

ABSTRAK

Nama : Elsyifa Fitria Rahmani

Program Studi : Jurusan Fisika

Judul : Perhitungan Sifat Fonon Pada Perovskit Anorganik CsSnX_3 ($\text{X}=\text{Cl, Br, I}$) Dalam Fase Kubik dengan Menggunakan Metode DFT (*Density Functional Theory*)

Telah dilakukan perhitungan sifat fonon pada perovskit anorganik CsSnX_3 (Cl, Br, I) dengan menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*) pada *software* Quantum ESPRESSO. Perovskit anorganik diaplikasikan pada penggunaan sel surya yang memiliki banyak keuntungan karena mudah didapatkan dan memiliki efisiensi yang besar. Penelitian ini menggunakan K-Points dan energi *cutoff* sebagai optimasi perhitungan dan diambil K-Points $6 \times 6 \times 6$ dan energi *cutoff* sebesar 1088,456 eV karena menghasilkan energi total paling minimum dari semua parameter yang dihitung. Perhitungan sifat fonon ini menghasilkan dua kurva untuk setiap molekulnya, yaitu kurva *Phonon Density of States (PHDOS)* dan Dispersi Fonon. Kurva *Phonon Density of States (PHDOS)* merupakan kurva yang menjelaskan berapa banyak fonon yang terdapat pada frekuensi gelombang tertentu. Pada molekul CsSnCl_3 sebaran fonon terbanyak terdapat pada frekuensi gelombang 28,12 Hz, pada CsSnBr_3 sebaran fonon terbanyak terdapat pada frekuensi gelombang 17,65 Hz dan pada CsSnI_3 sebaran fonon terbanyak terdapat pada frekuensi gelombang 45,71 Hz. Kurva dispersi fonon menghasilkan kurva yang menjelaskan hubungan dari frekuensi gelombang pada suatu titik di *K-Points* dan kestabilan dari suatu molekul. Kurva dispersi fonon pada penelitian ini menjelaskan bahwa CsSnX_3 ($\text{X}=\text{Cl, Br, I}$) merupakan molekul yang tidak stabil karena sebagian fungsi gelombang pada molekul ini berada pada nilai negatif (imajiner).

Kata kunci: *Density Functional Theory, Phonon Density of States, Dispersi Fonon, Fungsi Gelombang, Quantum ESPRESSO*

ABSTRACT

Name : Elsyifa Fitria Rahmani

Studies Program : Physics

Title : *Phonon Properties Calculation of Inorganic Perovskite CsSnX₃ (X=Cl, Br, I) in Cubic Phase with DFT (Density Functional Theory)'s Method*

The phonon properties calculation of inorganic perovskite CsSnX₃ (X=Cl, Br, I) has been carried out using DFT (Density Functional Theory) method on the Quantum ESPRESSO's software. Inorganic perovskite are applied to the use of solar cells which have many advantages because they are easy to obtain and have high efficiency. This research uses K-Points and cutoff energy as calculation optimization and taken K-Points 6x6x6 and cutoff energy 1088,456 eV because it produces the minimum total energy of all calculated parameters. This phonon properties calculation produces two curves for each molecule, namely Phonon Density of States (PHDOS) and Phonon Dispersion. Phonon Density of States (PHDOS)'s curve is a curve that describes how many phonons are present in a particular wavefunction. In CsSnCl₃, the most widely distributed at the wavefunction 28,12 Hz, in CsSnBr₃ the phonons at 17,65 Hz and CsSnI₃ the phonons at 45,71 Hz. The phonon dispersion's curve produces a curve that describes the relationship of the wavefunction at k_point and the stability of a molecule. The phonon dispersion's curve in this research explain that CsSnX₃ (X=Cl, Br, I) is an unstable molecules because some of the wavefunction in this molecules are in negative values (imaginary).

Keywords: *Density Functional Theory, Phonon Density of States, Phonon Dispersion, Wavefunction, Quantum ESPRESSO.*