

**PERHITUNGAN SIFAT ELEKTRONIK  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb DAN Sn; X = Br,  
Cl DAN I) FASE KUBIK DENGAN METODE  
*DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

**SKRIPSI**

**JUNAINA SAHPUTRI SAGALA  
NIM. 0705201002**



**PROGRAM STUDI FISIKA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUMATERA UTARA  
MEDAN  
2024**

**PERHITUNGAN SIFAT ELEKTRONIK  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb DAN Sn; X = Br,  
Cl DAN I) FASE KUBIK DENGAN METODE  
*DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

**SKRIPSI**

*Diajukan Untuk Memenuhi Syarat Memperoleh Gelar Sarjana Sains (S.Si.)  
Dalam Bidang Ilmu Fisika*

**JUNAINA SAHPUTRI SAGALA  
NIM. 0705201002**



**PROGRAM STUDI FISIKA  
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUMATERA UTARA  
MEDAN  
2024**

## PERSETUJUAN SKRIPSI

Hal : Surat Persetujuan Skripsi

Lamp :-

Kepada Yth.,

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Universitas Islam Negeri Sumatera Utara Medan

*Assalamu'alaikum Wr. Wb.*

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta melakukan perbaikan, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi saudara,

Nama : Junaina Sahputri Sagala

NIM : 0705201002

Program Studi : Fisika

Judul : Perhitungan Sifat Elektronik  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) Fase Kubik dengan Metode *Density Functional Theory*

dapat disetujui untuk segera *dimunagasyahkan*. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Medan, 28 Agustus 2024 M

23 Safar 1446 H

SUMATERA UTARA MEDAN

Komisi Pembimbing:

Pembimbing I



Ratni Sirait, M.Pd.

NIP. 198905212023212042

Pembimbing II



Russell Ong, M.S.

NIP. 199306252020121010

## SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan dibawah ini,

Nama : Junaina Sahputri Sagala

NIM : 0705201002

Program Studi : Fisika

Judul : Perhitungan Sifat Elektronik  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) Fase Kubik dengan Metode *Density Functional Theory*

Menyatakan bahwa skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri, kecuali beberapa kutipan dan ringkasan yang masing-masing disebutkan sumbernya. Apabila dikemudian hari ditemukan plagiat dalam skripsi ini maka saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya peroleh dan sanksi lainnya yang berlaku.



Medan, 29 Juli 2024

  
Junaina Sahputri Sagala  
NIM. 0705201002

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN

LEMBAR PENGESAHAN

Nomor: B.549/ST/ST.V.2/PP.01.1/08/2024

Judul : Perhitungan Sifat Elektronik  $LiBX_3$  ( $B = Pb$  dan  $Sn$ ;  $X = Br, Cl$  dan  $I$ ) Fase Kubik dengan Metode *Density Functional Theory*  
Nama : Junaina Sahputri Sagala  
NIM : 0705201002  
Program Studi : Fisika  
Fakultas : Sains dan Teknologi  
Telah dipertahankan dihadapan Dewan Penguji Skripsi Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sumatera Utara dan dinyatakan **LULUS**.  
Pada Hari/Tanggal : Senin, 05 Agustus 2024  
Tempat : Kampus IV Tuntungan Fakultas Sains dan Teknologi

Tim Ujian Munaqasyah  
Ketua,

Nazaruddin Nasution, M.Pd.  
NIP. 198704212023211023

Dosen Penguji,

Penguji I

Ridwan Yusuf Lubis, M.Si.  
NIP. 199012182019031008

Penguji II

Ety Jumiati, S.Pd., M.Si.  
NIB. 1100000072

Penguji III

Ratni Sirait, M.Pd.  
NIP. 198905212023212042

Penguji IV

Russell Ong, M.S.  
NIP. 199306252020121010

Mengesahkan,  
Dewan Fakultas Sains dan Teknologi  
Universitas Islam Negeri Sumatera Utara



Zulfahri, M.Hum.  
NIP. 12009011008

**PERHITUNGAN SIFAT ELEKTRONIK  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb DAN Sn; X = Br, Cl DAN I) FASE KUBIK DENGAN METODE  
*DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

**ABSTRAK**

Sel surya *perovskite* adalah jenis sel surya yang menggunakan *perovskite* sebagai bahan aktif untuk menangkap dan mengonversi sinar matahari menjadi listrik. *Perovskite* adalah senyawa yang memiliki struktur kristal khas dengan formula umum  $\text{ABX}_3$ , di mana A dan B adalah kation berbeda, dan X adalah anion, biasanya halida (seperti klorida, bromida, atau iodida). Penelitian mengenai *perovskite* terus berlanjut untuk menemukan jenis *perovskite* dengan efisiensi tinggi. Efisiensi yang tinggi berkaitan dengan struktur elektronik sebagai bahan aktif. Struktur elektronik dapat dianalisis menggunakan metode komputasi melalui *Density Functional Theory* (DFT). Pada penelitian ini, *perovskite* yang diuji adalah *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) fase kubik. Selain itu, perhitungan dilakukan menggunakan perangkat lunak *Quantum ESPRESSO* dengan memodifikasi berbagai parameter seperti energi *cut-off*, *k-point*, dan konstanta kisi. Dari hasil optimasi perhitungan pada keenam *perovskite* tersebut, diperoleh nilai band gap, DOS dan PDOS pada *perovskite*  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I). Nilai energi celah pita ( $E_g$ ) yang dihasilkan untuk  $\text{LiPbBr}_3$  sebesar 1,71 eV, untuk  $\text{LiPbCl}_3$  sebesar 1.87 eV, untuk  $\text{LiPbI}_3$  sebesar 1.43 eV, untuk  $\text{LiSnBr}_3$  sebesar 0.51 eV, untuk  $\text{LiSnCl}_3$  sebesar 0.65 eV, dan untuk  $\text{LiSnI}_3$  sebesar 0.28 eV. Dan penelitian ini menyatakan nilai celah pita energi semakin besar dengan perubahan jari-jari atom yang semakin besar dari Sn ke Pb dan nilai celah pita energi semakin kecil dengan perubahan jari-jari atom yang semakin besar dari Cl, Br ke I. Perhitungan struktur elektronik dari  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) menunjukkan sifat bahan semikonduktor, dan berpotensi digunakan sebagai bahan penyerapan cahaya pada sel surya *perovskite*.

**Kata kunci:** *Perovskite*, DFT, *Quantum ESPRESSO*, Celah Pita Energi

***ELECTRONIC PROPERTIES CALCULATION OF LiBX<sub>3</sub> (B = Pb AND Sn;  
X = Br, Cl AND I) CUBIC PHASE USING DENSITY FUNCTIONAL  
THEORY***

**ABSTRACT**

*Perovskite solar cells are a type of solar cell that uses perovskite as the active material to capture and convert sunlight into electricity. Perovskite is a compound with a characteristic crystal structure with the general formula ABX<sub>3</sub>, where A and B are different cations, and X is an anion, usually a halide (such as chloride, bromide, or iodide). Research on perovskites continues in order to find types with high efficiency. High efficiency is related to the electronic structure of the active material. The electronic structure can be analyzed using computational methods through Density Functional Theory (DFT). In this study, the tested perovskites are LiBX<sub>3</sub> (B = Pb and Sn; X = Br, Cl, and I) in the cubic phase. Additionally, calculations were performed using Quantum ESPRESSO software by modifying various parameters such as energy cut-off, k-point, and lattice constant. From the optimization results of the calculations on these six perovskites, the values of band gap, DOS, and PDOS for LiBX<sub>3</sub> (B = Pb and Sn; X = Br, Cl, and I) were obtained. The band gap energy (E<sub>g</sub>) values obtained were 1.71 eV for LiPbBr<sub>3</sub>, 1.87 eV for LiPbCl<sub>3</sub>, 1.43 eV for LiPbI<sub>3</sub>, 0.51 eV for LiSnBr<sub>3</sub>, 0.65 eV for LiSnCl<sub>3</sub>, and 0.28 eV for LiSnI<sub>3</sub>. This study indicates that the band gap energy increases with the increasing atomic radius from Sn to Pb and decreases with the increasing atomic radius from Cl, Br to I. The electronic structure calculations of LiBX<sub>3</sub> (B = Pb and Sn; X = Br, Cl, and I) show semiconductor properties, and they have potential as light-absorbing materials in perovskite solar cells.*

**Keywords:** *Perovskite, DFT, Quantum ESPRESSO, Band Gap Energy*

## KATA PENGANTAR



### *Assalamu'alaikum Warahmatullahi Wabarakatuh*

*Alhamdulillahilladzi bini'matihi tatimmusholihat.* Segala puji bagi Allah *Subhanahu Wa Ta'ala* yang dengan nikmat dari-Nya, semua kebaikan menjadi sempurna. Dengan-Nya penulis meminta pertolongan dalam urusan dunia dan agama. Berkat rahmat dan karunia-Nya pula penulis dapat menyelesaikan skripsi yang *Insyallah* tepat pada waktunya. Shalawat beriringkan salam kepada baginda *Rasulullah Sallallahu A'alaihi wa sallam*, semoga kita mendapatkan syafaat di *yaumul akhir* nanti, *Allahumma aamiin.*

Skripsi ini telah penulis susun sebaik mungkin dan mendapatkan bantuan dan dukungan dari berbagai pihak sehingga memudahkan penulis dalam menyelesaikannya. Oleh karena itu penulis ingin menyampaikan banyak terima kasih kepada:

1. Bapak Prof. Dr. Nurhayati, M.Ag. selaku Rektor Universitas Islam Negeri Sumatera Utara Medan.
2. Bapak Dr. Zulham, S.H.I., M.Hum. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sumatera Utara Medan.
3. Bapak Nazaruddin Nasution, M.Pd. selaku Ketua Program Studi dan Suendri, M.Kom. selaku Sekretaris Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sumatera Utara Medan.
4. Bapak Dr. Abdul Halim Daulay, S.T., M.Si., selaku Dosen Penasehat Akademis yang telah membimbing serta mendorong setiap langkah mahasiswanya.
5. Ibu Ratni Sirait, M.Pd., selaku Dosen Pembimbing I dan Russell Ong, M.S., selaku Dosen Pembimbing Skripsi II yang telah meluangkan waktu untuk membimbing dengan penuh kesabaran, memberi ide dan arahan serta masukan kepada penulis dalam menyelesaikan skripsi ini.



6. Seluruh Dosen Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sumatera Utara Medan yang telah membimbing dan berbagi ilmu kepada penulis selama masa perkuliahan.
7. Teristimewa kepada Bapak Alm. Juhri Sahadat Sagala dan Ibu Sri Yani, selaku kedua orang tua yang telah menasehati dan mendo'akan tiada henti-hentinya, serta memberikan dukungan baik moril maupun materilnya selama penulis menempuh pendidikan dari kecil hingga sekarang.
8. Teman-teman fisika stambuk 2020, khususnya kepada sahabat saya Hilwa Salsabila Lubis, Siti Aulia Hutauruk dan Mesyadi yang telah memberikan bantuan, masukan, dan motivasi agar penulis semangat mengerjakan skripsi ini.

Adanya bantuan dari semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu, penulis mengucapkan terima kasih, *jazakumullahu khairan*, semoga apa yang telah diberikan dapat menjadi ladang pahala dan amal jariyah *Insyaa Allah*. Demikianlah skripsi ini disusun sebaik mungkin, jika masih terdapat kesalahan dalam penulisan atau tata bahasa maka dari itu penulis mengharapkan kritik dan saran dari pembaca. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi penulis maupun pembaca. *Allahumma aamiin*.

Medan, Agustus 2024  
Penulis,

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN

Junaina Sahputri Sagala  
0705201002

## DAFTAR ISI

<b>PERSETUJUAN SKRIPSI</b> .....	<b>i</b>
<b>SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI</b> .....	<b>ii</b>
<b>LEMBAR PENGESAHAN</b> .....	<b>iii</b>
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>iv</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>iv</b>
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	<b>v</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>vii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>x</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	<b>xiii</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	2
1.3 Batasan Masalah .....	3
1.4 Tujuan Penelitian .....	3
1.5 Manfaat Penelitian .....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>4</b>
2.1 Sel Surya .....	4
2.1.1 Struktur <i>Perovskite</i> .....	5
2.1.2 Kelebihan dan Kekurangan <i>Perovskite</i> .....	6
2.2 <i>Density Funcional Theory</i> (DFT) .....	7
2.2.1 Teorema Hohenberg-Kohn .....	8
2.2.2 Persamaan Kohn-Sham .....	9
2.3 <i>Pseudopotensial</i> .....	10
2.4 <i>Quantum ESPRESSO</i> .....	12
2.5 Karakteristik Sifat Elektronik Material .....	13
2.5.1 <i>Electronic Band Structure</i> .....	13
2.5.2 <i>Density of States</i> (DOS) .....	15
2.5.3 <i>Projected Density of States</i> (PDOS) .....	15
2.6 Penelitian Yang Relevan .....	16

<b>BAB III METODOLOGI PENELITIAN .....</b>	<b>18</b>
3.1 Tempat Dan Waktu Penelitian .....	18
3.1.1 Tempat Penelitian.....	18
3.1.2 Waktu Penelitian .....	18
3.2 Alat dan Bahan Penelitian.....	18
3.2.1 Alat Penelitian .....	18
3.3 Diagram Alir .....	19
3.3.1 Tahap Pengecekan Sifat Elektronik .....	19
3.3.2 Pembuatan File Input.....	20
3.3.2.1 <i>Script</i> LiPbI3.scf.in .....	20
3.3.3 Perhitungan <i>Self-Consistent Field</i> (SCF) .....	22
3.3.4 Penentuan Energi <i>Cut-off</i> Optimal .....	23
3.3.4.1 <i>Script</i> LiPbI3.ecut20.in .....	24
3.3.4.2 Diagram Alir Penentuan Energi <i>Cut-off</i> Optimal.....	26
3.3.5 Penentuan <i>K-Point</i> Optimal.....	26
3.3.5.1 <i>Script</i> LiPbI3.kpoint.in.....	27
3.3.5.2 Diagram Alir Penentuan <i>K-Point</i> Optimal .....	29
3.3.6 Penentuan Penentuan <i>Vc-Relax</i> .....	29
3.3.6.1 <i>Script</i> LiPbI3.vc-relax1.in.....	31
3.3.6.2 Diagram Alir Penentuan <i>Vc-Relax</i> .....	33
3.3.7. Perhitungan <i>Density of States</i> (DOS).....	33
3.3.7.1 Perhitungan scf untuk DOS.....	33
3.3.7.2 Perhitungan nscf untuk DOS .....	34
3.3.7.3 Perhitungan DOS.....	36
3.3.7 Perhitungan <i>Projected Density of States</i> (PDOS) .....	36
3.3.8.1 Perhitungan scf untuk PDOS .....	36
3.3.8.2 Perhitungan nscf untul PDOS .....	37
3.3.8.3 Perhitungan PDOS .....	39
3.3.9 Perhitungan <i>Band Structure</i> .....	39
3.3.9.1 Perhitungan scf untuk <i>Band Structure</i> .....	39
3.3.9.2 Perhitungan nscf untuk <i>Band Structure</i> .....	40
3.3.9.3 Perhitungan nscf Kedua <i>Band Structure</i> .....	42

3.3.9.4 Perhitungan <i>Band Structure</i> .....	43
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b> .....	<b>44</b>
4.1 Variasi Parameter Perhitungan .....	44
4.1.1 Energi <i>Cut-off</i> .....	44
4.1.2 <i>K-Point</i> .....	47
4.1.3 <i>Vc-Relax</i> .....	49
4.1.4 Struktur Elektronik .....	53
4.1.4.1 Hasil <i>Band Structure</i> dan <i>Density of States</i> (DOS) ..	53
4.1.4.2 Hasil <i>Projected Density of States</i> (PDOS) .....	56
<b>BAB V PENUTUP</b> .....	<b>61</b>
5.1 Kesimpulan .....	61
5.2 Saran .....	62
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	<b>63</b>
<b>LAMPIRAN</b> .....	<b>67</b>



## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>	<b>Judul Tabel</b>	<b>Halaman</b>
4.1	Hasil Perhitungan Energi <i>Cut-off</i> LiPbBr <sub>3</sub> , LiPbCl <sub>3</sub> , LiPbI <sub>3</sub> , LiSnBr <sub>3</sub> , LiSnCl <sub>3</sub> , dan LiSnI <sub>3</sub> .....	44
4.2	Hasil Perhitungan <i>k-point</i> LiPbBr <sub>3</sub> , LiPbCl <sub>3</sub> , LiPbI <sub>3</sub> , LiSnBr <sub>3</sub> , LiSnCl <sub>3</sub> , dan LiSnI <sub>3</sub> .....	46
4.3	Hasil Perhitungan Konstanta Kisi LiPbBr <sub>3</sub> , LiPbCl <sub>3</sub> , LiPbI <sub>3</sub> , LiSnBr <sub>3</sub> , LiSnCl <sub>3</sub> , dan LiSnI <sub>3</sub> .....	55
4.4	Perbandingan Konstanta Kisi.....	53
4.5	Nilai Celah Pita Energi.....	55
4.6	Perbandingan Celah Pita Energi.....	56



UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Judul Gambar	Halaman
2.1	Struktur Kristal <i>Perovskite</i> .....	6
2.2	Algoritma Kohn-Sham.....	10
2.3	Skema Ilustrasi <i>Pseudopotential</i> .....	11
2.4	Algoritma Kalkulasi yang Dilakukan pada <i>Quantum ESPRESSO</i> .....	12
2.5	<i>Quantum ESPRESSO</i> Sebagai Kotak Hitam ( <i>black box</i> ).....	13
2.6	Energi vs. Momentum Kristal untuk Semikonduktor.....	14
3.1	Diagram Alir Pengecekan Sifat Elektronik dari <i>Perovskite</i> $\text{LiBX}_3$ (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I).....	19
3.2	<i>Script</i> $\text{LiPbI}_3$ .scf.in.....	20
3.3	<i>Script</i> $\text{LiPbI}_3$ .ecut20.in.....	24
3.4	Diagram Alir Penentuan Energi <i>Cut-off</i> optimal.....	26
3.5	<i>Script</i> $\text{LiPbI}_3$ .kpoint.in.....	27
3.6	Diagram Alir penentuan <i>K-Point</i> Optimal.....	29
3.7	<i>Script</i> $\text{LiPbI}_3$ .vc-relax.in.....	31
3.8	Diagram Alir Penentuan <i>Vc-Relax</i> .....	33
3.9	<i>Script</i> $\text{LiSnI}_3$ .scf.in untuk Perhitungan DOS.....	34
3.10	<i>Script</i> $\text{LiPbI}_3$ .nscf.in untuk Perhitungan DOS.....	35
3.11	<i>Script</i> Perhitungan dos.in.....	36
3.12	<i>Script</i> $\text{LiSnI}_3$ .scf.in untuk Perhitungan PDOS.....	37
3.13	<i>Script</i> $\text{LiSnI}_3$ .nscf.in untuk Perhitungan PDOS.....	38
3.14	<i>Script</i> Perhitungan projwfc.in.....	39
3.15	<i>Script</i> $\text{LiSnI}_3$ .scf.in untuk Perhitungan <i>Band Structure</i> .....	40
3.16	<i>Script</i> $\text{LiSnI}_3$ .nscf.in untuk Perhitungan <i>Band Structure</i> .....	41
3.17	<i>Script</i> $\text{LiSnI}_3$ .nscf2.in untuk Perhitungan <i>Band Structure</i> .....	42
3.18	<i>Script</i> Perhitugan bands.in.....	43
4.1	Konstanta Kisi $\text{LiPbBr}_3$ , $\text{LiPbCl}_3$ , $\text{LiPbI}_3$ , $\text{LiSnBr}_3$ , $\text{LiSnCl}_3$ , dan $\text{LiSnI}_3$ (a) input awal dan (b) setelah perhitungan <i>Vc-Relax</i> .....	50

4.2	Hasil <i>Band Structure</i> dan <i>Density of States</i> (DOS) (a) $\text{LiPbBr}_3$ , (b) $\text{LiPbCl}_3$ , (c) $\text{LiPbI}_3$ , (d) $\text{LiSnBr}_3$ , (e) $\text{LiSnCl}_3$ , dan (f) $\text{LiSnI}_3$ .....	53
4.3	Hasil <i>Projected Density of States</i> (PDOS) (a) $\text{LiPbBr}_3$ , (b) $\text{LiPbCl}_3$ , (c) $\text{LiPbI}_3$ , (d) $\text{LiSnBr}_3$ , (e) $\text{LiSnCl}_3$ , dan (f) $\text{LiSnI}_3$ .....	56



UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN

## DAFTAR LAMPIRAN

No	Judul Lampiran	Halaman
1	<i>Script</i> Input SCF <i>Perovskite</i> $\text{LiPbI}_3$ .....	67
2	<i>Script</i> Input <i>Ecut-off</i> .....	67
3	<i>Script</i> Input <i>K-Point</i> .....	67
4	<i>Script</i> Input <i>Vc-Relax</i> .....	68
5	<i>Script</i> input <i>Density of states</i> .....	69
6	<i>Script</i> Input <i>Band Structure</i> .....	70
8	Perhitungan Persentase Error Konstanta Kisi.....	72
9	Perhitungan Persentase Error Celah Pita Energi.....	74



UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN