

ABSTRAK

Nama : Sona Maulana Muhammad

Program Studi : Fisika

Judul : Perhitungan Struktur Elektronik Molekul CsPbX_3 ($X = \text{Br}, \text{Cl}$ dan I) fase ortorombik dengan Metode *Density Functional Theory*

Sel Surya perovskite merupakan salah satu generasi sel surya, yang dapat mengubah energi matahari menjadi energi listrik. Salah satu hal yang menarik pada Sel Surya perovskite adalah penggunaan senyawa kimia atau *Inorganic Metal Halide* (IMH) sebagai bahan aktifnya. Penelitian dengan perovskite terus dilakukan untuk menemukan perovskite dengan efisiensi yang tinggi. Efisiensi yang tinggi berkaitan dengan struktur elektronik IMH sebagai bahan aktif. Struktur elektronik IMH dapat diketahui dengan metode komputasi melalui *Density Functional Theory* (DFT). Pada penelitian ini, molekul yang diuji adalah molekul CsPbX_3 ($X = \text{Br}, \text{Cl}$ dan I) pada fase ortorombik. Selain itu, perhitungan dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak quantum ESPRESSO, dengan melakukan variasi beberapa parameter seperti energi cut-off, k-point, dan *lattice parameters*. Dari hasil optimasi perhitungan pada ketiga molekul tersebut, diperoleh nilai band gap, DOS dan PDOS pada molekul CsPbX_3 ($X = \text{Br}, \text{Cl}$ dan I). Diketahui nilai energi band gap dari CsPbI_3 adalah 1,814732 eV. Sedangkan untuk nilai energi celah pita dari CsPbBr_3 adalah 1,708274 eV dan untuk nilai celah pita CsPbCl_3 adalah 1,837491 eV. pada masing-masing kurva pita elektronik memiliki nilai yang sama pada kurva DOS. Hal ini menunjukkan bahwa CsPbX_3 ($X = \text{Br}, \text{Cl}$ dan I) dapat digunakan untuk bahan semikonduktor perovskit.

Kata Kunci: Sel Surya perovskite, *Density Functional Theory*, *DOS PDOS band gap*, *Quantum ESPRESSO*, CsPbX_3 ($X = \text{Br}, \text{Cl}$ dan I).