan Asyifa.
7. Rekan-rekan sebangkungan Prof. Irzaman, yaitu Ajat, Kinanthi, Fakhruddin, Ayu, Sarmilah, Ira, Ali, Ane, Aul, rekan sebangkungan Dr. Faozan, yaitu Otniel, Rafi, dan Lobby atas diskusi dan kerja sama yang membangun, serta asisten laboratorium Fisika Material Optoelektronik, terutama Ka Dea, Ka Naila, Ka Renny, Ka Fanny, dan Bang Fajri.
8. Seluruh rekan Fisika 59 yang telah menjadi bagian penting dalam perjalanan akademik ini. Semoga segala bantuan, dukungan, dan doa yang telah diberikan mendapatkan balasan yang berlipat ganda.
9. Seluruh pihak yang ikut terlibat pada seluruh proses masa perkuliahan penulis yang tidak dapat disebutkan satu-persatu.

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

Bogor, Juli 2026

Muhammad Izatul Al Fajar



@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



DAFTAR ISI

DAFTAR ISI	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Struktur Perovskit Barium Strosium Titanat (BST)	4
2.2 Substrat Silikon (100)	5
2.3 <i>Chemical Solution Deposition</i> (CSD)	6
2.4 <i>Annealing</i>	7
2.5 Spektroskopi <i>Ultraviolet-Visible</i> (UV-Vis)	7
2.6 <i>X-Ray Diffraction</i> (XRD)	8
2.7 Karakterisasi Profilometer	10
2.8 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	11
III METODE	13
3.1 Waktu dan Tempat	13
3.2 Alat dan Bahan	13
3.3 Prosedur Kerja	14
3.4 Analisis Data	23
3.5 Variabel Penelitian	23
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	25
4.1 Karakterisasi Film Tipis BST	25
4.2 Struktur Elektronik dan Transport DFT+U <i>Bulk</i>	35
4.3 Komparasi Eksperimen dan DFT+U	43
V SIMPULAN DAN SARAN	49
5.1 Simpulan	49
5.2 Saran	49
DAFTAR PUSTAKA	50
LAMPIRAN	59
RIWAYAT HIDUP	68



DAFTAR GAMBAR

1	Struktur BaSrTiO ₃ kisi kubik	4
2	Struktur atomik Si(100) tipe-p	5
3	CSD dengan <i>spin coating</i>	6
4	Skema prinsip kerja <i>stylus</i> profilometer dalam pengukuran ketebalan film tipis	11
5	Proses <i>annealing</i> film BST di atas substrat Si(100) tipe-p pada suhu 550 °C	16
6	Model struktur BST untuk variasi komposisi: (a) SrTiO ₃ , (b) Ba _{0,125} Sr _{0,875} TiO ₃ , (c) Ba _{0,25} Sr _{0,75} TiO ₃ , dan (d) Ba _{0,375} Sr _{0,625} TiO ₃	18
7	Skema struktur MFS untuk pengukuran I–V film tipis BST pada substrat Si(100) tipe-p: a) konfigurasi lapisan, b) rangkaian pada kondisi <i>reverse bias</i> , dan c) rangkaian pada kondisi <i>forward bias</i>	22
8	Citra optik area pengukuran <i>step-height</i> pada film SrTiO ₃ /Si(100)	25
9	Diagram batang ketebalan film tipis BST untuk variasi komposisi $x = 0; 0,125; 0,25; \text{ dan } 0,375$	25
10	Pola puncak XRD pada berbagai variasi BST	27
11	Pergeseran sudut difraksi yang diperbesar	27
12	Reflektansi terhadap panjang gelombang	30
13	Nilai <i>band gap</i> BST pada substrat Si(100): (a) SrTiO ₃ , (b) Ba _{0,125} Sr _{0,875} TiO ₃ , (c) Ba _{0,25} Sr _{0,75} TiO ₃ , (d) Ba _{0,375} Sr _{0,625} TiO ₃	31
14	Hasil pengukuran I-V meter di kondisi gelap	33
15	Hasil pengukuran I-V meter di kondisi terang	33
16	Arus saturasi BST struktur MFS	34
17	Potensial penghalang BST struktur MFS	35
18	Struktur kristal BST hasil <i>vc-relax</i> : (a) SrTiO ₃ , (b) Ba _{0,125} Sr _{0,875} TiO ₃ , (c) Ba _{0,25} Sr _{0,75} TiO ₃ , (d) Ba _{0,375} Sr _{0,625} TiO ₃	36
19	Pola difraksi sinar-X teoretis material BST hasil simulasi DFT+U	37
20	Pergeseran sudut difraksi teoretis yang diperbesar	38
21	Distribusi <i>band structure</i> dan PDOS material BST hasil simulasi DFT+U: (A) SrTiO ₃ , (B) Ba _{0,125} Sr _{0,875} TiO ₃ , (C) Ba _{0,25} Sr _{0,75} TiO ₃ , (D) Ba _{0,375} Sr _{0,625} TiO ₃	41
22	Konduktivitas listrik ternormalisasi (σ/τ) pada material BST di suhu ruang	42
23	Perbandingan energi <i>band gap</i> hasil eksperimen dan simulasi DFT+U terhadap variasi komposisi BST	45

DAFTAR TABEL

1	Komposisi prekursor untuk konsentrasi 0,5 M	15
2	Parameter komputasi simulasi DFT+U	17
3	Parameter yang dibandingkan antara hasil eksperimen dan simulasi DFT+U	23
4	Ketebalan film tipis BST hasil pengukuran <i>stylus</i> profilometer	26
5	Posisi puncak difraksi dan indeks bidang kristal film tipis BST	28

6	Parameter kisi BST fasa kubik ($\text{\AA}$)	29
7	Momen dipol dan polarisasi spontan film BST variasi $x = 0; 0,125; 0,25; 0,375; 0,5$	29
8	Ringkasan energi <i>band gap</i> BST tiap variasi x	31
9	Parameter kisi dan volume sel BST hasil simulasi DFT+U	36
10	Prediksi nilai <i>band gap</i> pada material BST di DFT+U	39
11	Nilai deviasi parameter kisi eksperimen-DFT	43

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram Alir Penelitian	60
2	Stoikiometri	61
3	Citra Lengkap Profilometer	65
4	Perhitungan Parameter Kisi	65
5	Perhitungan Momen Dipol dan Polarisasi Spontan	66
6	Perhitungan UV-Vis	66
7	Publikasi Seminar Nasional Fisika Universitas Negeri Jakarta 2026	67



@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