

ABSTRAK

Nama : Mochamad Rizki Azhar

Program Studi : Fisika

Judul Skripsi : Perhitungan Struktur Elektronik CsBX₃

(B = Pb dan Sn , X = Cl, Br dan I) Menggunakan

Metode *Density Functional Theory* (DFT) Sebagai Bahan Aktif

Sel Surya Perovskit

Telah dilakukan Perhitungan Struktur Elektronik CsBX₃ (B = Pb dan Sn , X = Cl, Br dan I) Menggunakan Metode *Density Functional Theory* (DFT) Sebagai Bahan Aktif Sel Surya Perovskit. Bahan yang digunakan merupakan perovskit logam halida untuk menyerap cahaya pada sel surya. Perovskit ini memiliki nilai kestabilan yang tinggi dan proses fabrikasi nya mudah. Untuk nilai efisiensi konversinya sudah mencapai 10,1%. Fase yang digunakan pada penelitian ini hanya fase kubik. Struktur elektronik yang dibahas meliputi kurva pita elektronik, kurva DOS (*Density of States*), serta kurva PDOS (*Projected Density of States*). Untuk mencari struktur elektronik dilakukan beberapa optimasi, yaitu variasi konstanta kisi, *k-point*, energi *cut-off*, dan variasi CsBX₃. Optimasi dilakukan untuk mendapatkan struktur dengan nilai energi total minimum agar kestabilannya tercapai. Diketahui nilai energi celah pita pada CsPbCl₃ = 2,214 eV, CsPbBr₃ = 1,788 eV, CsPbI₃ = 1,482 eV, CsSnCl₃ = 1,019 eV, CsSnBr₃ = 0,659 eV dan CsSnI₃ = 0,482 eV. Nilai tersebut berlaku pada kurva pita elektronik maupun DOS nya. Hal ini menunjukkan bahwa kristal dengan struktur CsBX₃ dapat digunakan sebagai bahan semikonduktor perovskit.

Kata kunci: CsBX₃, Fase Kubik, Kurva, Energi Celah Pita, Kisi