

## DAFTAR PUSTAKA

- Abbasi, A., & Khataee, A. (2019). *Band Gap Tunability and Structural Stability of Metal/Nonmetal Codoped Group-IV Tin Nanotubes: Effect Of Spin-Orbit Coupling*. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 114, 113644.
- Adeleke, O., Karimzadeh, S., & Jen, T.-C. (2023). *Machine Learning-Based Modelling in Atomic Layer Deposition Processes*. CRC Press.
- Azhar, M. R. (2020). *Perhitungan Struktur Elektronik CsBX<sub>3</sub> (B= Pb dan Sn, X= Cl, Br dan I) Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT) Sebagai Bahan Aktif Sel Surya Perovskit*. UIN Sunan Gunung Djati Bandung.
- Grewal, D. S. (2022). *Nanoelectronics with a Background in Nanotechnology*. Archers & Elevators Publishing House.
- Hahn, Y.-B., Mahmoudi, T., & Wang, Y. (2023). *Next-Generation Solar Cells: Principles and Materials*. CRC Press.
- Herna, H., Lutfi, F., Tambunan, E. N. T., Meinarti, Y., & Rini, A. S. (2022). *Perovskite Solar Cells yang Stabil Udara dan Efisiensi Menggunakan Nanostruktur ZnO Sebagai Elektron Transport Material*. *Komunikasi Fisika Indonesia*, 19(2), 75. <https://doi.org/10.31258/jkfi.19.2.75-82>
- Hidayanti, F. (2020). *Buku Ajar-Aplikasi Sel Surya*. Lembaga Penerbitan Universitas Nasional (LPU-UNAS).
- Himran, S. (2021). *Energi Surya: Konversi Termal & Fotovoltaik*. Penerbit Andi.
- Hung, N. T., Nugraha, A. R. T., & Saito, R. (2022). *Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics*. CRC Press.
- Ilyas, L. (2021). *Perhitungan Sifat Optik Absorbansi Molekul Organik Anorganik ABX<sub>3</sub> (A= CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>, B= Pb dan Sn, X= Cl, I, dan Br) dengan Metode Density Functional Theory (DFT) Sebagai Bahan Aktif Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)*. UIN Sunan Gunung Djati Bandung.
- Kebede, A., Amde, A., & Diaz, W. (2014). *Proceedings of The 4th Gondar School of Science and Technology*, 3 – 5 January 2014, University of Gondar. January 2014, 3–5.
- Mahyuddin, Muhammad Haris & Ginting, L. Y. (2020). *Simulasi Material dengan*

*Quantum ESPRESSO*. August.

- Malinkiewicz, O., Yella, A., Lee, Y. H., Espallargas, G. M., Graetzel, M., Nazeeruddin, M. K., & Bolink, H. J. (2014). *Perovskite Solar Cells Employing Organic Charge-Transport Layers*. *Nature Photonics*, *8*(2), 128–132. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2013.341>
- Nakamachi, E., Uetsuji, Y., Kuramae, H., Tsuchiya, K., & Hwang, H. (2013). *Process Crystallographic Simulation for Biocompatible Piezoelectric Material Design And Generation*. *Archives of Computational Methods in Engineering*, *20*, 155–183.
- Nimasari, E. P., Gestanti, R. A., & Nurfitri, K. (2022). *I Can't Search on Google for Answers": Validity Evidence of a Developed Computer-Based Assessment Application*. *Journal on English as a Foreign Language*, *13*(1), 25–55.
- Nursam, N. M., & Oktaviana, E. (2020). *Pengaruh Material Counter Electrode Pada Dye-Sensitized Solar Cell*. *Metalurgi*, *34*(3), 109–130. <https://doi.org/10.14203/metalurgi.v34i3.489>
- Pitriana, P. (2019a). *Kajian Pengaruh Kation dan Anion Penyusun dari Bahan Perovskit Berbasis Logam Halida pada Struktur Elektroniknya Melalui Perhitungan dengan Metode Density Functional Theory (DFT)*. Institut Teknologi Bandung. <https://digilib.itb.ac.id/gdl/view/35918>
- Pitriana, P. (2019b). *Kajian Pengaruh Kation dan Anion Penyusun dari Bahan Anorganik Perovskit Berbasis Logam Halida pada Struktur Elektroniknya melalui Perhitungan dengan Metode Density Functional Theory (DFT)*. Insitut Teknologi Bandung.
- Pitriana, P., Wungu, T. D. K., Herman, H., & Hidayat, R. (2019a). *Electronic Structure Calculations of Alkali Lead Iodide  $APbI_3$  ( $A=Li, Na, K, Rb$  or  $Cs$ ) using Density Functional Theory (DFT) Method*. *Journal of Physics: Conference Series*, *1204*(1). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1204/1/012107>
- Pitriana, P., Wungu, T. D. K., Herman, & Hidayat, R. (2019b). *The Characteristics of Band Structures and Crystal Binding in All-Inorganic Perovskite  $APbBr_3$  Studied by The First Principle Calculations Using The Density Functional Theory (DFT) method*. *Results in Physics*, *15*, 102592.

<https://doi.org/10.1016/J.RINP.2019.102592>

- Purwoto, B. H., Jatmiko, J., Fadilah, M. A., & Huda, I. F. (2018). *Efisiensi Penggunaan Panel Surya sebagai Sumber Energi Alternatif*. Emitor: Jurnal Teknik Elektro, 18(1), 10–14. <https://doi.org/10.23917/emitor.v18i01.6251>
- Sabeni, A., Fahdiran, R., & Sugihartono, I. (2022). *Review Metode Pseudopotensila untuk Analisa Band Gap Semikonduktor*. Prosiding Seminar Nasional Fisika (E- Journal), 10.
- Saraswati, E. M. D., Addini, D., Permatasari, F. A., & Aimon, A. H. (2015). *Studi Awal Impedansi Elektrokimia Lapisan Tipis*. 124–128.
- Shanaz, H. R. (2019). *Kajian Struktur Elektronik Dua Fase CsPbI<sub>3</sub> Melalui Perhitungan Dengan Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT)*. UIN Sunan Gunung Djati Bandung.
- Shockley, W., & Queisser, H. J. (1961). *Detailed Balance Limit Of Efficiency Of P-N Junction Solar Cells*. Journal of Applied Physics, 32(3), 510–519. <https://doi.org/10.1063/1.1736034>
- Sidik, A. R. F. (2022). *Perhitungan Sifat Optik Absorbansi Molekul ABX<sub>3</sub> (A= Cs, Li; B= Pb; X= I, Br, Cl) Fase Kubik dengan Metode Density Functional Theory*. UIN Sunan Gunung Djati Bandung.
- Suprayoga, E., Hasdeo, E. H., & Hanna, M. Y. (2021). *Modul Praktis “Research Starter Kit” untuk Riset Teori dan Komputasi Material*.
- Wardana, I. I. N. G. (2022). *Material Untuk Energi*. Media Nusa Creative (MNC Publishing).
- Wu, T., Qin, Z., Wang, Y., Wu, Y., Chen, W., Zhang, S., Cai, M., Dai, S., Zhang, J., Liu, J., Zhou, Z., Liu, X., Segawa, H., Tan, H., Tang, Q., Fang, J., Li, Y., Ding, L., Ning, Z., ... Han, L. (2021). *The Main Progress of Perovskite Solar Cells in 2020–2021*. Nano-Micro Letters, 13(1), 152. <https://doi.org/10.1007/s40820-021-00672-w>
- Xu, Z. (2018). 4 - *Fundamental Properties of Graphene*. In H. Zhu, Z. Xu, D. Xie, & Y. Fang (Eds.), Graphene (pp. 73–102). Academic Press. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812651-6.00004-5>
- Yurestira, I., Aji, A. P., Desfri, M. F., Rini, A. S., & Rati, Y. (2021). *Potential of ZnO/ZnS as Electron Transport Materials on Perovskite Solar Cells*. Journal

of Aceh Physics Society, 10(2), 41–47.

Zhou, Q., Wang, B., Meng, R., Zhou, J., Xie, S., Zhang, X., Wang, J., Yue, S., Qin, B., Zhou, H., & Zhang, Y. (2020). *Understanding Temperature-Dependent Charge Extraction and Trapping in Perovskite Solar Cells*. *Advanced Functional Materials*, 30(22), 2000550. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/adfm.202000550>



UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN

# LAMPIRAN I

## SCRIPT INPUT *PEROVSKITE* LiPbI<sub>3</sub>

### 1. Script Input SCF

```
1 &CONTROL
2 calculation='scf',
3 restart_mode='from_scratch',
4 prefix='LiPbI3',
5 pseudo_dir='../pseudo/',
6 outdir='../tmp/',
7 /
8 &SYSTEM
9 ibrav=1,
10 a=5,
11 nat=5,
12 ntyp=3,
13 ecutwfc=50.0,
14 ecutrho=400.0,
15 /
16 &ELECTRONS
17 conv_thr=1d-8,
18 /
19 ATOMIC_SPECIES
20 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
21 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
22 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
23 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
24 Pb 0.5 0.5 0.5
25 I 0.0 0.5 0.5
26 I 0.5 0.5 0.0
27 I 0.5 0.0 0.5
28 Li 0.0 0.0 0.0
29 K_POINTS automatic
30 4 4 4 0 0 0
```

### 2. Script Input *Ecut-off*

```
1 &CONTROL
2 calculation='scf',
3 restart_mode='from_scratch',
4 prefix='LiPbI3',
5 pseudo_dir='../pseudo/',
6 outdir='../tmp/',
7 /
8 &SYSTEM
9 ibrav=1,
10 a=5,
11 nat=5,
12 ntyp=3,
13 ecutwfc=20.0
14 /
15 &ELECTRONS
16 conv_thr=1d-8,
17 /
18 ATOMIC_SPECIES
19 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
20 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
21 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
22 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
23 Pb 0.5 0.5 0.5
24 I 0.0 0.5 0.5
25 I 0.5 0.5 0.0
26 I 0.5 0.0 0.5
27 Li 0.0 0.0 0.0
28 K_POINTS automatic
29 4 4 4 0 0 0
```

### 3. Script Input *K-Point*

```

1  &CONTROL
2  calculation='scf',
3  restart_mode='from_scratch',
4  prefix='LiPbI3',
5  pseudo_dir='../pseudo/',
6  outdir='../tmp/',
7  /
8  &SYSTEM
9 ibrav=1,
10 a=5,
11 nat=5,
12 ntyp=3,
13 ecutwfc=90.0,
14 ecutrho=720.0,
15 /
16 &ELECTRONS
17 conv_thr=1d-8,
18 /
19 ATOMIC_SPECIES
20 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
21 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
22 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
23 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
24 Pb 0.5 0.5 0.5
25 I 0.0 0.5 0.5
26 I 0.5 0.5 0.0
27 I 0.5 0.0 0.5
28 Li 0.0 0.0 0.0
29 K_POINTS automatic
30 1 1 1 0 0

```

### 4. Script Input *Vc-Relax*

```

1  &CONTROL
2  calculation='vc-relax',
3  restart_mode='from_scratch',

```

```

4  prefix='LiPbI3',
5  pseudo_dir='../pseudo/',
6  outdir='../tmp/',
7  forc_conv_thr=1d-5,
8  /
9  &SYSTEM
10 ibrav=1,
11 a=5.0,
12 nat=5,
13 ntyp=3,
14 ecutwfc=90.0,
15 ecutrho=720.0,
16 /
17 &ELECTRONS
18 mixing_beta=0.5,
19 conv_thr=1d-6,
20 /
21 &IONS
22 ion_dynamics='bfgs',
23 /
24 &CELL
25 cell_dynamics='bfgs',
26 press=0.0,
27 press_conv_thr=0.5,
28 /
29 ATOMIC_SPECIES
30 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
31 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
32 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
33 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
34 Pb 0.5 0.5 0.5
35 I 0.0 0.5 0.5
36 I 0.5 0.5 0.0
37 I 0.5 0.0 0.5
38 Li 0.0 0.0 0.0
39 K_POINTS automatic
40 9 9 9 0 0

```

## 5. Script input Density of States

### a. SCF

```

1 &CONTROL
2  calculation='scf',
3  restart_mode='from_scratch',
4  prefix='LiPbI3',
5  pseudo_dir='../pseudo/',
6  outdir='../tmp/',
7 /
8 &SYSTEM
9 ibrav=1,
10 a= 6.3207197648,
11 nat=5,
12 ntyp=3,
13 ecutwfc=90.0,
14 ecutrho=720.0,
15 /
16 &ELECTRONS
17 conv_thr=1d-8,
18 /
19 ATOMIC_SPECIES
20 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
21 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
22 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
23 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
24 Pb 0.5 0.5 0.5
25 I 0.0 0.5 0.5
26 I 0.5 0.5 0.0
27 I 0.5 0.0 0.5
28 Li 0.0 0.0 0.0
29 K_POINTS automatic
30 9 9 0 0 0

```

### b. NSCF

```

1 &CONTROL
2  calculation='nscf',
3  restart_mode='from_scratch',
4  prefix='LiPbI3',
5  pseudo_dir='../pseudo/',
6  outdir='../tmp/',
8 /

```

```

9 &SYSTEM
10 ibrav=1,
11 a=6.3207197648,
12 nat=5,
13 ntyp=3,
14 ecutwfc=90.0,
15 ecutrho=720.0,
16 occupations='tetrahedra',
17 /
18 &ELECTRONS
19 conv_thr=1d-6,
20 /
21 ATOMIC_SPECIES
22 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
23 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
24 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
25 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
26 Pb 0.5 0.5 0.5
27 I 0.0 0.5 0.5
28 I 0.5 0.5 0.0
29 I 0.5 0.0 0.5
30 Li 0.0 0.0 0.0
31 K_POINTS automatic
32 2 12 12 0 0 0

```

### c. DOS

```

1 &DOS
2  prefix='LiPbI3',
3  outdir='../tmp/',
4  fildos='liPbI3.dos.dat'
5  emin=-9.0,
6  emax=16.0,
7 /

```

### d. PDOS

```

1 &projwfc
2  prefix='LiPbI3',
3  outdir='../tmp/',
4  degauss=0.01
4 /

```

## 6. Script Input Band Structure

### a. SCF

```

1  &CONTROL
2  calculation='scf',
3  restart_mode='from_scratch',
4  prefix='LiPbI3',
5  pseudo_dir='../pseudo/',
6  outdir='../tmp/',
7  /
8  &SYSTEM
9 ibrav=1,
10 a=6.3207197648,
11 nat=5,
12 ntyp=3,
13 ecutwfc=90.0,
14 ecutrho=720.0,
15 nbnd=24,
16 /
17 &ELECTRONS
18 conv_thr=1d-8,
19 /
20 ATOMIC_SPECIES
21 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
22 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
23 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
24 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
25 Pb 0.5 0.5 0.5
26 I 0.0 0.5 0.5
27 I 0.5 0.5 0.0
28 I 0.5 0.0 0.5
29 Li 0.0 0.0 0.0
30 K_POINTS automatic
31 12 12 12 0 0 0

```

### b. NSCF

```

1  &CONTROL
2  calculation='nscf',
3  restart_mode='from_scratch',
4  prefix='LiPbI3',
5  pseudo_dir='../pseudo/',
6  outdir='../tmp/',
8  /

```

```

9  &SYSTEM
10 ibrav=1,
11 a=6.3207197648,
12 nat=5,
13 ntyp=3,
14 ecutwfc=60.0,
15 ecutrho=480.0,
16 occupations='tetrahedra',
17 /
18 &ELECTRONS
19 conv_thr=1d-6,
20 /
21 ATOMIC_SPECIES
22 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
23 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
24 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
25 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
26 Pb 0.5 0.5 0.5
27 I 0.0 0.5 0.5
28 I 0.5 0.5 0.0
29 I 0.5 0.0 0.5
30 Li 0.0 0.0 0.0
31 K_POINTS automatic
32 12 12 12 0 0 0

```

### c. NSCF (2)

```

1 &CONTROL
2 calculation='bands',
3 restart_mode='from_scratch',
4 prefix='LiPbI3',
5 pseudo_dir='../pseudo/',
6 outdir='../tmp/',
7 /
8 &SYSTEM
9 ibrav=1,
10 a=6.3207197648,
11 nat=5,
12 ntyp=3,
13 ecutwfc=90.0,
14 ecutrho=720.0,
15 nbnd=24,
16 /

```



```

17 &ELECTRONS
18 conv_thr=1d-8,
19 /
20 ATOMIC_SPECIES
21 Li 6.941 Li.pbe-mt_fhi.UPF
22 Pb 207.200 Pb.pbe-mt_fhi.UPF
23 I 126.90447 I.pbe-mt_fhi.UPF
24 ATOMIC_POSITIONS (crystal)
25 Pb 0.5 0.5 0.5
26 I 0.0 0.5 0.5
27 I 0.5 0.5 0.0
28 I 0.5 0.0 0.5
29 Li 0.0 0.0 0.0
30 K_POINTS {crystal_b}
31 7
32

```

```

33 gG 20
34 X 20
35 M 20
36 gG 20
37 R 20
38 X 20
39 R 20

```

#### d. Bands

```

1 &BANDS
2 outdir='../tmp/', ,
3 prefix='LiPbI3'
4 filband=LiPbI3.bands
5 /

```



UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUMATERA UTARA MEDAN

**LAMPIRAN II**  
**PERHITUNGAN PERSENTASE GALAT KONSTANTA KISI**

<i>Perovskite</i>	Konstanta Kisi Perhitungan (Å)	Konstanta Kisi Referensi (Pitriana, 2019) (Å)	Persentase Galat (%)
LiPbBr <sub>3</sub>	5,938	5,928	0,168
LiPbI <sub>3</sub>	6,321	6,321	0
LiSnI <sub>3</sub>	6,175	6,158	0,276

**Pembuktian perhitungan *perovskite* LiPbBr<sub>3</sub>**

**Diketahui :**

Konstanta Kisi Perhitungan : 5,938 Å

Konstanta Kisi Referensi : 5,928 Å

**Ditanya :**

Persentase Galat.....?

**Penyelesaian**

$$\begin{aligned}
 \text{Persentase Galat} &= \frac{\text{Konstanta Kisi Perhitungan} - \text{Konstanta Kisi Referensi}}{\text{Konstanta Kisi Referensi}} \times 100 \% \\
 &= \frac{5,938 \text{ Å} - 5,928 \text{ Å}}{5,928 \text{ Å}} \times 100 \% \\
 &= \frac{0,01 \text{ Å}}{5,928 \text{ Å}} \times 100 \% \\
 &= 0,00168 \times 100 \%
 \end{aligned}$$

Persentasi Galat = 0,168 %

**Pembuktian perhitungan *perovskite* LiPbI<sub>3</sub>**

**Diketahui :**

Konstanta Kisi Perhitungan : 6,321 Å

Konstanta Kisi Referensi : 6,321 Å

**Ditanya :**

Persentase Galat.....?

**Penyelesaian**

$$\begin{aligned}
 \text{Persentase Galat} &= \frac{\text{Konstanta Kisi Perhitungan} - \text{Konstanta Kisi Referensi}}{\text{Konstanta Kisi Referensi}} \times 100 \% \\
 &= \frac{6,321 \text{ Å} - 6,321 \text{ Å}}{6,321 \text{ Å}} \times 100 \%
 \end{aligned}$$

$$= \frac{0 \text{ \AA}}{6,321 \text{ \AA}} \times 100 \%$$

$$= 0 \times 100 \%$$

Persentasi Galat = 0 %

### Pembuktian perhitungan *perovskite* $\text{LiSnI}_3$

#### Diketahui :

Konstanta Kisi Perhitungan : 6,175 Å

Konstanta Kisi Referensi : 6,158 Å

#### Ditanya :

Persentase Galat.....?

#### Penyelesaian

Persentase Galat =  $\frac{\text{Konstanta Kisi Perhitungan} - \text{Konstanta Kisi Referensi}}{\text{Konstanta Kisi Referensi}} \times 100 \%$

$$= \frac{6,175 \text{ \AA} - 6,158 \text{ \AA}}{6,158 \text{ \AA}} \times 100 \%$$

$$= \frac{0,017 \text{ \AA}}{6,158 \text{ \AA}} \times 100 \%$$

$$= 0,00276 \times 100 \%$$

Persentasi Galat = 0,276 %

**LAMPIRAN III**  
**PERHITUNGAN PERSENTASE GALAT CELAH PITA ENERGI**

<i>Perovskite</i>	<b>Eg Perhitungan (eV)</b>	<b>Eg Referensi (Pitriana, 2019) (eV)</b>	<b>Persentase Galat (%)</b>
LiPbBr <sub>3</sub>	1,71	1,708	0,117
LiPbI <sub>3</sub>	1,43	1,400	2,142
LiSnI <sub>3</sub>	0,29	0,287	1,045

**Pembuktian perhitungan *perovskite* LiPbBr<sub>3</sub>**

**Diketahui :**

Eg Perhitungan : 1,71 eV

Eg Referensi : 1,708 eV

**Ditanya :**

Persentase Galat.....?

**Penyelesaian**

$$\begin{aligned}
 \text{Persentase Galat} &= \frac{\text{Eg Perhitungan} - \text{Eg Referensi}}{\text{Eg Referensi}} \times 100 \% \\
 &= \frac{1,71 \text{ eV} - 1,708 \text{ eV}}{1,708 \text{ eV}} \times 100 \% \\
 &= \frac{0,002 \text{ eV}}{1,708 \text{ eV}} \times 100 \% \\
 &= 0,00117 \times 100 \%
 \end{aligned}$$

Persentasi Galat = 0,117%

**Pembuktian perhitungan *perovskite* LiPbI<sub>3</sub>**

**Diketahui :**

Eg Perhitungan : 1,43 eV

Eg Referensi : 1,400 eV

**Ditanya :**

Persentase Galat.....?

**Penyelesaian**

$$\begin{aligned}
 \text{Persentase Galat} &= \frac{\text{Eg Perhitungan} - \text{Eg Referensi}}{\text{Eg Referensi}} \times 100 \% \\
 &= \frac{1,43 \text{ eV} - 1,400 \text{ eV}}{1,400 \text{ eV}} \times 100 \%
 \end{aligned}$$

$$= \frac{0,03 \text{ eV}}{1,400 \text{ eV}} \times 100 \%$$

$$= 0,02142 \times 100 \%$$

Persentasi Galat = 2,142 %

### Pembuktian perhitungan *perovskite* $\text{LiSnI}_3$

#### Diketahui :

Eg Perhitungan : 0,29eV

Eg Referensi : 0,287 eV

#### Ditanya :

Persentase Galat.....?

#### Penyelesaian

$$\text{Persentase Galat} = \frac{\text{Eg Perhitungan} - \text{Eg Referensi}}{\text{Eg Referensi}} \times 100 \%$$

$$= \frac{0,29 \text{ eV} - 0,287 \text{ eV}}{0,287 \text{ eV}} \times 100 \%$$

$$= \frac{0,003 \text{ eV}}{0,287 \text{ eV}} \times 100 \%$$

$$= 0,01045 \times 100 \%$$

Persentasi Galat = 1,045 %

## RIWAYAT HIDUP



Junaina Sahputri Sagala adalah nama penulis Skripsi ini, lahir di Pematangsiantar tanggal 15 Desember 2002. Lahir dari keluarga Bapak Juhri dan Ibu Sri, merupakan anak pertama dari tiga bersaudara. Penulis pertama kali menempuh pendidikan dimulai dari SDN 127970 Pematangsiantar pada tahun 2008 dan lulus pada tahun 2014. Kemudian melanjutkan pendidikan di Sekolah MTS Negeri Pematangsiantar dan lulus pada tahun 2017. Penulis kemudian melanjutkan pendidikan di Sekolah SMAN 5 Pematangsiantar dan lulus pada tahun 2020. Pada tahun 2020 penulis terdaftar sebagai Mahasiswa di Program Studi Fisika Universitas Islam Negeri Sumatera Utara Medan untuk memperoleh gear Strata-1 (S1) dan lulus pada tahun 2024.

Atas Berkat Karunia Allah SWT, dukungan, do'a, motivasi dan materil dari kedua Orang Tua, serta arahan dan bimbingan dari berbagai pihak sehingga penulis dapat menyelesaikan Skripsi. Semoga dengan adanya penulisan Skripsi ini mampu memberikan kontribusi lebih bagi dunia pendidikan terkhusus program studi Fisika. Akhir kata penulis mengucapkan Hamdallah atas terselesaikannya Skripsi yang berjudul "Perhitungan Sifat Elektronik  $\text{LiBX}_3$  (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) Fase Kubik dengan Metode *Density Functional Theory*".