

## ABSTRAK

Nama : Aidha Ratna Fajarini Sidik  
Program Studi : Fisika  
Judul : PERHITUNGAN SIFAT OPTIK ABSORBANSI MOLEKUL  $ABX_3$  ( $A = Cs, Li$ ;  $B = Pb$ ;  $X = I, Br, Cl$ ) FASE KUBIK DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Sifat optik absorbansi perovskit  $ABX_3$  ( $A = Cs, Li$ ;  $B = Pb$ ;  $X = I, Br, Cl$ ) pada fase kubik telah dihitung dalam penelitian ini menggunakan metode Density Functional Theory (DFT). Perhitungan sifat optik absorbansi dilakukan menggunakan *kogence.com* yang terdapat perangkat lunak berupa Quantum ESPRESSO. Hasil perhitungan kemudian akan divisualisasikan menggunakan perangkat lunak Origin yang berfungsi untuk menghasilkan spektrum absorbansi dari molekul  $ABX_3$  ( $A = Cs, Li$ ;  $B = Pb$ ;  $X = I, Br, Cl$ ). Pengujian absorbansi  $CsPbBr_3$ ,  $CsPbCl_3$ ,  $CsPbI_3$ ,  $LiPbBr_3$ ,  $LiPbCl_3$ ,  $LiPbI_3$  masing-masing berada pada panjang gelombang 305.58 nm, 380.88 nm, 301.86 nm, 225.03 nm, 201.25 nm, dan 211.57 nm. Material tersebut merupakan semikonduktor yang menjanjikan untuk aplikasi optoelektronik dan di atas semua itu sebagai kandidat yang baik untuk aplikasi fotovoltaik.

**Kata Kunci:** Sifat optik absorbansi, perovskit  $ABX_3$  ( $A = Cs, Li$ ;  $B = Pb$ ;  $X = I, Br, Cl$ ), DFT, Quantum ESPRESSO.

## **ABSTRACT**

*Name* : Aidha Ratna Fajarini Sidik  
*Studies Program* : Physics  
*Title* : **CALCULATION OF OPTICAL PROPERTIES  
ABSORBANCE OF  $ABX_3$  MOLECULES ( $A = Cs, Li; B = Pb; X = I, Br, Cl$ ) CUBIC PHASE WITH DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD**

*The optical properties of the absorbance perovskite  $ABX_3$  ( $A = Cs, Li; B = Pb; X = I, Br, Cl$ ) in the cubic phase have been calculated in this study using the Density Functional Theory (DFT) method. Calculation of the optical properties of absorbance is done using kogence.com which has software in the form of Quantum ESPRESSO. The calculation results will then be visualized using Origin software which functions to generate the absorbance spectrum of the  $ABX_3$  molecule ( $A = Cs, Li; B = Pb; X = I, Br, Cl$ ). Absorbance test of  $CsPbBr_3$ ,  $CsPbCl_3$ ,  $CsPbI_3$ ,  $LiPbBr_3$ ,  $LiPbCl_3$ ,  $LiPbI_3$  at wavelengths of 305.58 nm, 380.88 nm, 301.86 nm, 225.03 nm, 201.25 nm, and 211.57 nm. This material is a promising semiconductor for optoelectronic applications and especially as a good candidate for photovoltaic applications.*

**Keywords:** Absorbance optical properties,  $ABX_3$  perovskite ( $A = Cs, Li; B = Pb; X = I, Br, Cl$ ), DFT, Quantum ESPRESSO.