

DAFTAR ISI

SURAT PERNYATAAN KARYA SENDIRI.....	i
LEMBAR PERSETUJUAN.....	ii
LEMBAR PERSEMBAHAN	ii
ABSTRAK.....	v
ABSTRACT.....	vi
KATA PENGANTAR.....	vii
DAFTAR ISI.....	ix
BAB 1.....	1
PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Manfaat Penelitian	3
1.5 Batasan Masalah Penelitian	3
1.6 Metode Pengumpulan Data.....	3
1.7 Sistematika Penulisan	4
BAB 2.....	5
TEORI DASAR.....	5
2.1 <i>Perovskite Solar Cell</i>	5
2.2 Struktur <i>perovskite</i> ABX_3	6
2.3 <i>Density Functional Theory</i>	7
2.3.1 Aproksimasi Hohenberg-Kohn	7

2.3.2 Persamaan Kohn-Sham	8
2.3.3 Pseudopotentials	10
2.4 Sifat Optik Absorbansi.....	12
2.5 Quantum ESPRESSO	13
BAB 3.....	15
METODOLOGI PENELITIAN.....	15
3.1 Alat, Model Molekul, dan Optimasi Penelitian	15
3.2.1 Alat Penelitian.....	15
3.2.2 Struktur Molekul.....	15
3.2.3 Optimasi Penelitian	15
3.3 Prosedur Penelitian	18
BAB 4.....	20
HASIL DAN PEMBAHASAN.....	20
4.1 Variasi Parameter Perhitungan.....	20
4.2 Sifat Optik Absorbansi.....	22
4.2.1 Kurva Absorbansi Hasil Penelitian	22
BAB 5.....	29
PENUTUP.....	29
5.1 Kesimpulan	29
5.2 Saran.....	29
DAFTAR PUSTAKA	30

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Grafik Efisiensi PSC	6
Gambar 2.2 <i>Perovskite</i> ABX_3	6
Gambar 2.3 Algoritma Kohn-Sham	14
Gambar 2.4 Skema ilustrasi fungsi gelombang pseudopotensial (bagian atas) dan fungsi gelombang sistem all electron	11
Gambar 2.5 Algoritma perhitungan pada QE	14
Gambar 3.1 Gambaran konsep E_{cut}	14
Gambar 3.2 Ilustrasi perbedaan <i>pseudopotentials</i> LDA dan GGA	14
Gambar 4.1 Spektrum absorbansi molekul $CsPbBr_3$	22
Gambar 4.2 Spektrum absorbansi $CsPbBr_3$ (Kim et al., 2020).....	22
Gambar 4.3 Kurva bandgap molekul $CsPbBr_3$	22
Gambar 4.4 Spektrum absorbansi molekul $CsPbCl_3$	24
Gambar 4.5 Spektrum absorbansi $CsPbCl_3$ (Pandey, Kumar and Chakrabarti, 2019)	24
Gambar 4.6 Kurva bandgap molekul $CsPbCl_3$	24
Gambar 4.7 Spektrum absorbansi molekul $CsPbI_3$	25
Gambar 4.8 Spektrum absorbansi $CsPbI_3$ (Jing, Sa and Xu, 2019).....	25
Gambar 4.9 Kurva bandgap molekul $CsPbI_3$	25
Gambar 4.10 Spektrum absorbansi molekul $LiPb(Br:Cl:I)_3$	26
Gambar 4.11 Kurva bandgap molekul $LiPb(Br:Cl:I)_3$	27

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Optimasi Penelitian	17
Tabel 4.1 Nilai energi total (eV) dengan optimasi cut-off energy dan k-points ...	20

