


DAFTAR ISI



SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI **i**

LEMBAR PERSETUJUAN **ii**

LEMBAR PENGESAHAN **iii**

LEMBAR PERSEMBAHAN **iv**

ABSTRAK **v**

ABSTRACT **vi**

KATA PENGANTAR **vii**

DAFTAR ISI **x**

DAFTAR GAMBAR **xi**

DAFTAR TABEL **xii**

1 PENDAHULUAN **1**

1.1 Latar Belakang 1

1.2 Rumusan Masalah 4

1.3 Tujuan Penelitian 4

1.4 Manfaat Penelitian 4

1.5 Batasan Masalah 4

1.6 Metode Pengumpulan Data 5

1.7 Sistematika Penulisan 5

2 TEORI DASAR **7**

2.1 Sel Surya Perovskit Halida Hibrida 7

2.2	Struktur Perovskit $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$	8
2.3	<i>Density Functional Theory</i> (DFT)	9
2.3.1	Teorema <i>Hohenberg-Kohn</i>	9
2.3.2	Persamaan <i>Kohn-Sham</i>	11
2.4	Pseudopotensial	14
2.5	<i>Quantum Espresso</i> (QE)	20
3	METODE PENELITIAN	23
3.1	Tempat dan Waktu Penelitian	23
3.2	Alat, Model Molekul dan Optimasi Penelitian	23
3.2.1	Alat penelitian	23
3.2.2	Struktur Molekul	24
3.2.3	Optimasi Penelitian	24
3.2.4	Optimasi <i>K-point</i>	24
3.2.5	Optimasi <i>Ecutwfc</i> , <i>Ecutrho</i> dan Pseudopotensial (PP)	24
3.2.6	Diagram Alir	25
3.3	Prosedur Penelitian	25
4	Hasil dan Pembahasan	27
4.1	Struktur Molekul	27
4.2	Variasi Parameter Perhitungan	28
4.3	Parameter Terbaik yang Digunakan	31
4.4	Sifat Elektronik	31
5	PENUTUP	44
5.1	Kesimpulan	44
5.2	Saran	44
	DAFTAR PUSTAKA	45
	LAMPIRAN	48
	A <i>Input File</i> dengan Pseudopotensial PBE (PAW)	48
	B Riwayat Hidup	52