

# ABSTRAK

Nama : Nisara Robbayani Rikuyun  
Program Studi : Fisika  
Judul : Perhitungan Sifat Elektronik pada Fase Kubik  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$   
( $B = \text{Pb}$  dan  $\text{Sn}$ ;  $X = \text{Cl}$ ,  $\text{I}$  dan  $\text{Br}$ ) dengan menggunakan  
Metode *Density Functional Theory* (DFT)

Telah dilakukan penelitian mengenai perhitungan sifat elektronik pada fase kubik  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$  ( $B = \text{Pb}$  dan  $\text{Sn}$ ;  $X = \text{Cl}$ ,  $\text{I}$  dan  $\text{Br}$ ) dengan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Pembuatan struktur molekul  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnCl}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  dan  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnBr}_3$  dalam fase kubik menggunakan software *Gauss-view* dengan masing-masing konstanta kisi adalah 5.68 Å, 6.39 Å, 5.91 Å, 5.76 Å, 6.2821 Å dan 5.9461 Å. Perhitungan dilakukan menggunakan software *Burai* yang di dalamnya memiliki aplikasi *Quantum Espresso*. Tahap pertama yang dilakukan adalah menghitung energi total paling minimum dengan memvariasikan parameter perhitungan, yaitu *ecutoff*, *k-point* dan *PP*. Selanjutnya menentukan parameter terbaik yang akan digunakan dalam perhitungan. Hasil perhitungan divisualisasikan dengan menggunakan software *Origin* yang berfungsi untuk menghasilkan grafik *band structure calculation*, *DOS* dan *PDOS* serta sifat kelistrikan bahan. Kemudian membandingkan hasil perhitungan dengan referensi dan persentase error. Dalam penelitian ini ditemukan *VBM* terdiri dari anti-ikatan *B s-X p*, sedangkan *CBM* didominasi oleh *B p-X p*. Energi celah pita *Pb* lebih besar daripada *Sn*. Energi celah pita struktur molekul  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$  ( $B = \text{Pb}$  dan  $\text{Sn}$ ;  $X = \text{Cl}$ ,  $\text{I}$  dan  $\text{Br}$ ) dapat meningkat dengan menurunnya nilai konstanta kisi.

**Kata Kunci :** *Sifat Elektronik, DFT, Gauss-view, Burai, Quantum Espresso, Origin.*

# ABSTRACT

*Name* : Nisara Robbayani Rikuyun  
*Studies Program* : Physics  
*Title* : *Calculation of Electronic Properties on The Cubic Phase  $CH_3NH_3BX_3$  ( $B = Pb$  and  $Sn$ ;  $X = Cl, I$  and  $Br$ ) by using The Density Functional Theory (DFT) Method*

*Research has been carried out regarding the calculation of electronic properties on the cubic phase  $CH_3NH_3BX_3$  ( $B = Pb$  and  $Sn$ ;  $X = Cl, I$  and  $Br$ ) by using The Density Functional Theory (DFT) method. Making the molecular structure  $CH_3NH_3PbCl_3$ ,  $CH_3NH_3PbI_3$ ,  $CH_3NH_3PbBr_3$ ,  $CH_3NH_3SnCl_3$ ,  $CH_3NH_3SnI_3$  and  $CH_3NH_3SnBr_3$  in the cubic phase using Gauss-view software with each lattice constant is 5.68 Å, 6.39 Å, 5.91 Å, 5.76 Å, 6.2821 Å and 5.9461 Å. The calculation were carried out using the Burai software which in has a Quantum Espresso application. The first step carried was out on the calculate minimum total energy by varying the calculation parameters, namely the cutoff, k-point and PP. Then determine the best parameters to be used in the calculation. The calculation results was visualized using origin software which functions to produce band structure calculation graphs, DOS and PDOS as well as the electrical properties of the material. The compare the calculation results with the reference and error percentage. In study it was found that VBM consists of anti-bonding B s-X p, while CBM is dominated by B p-X p. Band gap energy Pb is greater than Sn. Band gap energy of molecular structure  $CH_3NH_3BX_3$  ( $B = Pb$  dan  $Sn$ ;  $X = Cl, I$  dan  $Br$ ) can increase with decreasing value of lattice constant.*

**Keyword** : *Electronic Properties, DFT, Gauss-view, Burai, Quantum Espresso, Origin.*