

## PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi yang saya tulis sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dan diajukan pada Program Studi Fisika Fakultas Sains Universitas Islam Negeri Sultan Maulana Hasanuddin Banten ini sepenuhnya asli merupakan hasil karya tulis ilmiah saya pribadi.

Adapun tulisan maupun pendapat orang lain yang terdapat dalam skripsi ini telah saya sebutkan kutipannya secara jelas dengan etika keilmuan yang berlaku di bidang kepenulisan karya ilmiah.

Apabila dikemudian hari terbukti bahwa sebagian atau seluruh isi skripsi ini merupakan hasil perbuatan plagiarisme atau mencontek karya tulis orang lain, saya bersedia untuk menerima sanksi berupa pencabutan gelar kesarjanaan yang saya terima ataupun sanksi akademik sesuai yang berlaku.

Serang, 29 November 2024



Dina Rahayu

NIM. 201720033



Nomor : - Kepada Yth.  
Lampiran : satu (1) eks Dekan Fakultas Sains  
Perihal : Pengajuan Munaqosah UIN SMH Banten  
a.n Dina Rahayu di –  
NIM: 201720033 Serang

Assalamu'aikum Wr.Wb.


Dipermaklumkan dengan hormat, bahwa setelah membaca dan menganalisa serta mengadakan koreksi seperlunya, kami berpendapat bahwa skripsi saudari Dina Rahayu dengan NIM: 201720033 yang berjudul "Kalkulasi Sifat Listrik dan Termal dengan Prinsip Pertama *Density Functional Theory* pada Material Superkonduktor  $MgB_2$ ", telah dapat diajukan sebagai salah satu syarat untuk melengkapi ujian munaqasah pada Fakultas Sains Program Studi Fisika UIN Sultan Maulana Hasanuddin Banten.

Demikian segala perhatian Bapak kami ucapkan terima kasih.

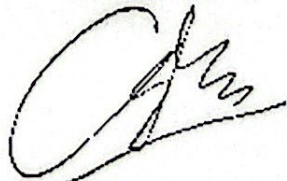
Wassalamu'alaikum Wr.Wb.

Serang, 29 November 2024

Pembimbing I,

  
**Fina Fitratun Amaliyah, M.Sc.**  
NIDN. 2010029003

Pembimbing II,

  
**Dr. Agung Imaduddin, M.Eng.**  
NIP. 197109291989121001

**Kalkulasi Sifat Listrik dan Termal dengan Prinsip Pertama *Density Functional Theory* pada Material Superkonduktor MgB<sub>2</sub>**

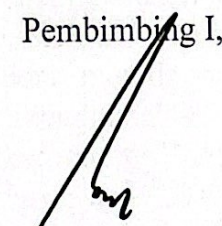
Oleh:


Dina Rahayu  
NIM: 201720033

Menyetujui,

Pembimbing I,

Pembimbing II,


  
Fina Fibratun Amaliyah, M.Sc  
NIDN. 2010029003


  
Dr. Agung Imaduddin, M.Eng  
NIP. 197109291989121001

Mengetahui,

Dekan Fakultas Sains

Ketua Program Studi Fisika

  
Dr. Asep Saefurrohman, M.Si  
NIP. 197808272003121003

  
Elsi Ariani, M.Si  
NIP. 198901232018012001

## ABSTRAK

Dina Rahayu

NIM: 201720033

Kalkulasi Sifat Listrik Dan Termal Dengan Menggunakan Prinsip Pertama  
*Density Functional Theory* pada Material Superkonduktor  $MgB_2$

Material  $MgB_2$  merupakan material yang sangat menjanjikan untuk berbagai aplikasi industri karena memiliki struktur kristal yang sederhana dan ikatan kontak listrik antar butir yang kuat. Oleh karena itu, penelitian ini dilakukan untuk mengetahui hasil perhitungan simulasi komputasi DoS dan *Band Structure* menggunakan *software* QE, serta sifat termoelektrik, sifat listrik, dan sifat termal menggunakan *software* BoltzTraP. Penelitian ini menggunakan metode analisis komputasi. Didapatkan hasil perhitungan simulasi menggunakan prinsip pertama DFT (*software* QE) yang menunjukkan energi Fermi bervariasi, yaitu 7.664 eV pada *wire*, 7.813 eV pada *database*, dan 7.811 eV pada *bulk*. Pada pita valensi didominasi oleh atom B, sedangkan pita konduksi didominasi oleh atom Mg. Pada hasil perhitungan simulasi menggunakan formula Boltzmann (*software* BoltzTraP) menunjukkan bahwa *database* memiliki sifat termoelektrik lebih kecil dengan nilai 0.1 di suhu 150 K, namun menunjukkan konduktivitas listrik dan konduktivitas termal yang tinggi, dengan nilai berturut-turut 1.18  $1/\Omega\text{ms}$  di suhu 30 K dan 2.09 W/mKs di suhu 10 K. Sementara itu, hasil sintesis menunjukkan bahwa *bulk* memiliki sifat termoelektrik dan konduktivitas termal yang lebih baik dibandingkan *wire*, dengan nilai termoelektrik 0.43 di suhu 150 K dan konduktivitas termal 0.5 W/mKs di suhu 20 K. Di sisi lain, *wire* menunjukkan konduktivitas listrik yang lebih baik dibandingkan *bulk*, dengan nilai konduktivitas listrik 1.43  $1/\Omega\text{ms}$  pada suhu 10 K.

**Kata kunci:**  $MgB_2$ , *Density Functional Theory*, sifat konduktivitas listrik, sifat konduktivitas termal

## ABSTRACT

Dina Rahayu

NIM: 201720033

### *Calculation of Electrical and Thermal Properties Using First-Principles Density Functional Theory on MgB<sub>2</sub> Superconductor Material*

*The MgB<sub>2</sub> material is very promising for various industrial applications due to its simple crystal structure and strong electrical contact bonds between grains. Therefore, this research was conducted to determine the results of the DoS and Band Structure computational simulation calculations using the QE software, as well as to evaluate the thermoelectric, electrical, and thermal properties using the BoltzTraP software. This research employs computational analysis methods. The results of the simulation calculations using the first-principles DFT (QE software) show that the Fermi energy varies, namely 7.664 eV in the wire, 7.813 eV in the database, and 7.811 eV in the bulk. The valence band is dominated by B atoms, while the conduction band is dominated by Mg atoms. Meanwhile, the simulation results using the Boltzmann formula (BoltzTraP software) show that the database has lower thermoelectric properties with a value of 0.1 at 150 K, but exhibits high electrical conductivity and thermal conductivity, with values of 1.18 1/Ωms at 30 K and 2.09 W/mKs at 10 K, respectively. On the other hand, synthesis results indicate that the bulk has better thermoelectric properties and thermal conductivity compared to the wire, with a thermoelectric value of 0.43 at 150 K and thermal conductivity of 0.5 W/mKs at 20 K. Conversely, the wire shows better electrical conductivity compared to the bulk, with an electrical conductivity value of 1.43 1/Ωms at 10 K.*

**Keywords:** *MgB<sub>2</sub>, Density Functional Theory, electrical conductivity properties, thermal conductivity properties*



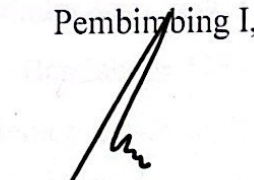
## HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi a.n Dina Rahayu, NIM: 201720033 yang berjudul “Kalkulasi Sifat Listrik dan Termal dengan Prinsip Pertama *Density Functional Theory* pada Material Superkonduktor  $MgB_2$ ” telah diujikan dalam Ujian Tugas Akhir Universitas Islam Negeri Sultan Maulana Hasanuddin Banten pada 6 November 2024.

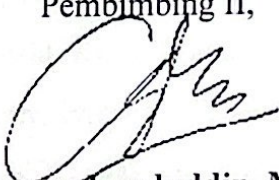
Skripsi tersebut telah disahkan dan diterima sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains (S.Si) pada Fakultas Sains Universitas Islam Negeri Sutan Maulana Hasanuddin Banten.

Serang, 29 November 2024


Pembimbing I,

  
**Fina Fitratun Amaliyah, M.Sc**  
NIDN. 2010029003


Pembimbing II,

  
**Dr. Agung Imaduddin, M.Eng**  
NIP. 197109291989121001

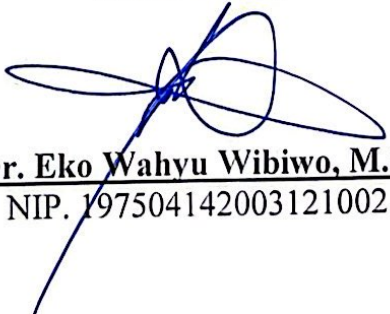
Penguji I,

  
**Elsi Ariani, M.Si**  
NIP. 198901232018012001

Penguji II,

  
**Beta Nur Pratiwi, M.Si**  
NIP. 199301022023212036

Ketua Penguji

  
**Dr. Eko Wahyu Wibiwo, M.Si**  
NIP. 197504142003121002

## **RIWAYAT HIDUP**

Penulis dilahirkan pada tanggal 12 November 2002 di Kota Serang-Banten. Dilahirkan dari rahim Ibu Cicih Herawati dan Bapak Alfin Sochetes dan memiliki satu saudara perempuan yang bernama Dian Puspita.

Pendidikan formal yang ditempuh penulis adalah sebagai berikut: SDN Gempol Serang, SMPN 2 Kota Serang dan SMAN 3 Kota Serang, serta melanjutkan pendidikan ke jenjang yang lebih tinggi yaitu di perguruan tinggi UIN Sultan Maulana Hasanuddin Banten pada Program Studi Fisika Fakultas Sains.

Selama menempuh perkuliahan, penulis banyak mengikuti kegiatan intrakulikuler yang ada di UIN Sultan Maulana Hasanuddin Banten dengan menjadi Bendahara Umum UKM PRIMA (Pusat Riset Mahasiswa) UIN SMH Banten tahun 2023, Sekretaris Departemen Internal DEMA (Dewan Eksekutif Mahasiswa) Fakultas Sains tahun 2022, dan organisasi diluar kampus sebagai Ketua Bidang Keagamaan RISMA (Remaja Masjid) Ar-Rahmah 2022. Selain itu penulis juga berkesempatan magang di MBKM (Merdeka Belajar – Kampus Merdeka) di BRIN (Badan Riset Inovasi Nasional) masuk dalam Pusat Riset Material Maju tahun 2023.

## PERSEMBAHAN

Atas segala nikmat dan karunia-Mu, kupanjatkan rasa syukur kepada Allah SWT yang maha kuasa atas segala sesuatu. Skripsi ini penulis persembahkan kepada:

Kedua orang tua yang sangat penulis cintai, Ayahanda Alfin Socretes dan Ibunda Cicih Herawati, terima kasih atas do'a dan perjuangannya yang tiada henti. Semoga sehat selalu dan hiduplah lebih lama supaya bisa menyaksikan anak-anak kalian sukses. Kepada adik tercinta, terima kasih memberikan warna disetiap harinya, serta do'a dari keluarga yang selalu mengalir dengan tulus. Untuk NIM 201720033, terima kasih sudah kuat sejauh ini dan selamat kerana sudah menyelesaikan apa yang sudah dimulai sejak tahun 2020 lalu.

Tak lupa pula kepada teman-teman yang selalu mendukung dan mendoakan. Terutama yang telah menemani setiap perjalanan masa kuliah penulis. Terakhir penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang selalu bertanya: “kapan sidang?”, “kapan lulus?”, “kapan wisuda?”, dan sejenisnya. Bagi penulis pertanyaan seperti itu membangkitkan semangat penulis untuk menyelesaikan tugas akhir ini. Dan yang pasti, membuat skripsi tidak semenakutkan itu, asalkan kita rajin buat ngerjainnya dan mendapatkan pembimbing yang selalu *support* kita tanpa menghakimi.



## **MOTTO**

“Kesuksesan dan Kebahagiaan terletak pada diri sendiri. Tetaplah berbahagia karena kebahagiaanmu dan kamu akan membentuk karakter yang kuat untuk melawan kesulitan”

**- Hellen Keller -**

“Proses setiap orang berbeda, ada yang memilih lari marathon atau jalan santai. Tapi tenang aja, karena kalian akan terjun ke tujuan yang sama.”

**- Salma Salsabil -**

“Tuhan tau waktu yang tepat, tempat yang tepat, dan jawaban yang tepat untuk semua do’a-do’a kita”

**- Rony Parulian -**

## KATA PENGANTAR

Bismillahirrohmanirohiim

Alhamdulillah, puji syukur atas berkat dan rahmat Allah SWT karena atas kehendak-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Kalkulasi Sifat Listrik dan Termal dengan Prinsip Pertama *Density Functional Theory* pada Material Superkonduktor  $MgB_2$ ”. Tidak lupa shalawat serta salam selalu terlimpah curah kepada Nabi Muhammad SAW yang telah menyampaikan ajaran Islam untuk menuntun manusia menuju zaman yang terang akan ilmu pengetahuan.

Penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada berbagai pihak atas doa, dukungan, dan bimbingannya selama maupun setelah kegiatan penelitian berlangsung hingga skripsi ini dapat diselesaikan. Secara khusus penulis ingin menyampaikan terima kasih banyak kepada:

1. Bapak Prof. Dr. Wawan Wahyudin, M.Pd. selaku Rektor UIN SMH Banten yang telah memberikan kesempatan kepada penulis untuk bergabung dan belajar di lingkungan UIN Sultan Maulana Hasanuddin Banten.
2. Bapak Dr. Asep Saefurohman, M.Si. selaku Dekan Fakultas Sains yang telah mendorong penyelesaian studi dan skripsi penulis.
3. Ibu Elsi Ariani, M.Si. selaku Ketua Program Studi Fisika Fakultas Sains UIN SMH Banten yang telah memberikan motivasi.
4. Ibu Fina Fitratun Amaliyah, M.Sc. selaku Dosen pembimbing pertama yang selalu sabar dalam memberikan bimbingan, motivasi, arahan, dan masukan kepada penulis selama menyusun skripsi.
5. Bapak Dr. Agung Imaduddin, M.Eng. selaku Dosen pembimbing kedua penulis di Pusat Riset Material Maju, BRIN, terima kasih atas kesediaannya dalam memberikan waktu, bantuan, dan bimbingan

kepada penulis. Serta selalu sabar dan baik sekali dalam memberikan arahan kepada penulis saat melaksanakan Magang sampai penyusunan skripsi.

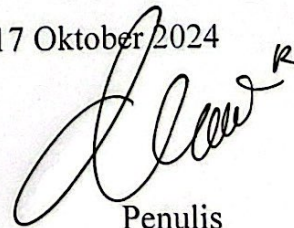
6. Bapak dan Ibu Dosen di lingkungan Fakultas Sains UIN SMH Banten yang telah mengajar dan mendidik penulis selama menempuh pendidikan.
7. Orang tua tersayang, ayahanda Alfin Socretes dan ibunda Cicih Herawati, yang telah memberikan kepercayaan kepada penulis untuk melanjutkan pendidikan sampai ketahap ini, selalu memberikan semangat, nasihat, dan memberikan doa serta dukungan baik moril maupun materil kepada penulis. Terima kasih sudah menjadi pengingat dan penguat paling hebat.
8. Adik perempuan saya, Dian Puspita, yang telah membuat hari-hari saya dalam menyusun skripsi lebih berwarna oleh celotehannya.
9. Silvia Farah Diba, Nihayatul Umna, Ihah Fadilah, Ines Hayatun Nufus, Kurotun Aini, dan Ali Rohman selaku teman seperjuangan dalam menyusun skripsi. Terima kasih telah membuat kehidupan perkuliahan terasa menyenangkan. Saling membantu, berbagi ilmu, mendoakan satu sama lain, serta membagikan pengalaman, cerita menarik, dan berjuang bersama dalam menyusun tugas akhir.
10. UKM PRIMA dan orang-orang yang ada di dalamnya, khususnya Aisyah Meyra Putri dan Siti Rohmah yang telah memberikan dukungan, berbagi pengalaman, menemani penulis selama berproses di UKM PRIMA, serta mengajarkan penulis untuk peka dan peduli terhadap sekitar.
11. Random Squard, khususnya Fitri Gina Amaliah, Virda Qustiani, Siti Nurlaila Qodariah, Citra Adeliya Nurhasanah, Zahra, Shinta Mila, terima kasih sudah membuatkan playlist hafalan 9 surat terakhir,

menjadi pendengar segala keluhan penulis tanpa menghakimi, memberikan saran atau masukan, mengingatkan penulis untuk segera menyelesaikan skripsi ini, dan membuat hari-hari penulis dalam menyusun skripsi lebih berwarna karena celotehan serta tingkah laku abnormal kalian.

12. Nadia Aulia Tamara, Suci Septi Adriati, Muhammad Nasruddin, Rival Junivan Putra, dan Bagus Rahmatullah yang selalu menghabiskan waktu dari kecil hingga saat ini. Kalian selalu memberikan motivasi dan menanyakan keadaan skripsi ini dibanding keadaan penulis.
13. Rony Parulian, Salma Salsabil, Nyoman Paul, dan Nabila Taqqiyah, terima kasih sudah menjadi sumber inspirasi penulis untuk tidak menyerah dalam meraih impian dan selalu berusaha untuk mengejar impian tersebut.
14. Terakhir untuk NIM 201720033. Apresiasi yang sebesar-besarnya karena telah bertanggung jawab untuk menyelesaikan apa yang telah dimulai. Terima kasih karena terus berusaha dan tidak menyerah, serta senantiasa menikmati setiap prosesnya. Terima kasih sudah mau bertahan hingga sejauh ini.

Penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun demi perbaikan untuk kedepannya, dan penulis berharap agar penelitian ini dapat dikembangkan dengan apa yang sudah dilakukan oleh penulis. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi pembaca.

Serang, 17 Oktober 2024



Penulis



## DAFTAR ISI

<b>LEMBAR PERNYATAAN</b> .....	<b>i</b>
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>iv</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>v</b>
<b>LEMBAR PENGESAHAN</b> .....	<b>vi</b>
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	<b>x</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xv</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xvi</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	<b>1</b>
A. Latar Belakang .....	1
B. Batasan Masalah .....	3
C. Rumusan Masalah .....	3
D. Tujuan Masalah .....	4
E. Manfaat Penelitian .....	4
<b>BAB II KAJIAN PUSTAKA</b> .....	<b>6</b>
A. Kajian Teori .....	6
B. Hasil Penelitian yang Relevan .....	25
C. Kerangka Berfikir .....	28
D. Hipotesis .....	29
<b>BAB III METODOLOGI PENELITIAN</b> .....	<b>30</b>
A. Waktu Dan Tempat Penelitian .....	30
B. Alat Dan Bahan .....	30
C. Prosedur Kerja .....	32
D. Jenis Metode Penelitian .....	42
E. Teknik Pengumpulan Data .....	43
F. Teknik Analisis Data .....	44

<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>45</b>
A. Hasil Perhitungan Simulasi Komputasi Menggunakan Prinsip Pertama DFT ( <i>Software</i> QE) .....	45
B. Hasil Perhitungan Simulasi Komputasi Menggunakan Formula Boltzmann ( <i>Software</i> BoltzTraP).....	48
<b>BAB V PENUTUP.....</b>	<b>56</b>
A. Kesimpulan .....	56
B. Saran .....	57
<b>DAFTAR PUSTAKA.....</b>	<b>58</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>61</b>

## DAFTAR TABEL

Tabel 3.1	Jalur <i>k-path</i> pada struktur hexagonal <i>Brillouin zone</i> .....	36
Tabel 3.2	Daftar parameter fisis material MgB <sub>2</sub> .....	37
Tabel 3.3	Daftar parameter numerik material MgB <sub>2</sub> .....	38
Tabel 3.4	Output perhitungan BoltzTraP.....	41

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Evolusi Penemuan Superkonduktor Serta Suhu Kritisnya .....	7
Gambar 2.2	Hubungan Resistivitas ( $\rho$ ) dengan Suhu (T) pada Material Superkonduktor .....	8
Gambar 2.3	Penurunan Energi <i>Gap</i> Terhadap Penurunan Suhu Berdasarkan Teori Bcs.....	11
Gambar 2.4	Rasio Konduktivitas Termal Elektronik Keadaan Superkonduktor Terhadap Keadaan Termal Versus Suhu Tereduksi .....	12
Gambar 2.5	Pemodelan Struktur $MgB_2$ .....	25
Gambar 2.6	Diagram Alir Kerangka Berfikir.....	28
Gambar 3.1	Pemodelan Struktur Kristal $MgB_2$ Menggunakan Program Vesta (Mg: Kuning, B: Hijau) .....	32
Gambar 3.2	Grafik energi <i>Cut off</i> (a) Terhadap energi total terhadap waktu dan (b) Energi total terhadap energi <i>Cut off</i> .....	34
Gambar 3.3	Struktur Kristal $MgB_2$ Pada <i>Reciprocal Space</i> . Garis Hijau Menunjukkan Jalur <i>K-Path</i> Pada Titik <i>High Symmetry</i> di <i>Brillouin Zone</i> .....	36
Gambar 3.4	Diagram Alir Teknik Pengumpulan data.....	43
Gambar 3.5	Diagram Alir Teknik Analisis Data.....	44
Gambar 4.1	Grafik DoS $MgB_2$ Hasil Perhitungan DFT menggunakan QE .	46
Gambar 4.2	Grafik <i>Band Structure</i> $MgB_2$ Hasil Perhitungan DFT menggunakan QE .....	47
Gambar 4.3	Grafik Koefisien Seebeck Terhadap Temperatur .....	49
Gambar 4.4	Grafik <i>Figure of Merit</i> Terhadap Temperatur .....	50
Gambar 4.5	Grafik Konduktivitas Listrik Terhadap Temperatur.....	52
Gambar 4.6	Grafik Konduktivitas Termal Terhadap Temperatur.....	54