

## ABSTRAK

Nama : Listiana Ilyas

Program Studi : Fisika

Judul : Perhitungan Sifat Optik Absorbansi Molekul Organik Anorganik  $ABX_3$  ( $A=CH_3NH_3$ ;  $B=Pb$  dan  $Sn$ ;  $X=Cl, I,$  dan  $Br$ ) dengan Metode *Density Functional Theory* (DFT) sebagai Bahan Aktif *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC)

Sel surya perovskit halida organik anorganik merupakan topik yang menarik di bidang energi terbarukan. *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) merupakan perangkat fotoelektrokimia yang saat ini menjadi subjek penelitian energi terbarukan menjadi perangkat fotovoltaiik berbiaya rendah. Perovskit halida dapat meningkatkan efisiensi konversi matahari dari sel surya. Dalam penelitian ini, molekul yang diuji adalah fase kubik  $ABX_3$  ( $A=CH_3NH_3$ ;  $B=Pb, Sn$ ;  $X=Cl, I, Br$ ) berdasarkan metode komputasi menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). DFT ini telah digunakan untuk mengetahui berbagai sifat dari banyak fase padatan, cairan, molekul, dan lainnya. Perhitungan dilakukan menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO. Pengujian serapan panjang gelombang  $CH_3NH_3PbI_3$ ,  $CH_3NH_3PbCl_3$ ,  $CH_3NH_3PbBr_3$ ,  $CH_3NH_3SnI_3$ ,  $CH_3NH_3SnCl_3$ ,  $CH_3NH_3SnBr_3$ , masing-masing menunjukkan serapan 411.67 nm, 390.67 nm, 447.77 nm, 634.15 nm, 293.26 nm, dan 398.70 nm. Hasil yang diperoleh pada sifat optik seperti tingkat penyerapan yang tinggi menunjukkan bahwa  $ABX_3$  memiliki properti optik untuk menyerap panjang gelombang matahari sebagai lapisan aktif sel surya berbasis perovskit.

**Kata Kunci:** DSSC, perovskit halida organik anorganik  $ABX_3$  ( $A=CH_3NH_3$ ;  $B=Pb, Sn$ ;  $X=Cl, I, Br$ ), sifat optik absorbansi, DFT, Quantum ESPRESSO.