

ABSTRAK

Nama : HANA RAMADHANI SHANAZ
Program Studi : Fisika
Judul : Kajian Struktur Elektronik Dua Fase CsPbI₃ Melalui Perhitungan Dengan Menggunakan Metode *Density Functional Theory*(DFT)

Telah dilakukan Kajian mengenai Struktur Elektronik Dua Fase CsPbI₃ Melalui Perhitungan dengan Menggunakan Metode *Density Funcional Theory*. Digunakan perovskit logam halida sebagai bahan penyerap cahaya pada sel surya. Bahan ini memiliki tingkat kestabilan yang tinggi serta proses fabrikasi nya yang mudah. Selain itu efisiensi konversi nya telah mencapai 10,1%. Dua Fase kristal yang digunakan adalah fase kubik dan fase tetragonal. Struktur elektronik yang dibahas meliputi kurva pita elektronik, serta kurva DOS (*Density of States*), kurva PDOS (*Projected Density of States*). Untuk mengetahui struktur elektronik nya dilakukan optimasi perhitungan, yaitu variasi konstanta kisi, *k-point*, dan energi *cut-off*. Optimasi perhitungan ini dilakukan untuk mendapatkan struktur dengan energi total minimum sehingga kestabilan nya bisa tercapai. Diketahui nilai energi celah pita dari CsPbI₃ kubik adalah 1,44eV pada kurva pita elektronik maupun DOS nya. Sedangkan untuk nilai energi celah pita dari CsPbI₃ tetragonal adalah 0,6 eV pada kurva pita elektronik dan pada DOS nya pula. Hal ini menunjukkan bahwa CsPbI₃ dapat digunakan untuk bahan semikonduktor perovskit.

Kata Kunci: CsPbI₃, Kubik, Tetragonal, Energi Celah Pita, Pseudopotensial, Kisi

ABSTRACT

Name : HANA RAMADHANI SHANAZ
Studies Program : *Physics*
Title : *STUDY OF ELECTRONIC STRUCTURE OF TWO PHASES OF CsPbI₃ THROUGH CALCULATIONS USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD*

A Study of the CsPbI₃ Two Phase Electronic Structure Study has been carried out Through Calculations using Methods Density Funcional Theory. Perovskite metal halide is used as a light-absorbing material on solar cells. This material has a high level of stability and easy fabrication process. In addition, the conversion efficiency has reached 10,1%. The two crystalline phases used are the cubic phase and the tetragonal phase. The electronic structures discussed include the bandelectronic curve, as well as the DOS Density of States curve, the PDOS Projected Density of States curve. To find out the electronic structure optimization calculations, namely variations in lattice constants, k-points and cut-off energy . This calculation optimization is done to get the structure with minimum total energy so that its stability can be achieved. It is known that the band gap energy value of 3 cubic CsPbI₃ is 1.44eV on the electronic and DOS curve curves. Whereas the band gap energy value of tetragonal CsPbI₃ is 0.6 eV on the band curve electronics and DOS as well. This shows that CsPbI₃ can be used for perovskite semiconductor materials

Keyword: CsPbI₃ , Cubic, Tetragonal, Band Gap, Pseudopotensial, Lattice