

**STUDI PENGARUH DEFEK KEKOSONGAN
HALOGEN TERHADAP SIFAT ELEKTRONIK
MATERIAL *PEROVSKITE* CsPbF₃ MENGGUNAKAN
METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Skripsi

**Disusun untuk memenuhi salah satu syarat
memperoleh gelar Sarjana Sains**



**Muhamad Habbiebie Robbi
1306622004**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2026**

ABSTRAK

MUHAMAD HABBIEBIE ROBBI. Studi Pengaruh Defek Kekosongan Halogen terhadap Sifat Elektronik Material *Perovskite* CsPbF₃ Menggunakan Metode *Density Functional Theory*. Dibawah bimbingan **TEGUH BUDI PRAYITNO** dan **MARISA ULFA**.

Material *perovskite* anorganik CsPbF₃ merupakan material semikonduktor yang berpotensi diaplikasikan pada perangkat optoelektronik karena memiliki stabilitas struktur dan sifat elektronik yang baik. Keberadaan defek kekosongan halogen diperkirakan dapat memengaruhi sifat elektronik material sehingga diperlukan kajian secara teoritis. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis pengaruh defek kekosongan halogen terhadap sifat elektronik material *perovskite* CsPbF₃ menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Perhitungan dilakukan menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO dengan pendekatan *Generalized Gradient Approximation* (GGA) dan fungsi pertukaran-korelasi Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE). Tahapan penelitian meliputi uji konvergensi parameter komputasi, optimasi struktur, perhitungan *Self Consistent Field* (SCF), *band structure*, *Density of States* (DOS), dan *Projected Density of States* (PDOS). Defek dimodelkan menggunakan supercell $2 \times 2 \times 2$ dengan menghilangkan satu atom fluorin. Hasil penelitian menunjukkan bahwa parameter komputasi optimum diperoleh pada energi *cut-off* sebesar 80 Ry dan *k-point mesh* $8 \times 8 \times 8$. Analisis struktur pita energi, DOS, dan PDOS menunjukkan bahwa keberadaan defek kekosongan halogen menyebabkan perubahan distribusi keadaan elektronik dan kontribusi orbital dibandingkan struktur bulk, sehingga mengindikasikan adanya perubahan karakter elektronik material CsPbF₃. Hasil penelitian ini diharapkan dapat menjadi referensi dalam pengembangan material *perovskite* untuk aplikasi optoelektronik.

Kata kunci: *Density Functional Theory*, Quantum ESPRESSO, CsPbF₃, *perovskite*, defek kekosongan halogen.

ABSTRACT

MUHAMAD HABBIEBIE ROBBI. *Study of the Effect of Halogen Vacancy Defects on the Electronic Properties of CsPbF₃ Perovskite Material Using Density Functional Theory.* Supervised by **TEGUH BUDI PRAYITNO** and **MARISA ULFA.**

The inorganic perovskite CsPbF₃ is a promising semiconductor material for optoelectronic applications due to its structural stability and favorable electronic properties. Halogen vacancy defects are expected to modify its electronic characteristics, making theoretical investigations essential. This study aims to analyze the effect of halogen vacancy defects on the electronic properties of CsPbF₃ using the Density Functional Theory (DFT) method. The calculations were performed using Quantum ESPRESSO within the Generalized Gradient Approximation (GGA) employing the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) exchange–correlation functional. The computational procedure included convergence tests, structural optimization, Self-Consistent Field (SCF) calculations, band structure, Density of States (DOS), and Projected Density of States (PDOS) analyses. Halogen vacancies were modeled using a $2 \times 2 \times 2$ supercell by removing one fluorine atom. The results indicate that the optimal computational parameters are an energy cut-off of 80 Ry and an $8 \times 8 \times 8$ k -point mesh. The band structure, DOS, and PDOS analyses reveal that halogen vacancy defects modify the electronic state distribution and orbital contributions compared with the bulk structure, indicating changes in the electronic characteristics of CsPbF₃. These findings provide useful insights for the development of perovskite materials for future optoelectronic applications.

Keywords: *Density Functional Theory, Quantum ESPRESSO, CsPbF₃, perovskite, halogen vacancy defects.*

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

STUDI PENGARUH DEFEK KEKOSONGAN HALOGEN TERHADAP SIFAT ELEKTRONIK MATERIAL *PEROVSKITE* CsPbF₃ MENGUNAKAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Nama : Muhamad Habbiebie Robbi

No. Registrasi : 1306622004

Nama

Tanggal

Penanggung Jawab

Dekan : Dr. Hadi Nasbey, S.Pd., M.Si.
NIP. 197909162005011004

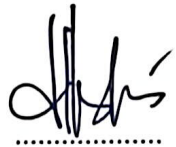


Wakil Penanggung Jawab

Wakil Dekan I : Dr. Meiliasari, S.Pd., M.Sc.
NIP. 197905042009122002

Ketua : Riser Fahdiran, S.Si., M.Si.
NIP. 198307172009121008

Sekretaris : Prof. Dr. Esmar Budi, M.T.
NIP. 197207281999031002

 10/8/2026

 28/7/2026

 28/7/2026

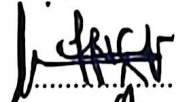
Anggota

Pembimbing I : Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si.
NIP. 198205262008121001

Pembimbing II : Marisa Ulfa, M.Si.
NIP. 199003042024062001

Penguji : Siti Julia, M.Si.
NIP. 199205282025062007

 28/7/2026

 29/7/2026

 28/7/2026

Dinyatakan lulus ujian skripsi pada tanggal 21 Juli 2026

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini menyatakan dengan sebenarnya bahwa skripsi yang berjudul **“Studi Pengaruh Defek Kekosongan Halogen Terhadap Sifat Elektronik Material *Perovskite* CsPbF₃ Menggunakan Metode *Density Functional Theory*”** merupakan hasil karya ilmiah yang saya susun secara mandiri di bawah bimbingan dosen pembimbing sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Universitas Negeri Jakarta.

Seluruh informasi yang berasal dari karya atau penulis lain yang dipublikasikan yang digunakan dalam teks skripsi ini, telah dicantumkan dalam “Daftar Pustaka” sesuai dengan norma, kaidah, dan etika penulisan ilmiah.

Jika dikemudian hari terbukti bahwa sebagian skripsi ini bukan hasil karya saya sendiri, saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya peroleh dan sanksi-sanksi lainnya sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Jakarta, 21 Juli 2026



Muhamad Habbiebie Robbi



KEMENTERIAN PENDIDIKAN TINGGI, SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
PERPUSTAKAAN DAN KEARSIPAN

Jalan Rawamangun Muka Jakarta 13220
Telepon/Faksimili: 021-4894221
Laman: lib.unj.ac.id

LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademika Universitas Negeri Jakarta, yang bertanda tangan di bawah ini, saya:

Nama : Muhamad Habbiebie Robbi
NIM : 1306622004
Fakultas/Prodi : MIPA / Fisika
Alamat email : mochhabibier@gmail.com

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Perpustakaan dan Kearsipan Universitas Negeri Jakarta, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif atas karya ilmiah:

☒ Skripsi ☐ Tesis ☐ Disertasi ☐ Lain-lain (.....)

yang berjudul :

Studi Pengaruh Defek Kekosongan Halogen Terhadap Sifat
Elektronik Material Perovskite CsPbF₃ Menggunakan Metode
Density Functional Theory

Dengan Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif ini Perpustakaan dan Kearsipan Universitas Negeri Jakarta berhak menyimpan, mengalihmediakan, mengelolanya dalam bentuk pangkalan data (*database*), mendistribusikannya, dan menampilkan/mempublikasikannya di internet atau media lain secara *fulltext* untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan atau penerbit yang bersangkutan.

Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Jakarta

Penulis

(M. Habbiebie Robbi)
nama dan tanda tangan

KATA PENGANTAR

Puji dan sukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala rahmat NYA sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Karya ilmiah yang berjudul "Studi Pengaruh Defek Kekosongan Halogen terhadap Sifat Elektronik Material *Perovskite* CsPbF₃ Menggunakan Metode *Density Functional theory* " ini disusun sebagai tugas akhir untuk mendapatkan gelar Sarjana Sains (S.Si).

Penulis menyadari bahwa skripsi ini tidak dapat terselesaikan tanpa bantuan dan arahan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis dengan tulus ingin berterima kasih kepada:

1. Allah Subhanahu wa Ta'ala, atas segala rahmat, karunia, kesehatan, kemudahan, dan kekuatan yang diberikan sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.
2. Bapak Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si., selaku Dosen Pembimbing I sekaligus Koordinator Program Studi Fisika Universitas Negeri Jakarta, yang telah meluangkan waktu, tenaga, dan pikiran untuk memberikan arahan, bimbingan, masukan, serta motivasi selama proses penyusunan skripsi ini.
3. Ibu Marisa Ulfa, M.Si., selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan bimbingan, saran, kritik, serta masukan yang sangat bermanfaat sehingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.
4. Ayahanda tercinta, Muhammad Basuni, yang telah mengajarkan bahwa keterbatasan bukanlah alasan untuk berhenti memperjuangkan masa depan anak-anaknya. Meskipun Ayah tidak pernah merasakan bangku perkuliahan hingga menjadi seorang sarjana, Ayah selalu berusaha agar penulis dapat meraih pendidikan yang lebih tinggi. Terima kasih atas doa, pengorbanan, dan kasih sayang yang tidak pernah berhenti mengiringi setiap langkah penulis. Gelar sarjana ini adalah milik Ayah juga.
5. Ibunda tercinta, Sri Purtini, yang dengan penuh kasih sayang dan kerja keras selalu mengutamakan pendidikan anak-anaknya. Meskipun kesempatan untuk menjadi seorang sarjana belum pernah Ibu rasakan, Ibu tidak pernah

berhenti berjuang agar penulis dapat mencapai cita-cita tersebut. Terima kasih atas setiap doa yang dipanjatkan, setiap lelah yang disembunyikan, dan setiap pengorbanan yang diberikan. Gelar sarjana ini adalah persembahan kecil untuk Ibu, sebagai bukti bahwa seluruh perjuangan dan doa Ibu telah mengantarkan penulis sampai pada titik ini.

6. Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN), khususnya atas fasilitas *High Performance Computing* (HPC) yang telah digunakan dalam proses komputasi dan simulasi pada penelitian ini.
7. Robiatul Hafidoh, yang dengan penuh kasih, kesabaran, dan ketulusannya selalu menemani setiap langkah penulis selama menyelesaikan skripsi ini. Terima kasih karena selalu ada untuk mendengarkan setiap cerita, memberikan saran, menguatkan ketika semangat mulai menurun, serta menghadirkan tawa dan kebahagiaan di tengah hari-hari yang penuh tekanan. Kehadiranmu bukan hanya menjadi penyemangat, tetapi juga menjadi salah satu alasan terbesar bagi penulis untuk terus berjuang menyelesaikan pendidikan, menata masa depan, dan menjadi pribadi yang lebih baik. Semoga setiap langkah yang sedang diperjuangkan hari ini dapat menjadi awal dari banyak impian yang akan diwujudkan bersama.
8. Jore Kirana, selaku teman yang menjadi saksi berbagai proses penyusunan skripsi, termasuk menemani penulis selama begadang dalam menyelesaikan simulasi, analisis data, maupun penulisan skripsi.
9. Keluarga Besar Bimbingan Belajar Sinteta, yang telah menjadi tempat penulis menyelesaikan sebagian besar proses penyusunan skripsi. Di sela-sela aktivitas mengajar, penulis selalu menyempatkan diri untuk melanjutkan pengerjaan skripsi sehingga tempat ini menjadi saksi perjalanan penyelesaian penelitian ini.
10. Teman-teman Program Studi Fisika Universitas Negeri Jakarta, khususnya Sayid, Syawal, Firman, serta rekan-rekan dalam grup Lulus Wisuda dan Kumon, yang selalu berbagi informasi, berdiskusi, serta saling membantu mengenai perkuliahan maupun berbagai hal yang berkaitan dengan bidang fisika selama proses penyusunan skripsi.

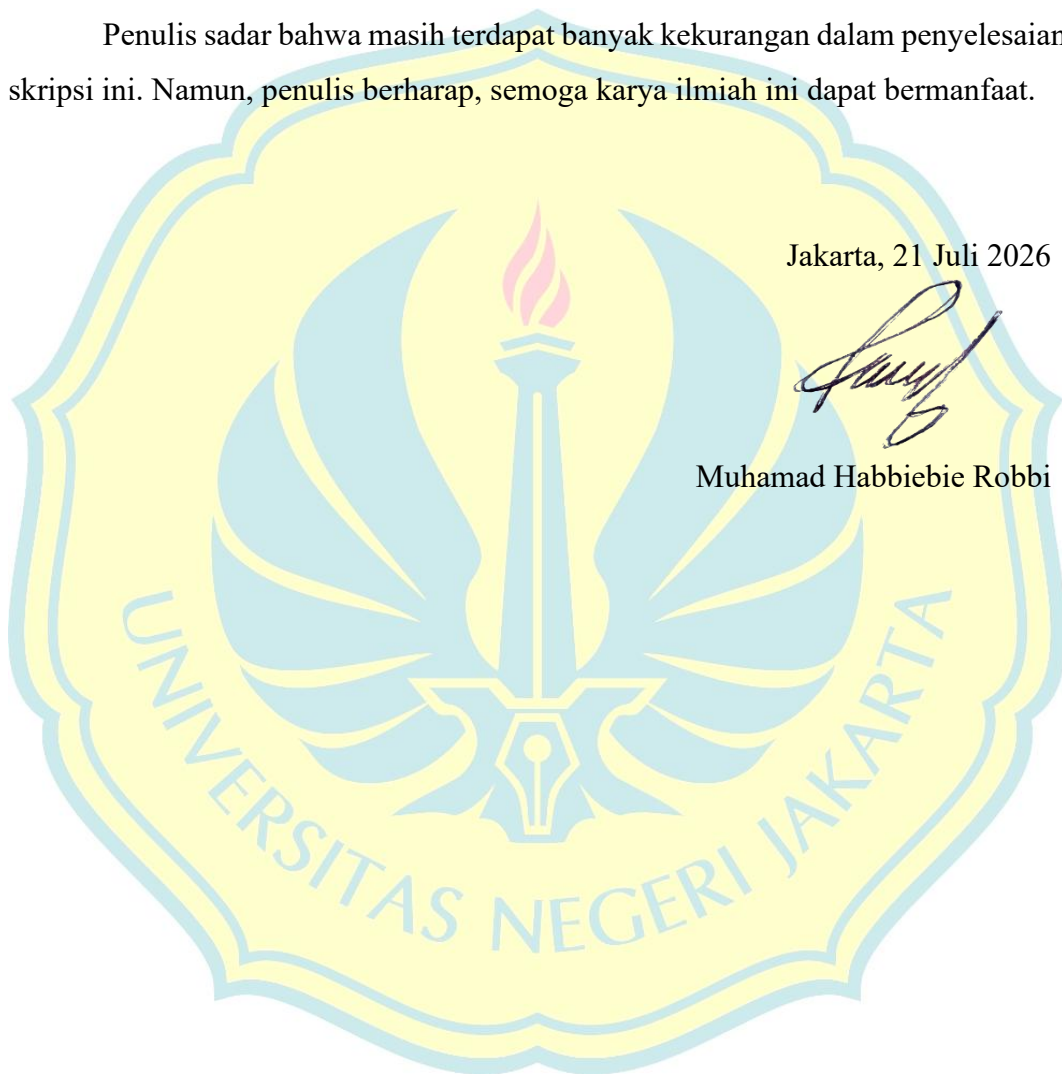
11. Teman-teman di luar Program Studi Fisika, khususnya grup Till Jannah, yang selalu menghadirkan canda, tawa, dan suasana yang menyenangkan di tengah padatnya proses penyusunan skripsi. Terima kasih atas dukungan, kebersamaan, serta momen-momen sederhana yang mampu mengembalikan semangat penulis ketika merasa lelah.

Penulis sadar bahwa masih terdapat banyak kekurangan dalam penyelesaian skripsi ini. Namun, penulis berharap, semoga karya ilmiah ini dapat bermanfaat.

Jakarta, 21 Juli 2026



Muhamad Habbiebie Robbi



DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI	i
LEMBAR PERNYATAAN	ii
KATA PENGANTAR	iii
ABSTRAK	vi
ABSTRACT	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Perumusan Masalah	2
C. Tujuan Penelitian	3
D. Manfaat Penelitian	3
E. Batasan Masalah	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
A. Material <i>Perovskite</i>	5
1. Sifat-Sifat Umum <i>Perovskite</i> Halida	6
2. <i>Perovskite</i> Halida CsPbX_3 dan Posisi Material CsPbF_3	7
3. Defek Intrinsik pada <i>Perovskite</i> Halida	9
4. Defek Kekosongan Fluor (VF) pada <i>Perovskite</i> CsPbF_3	10
B. Konsep Dasar <i>Density Functional theory</i> dalam Studi Material Padat	12
1. Persamaan Schrödinger dan Aproksimasi Born–Oppenheimer	13
2. Kompleksitas Sistem Banyak Elektron dan Kebutuhan <i>Density Functional theory</i>	15
3. Teorema Hohenberg – Kohn	17
4. Persamaan Kohn–Sham	19
5. Fungsional <i>Exchange–Correlation</i>	21
6. Pita Valensi dan Pita Konduksi	24
7. Orbital Atom Penyusun Pita Energi	25

8. Energi Fermi.....	26
9. Basis Gelombang Bidang (<i>Plane-wave Basis Set</i>).....	26
10. Pseudopotensial.....	28
C. Quantum Espresso	30
1. Prinsip Dasar dan Arsitektur Quantum ESPRESSO.....	31
2. Alur Komputasi dan Mekanisme Perhitungan dalam Quantum ESPRESSO	32
D. Penelitian Terdahulu.....	33
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	36
A. Tempat dan Waktu Penelitian	36
B. Metode Penelitian	37
1. Alat dan Bahan.....	38
2. Prosedur Penelitian.....	39
C. Teknik Pengumpulan dan Analisis Data.....	41
1. Data Energi Total	41
2. Data Struktur Pita Energi (<i>Band structure</i>).....	41
3. Data <i>Density of states</i> (DOS)	42
4. Data <i>Projected density of states</i> (PDOS)	42
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	43
A. Optimasi Parameter Perhitungan	44
1. Uji Konvergensi <i>Cut-off Energy</i>	44
2. Uji Konvergensi K-point Mesh.....	48
B. Sifat Struktural dan Elektronik Bulk CsPbF ₃	51
1. Struktur Kristal.....	51
2. Relaksasi Struktur	53
3. Perhitungan <i>Self-Consistent Field</i>	56
4. Struktur Pita Energi (<i>Band Structure</i>).....	58
5. <i>Density of States</i>	61
6. <i>Projected Density of States</i>	63
C. Analisis Defek <i>Vacancy Fluor</i> (F)	69
1. Pembentukan Struktur Defek	69
2. Perhitungan <i>Self-Consistent Field</i> (SCF) Defek	71

3. Struktur Pita Energi (<i>Band Structure</i>) Defek	72
4. <i>Density of States</i> dengan Defek.....	74
5. <i>Projected Density of States</i> dengan Defek	76
6. Redistribusi Muatan Akibat Defek Kekosongan Atom Fluorin.....	80
D. Pengaruh <i>Vacancy</i> Fluor terhadap Sifat Elektronik CsPbF ₃	81
1. Perbandingan Band Structure.....	81
2. Perbandingan <i>Density of States</i>	81
3. Perbandingan <i>Projected Density of States</i>	82
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	84
A. Kesimpulan.....	84
B. Saran	85
DAFTAR PUSTAKA	86
LAMPIRAN.....	89
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	90

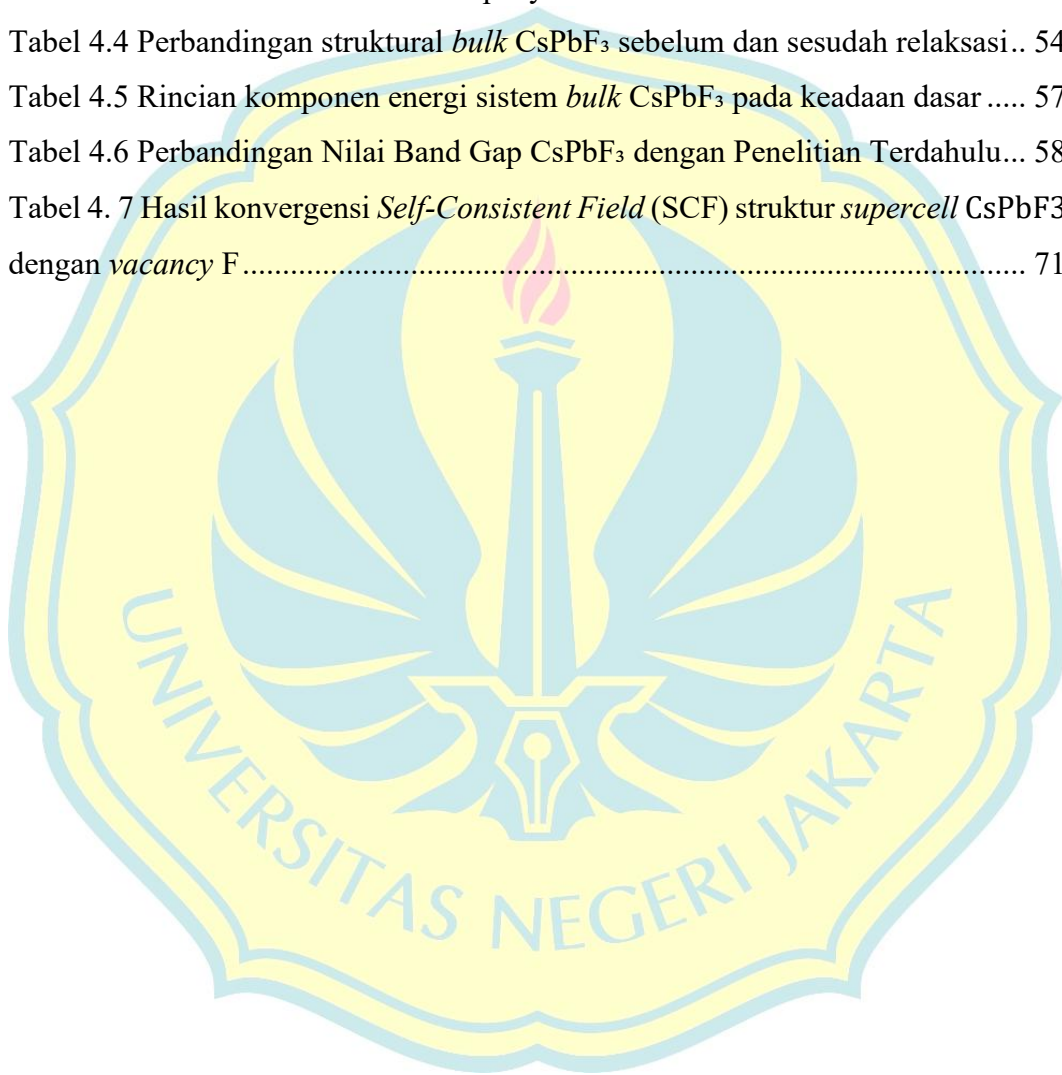


DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Struktur dasar <i>perovskite</i> ABX_3 dengan konfigurasi oktahedra BX_6 .	5
Gambar 2.2. Skema pseudopotensial (Pickett, 1989).	30
Gambar 2.3. <i>Electronic band structure of</i>	34
Gambar 2.4. <i>Density of states</i> (DOS) $CsPb(Br_{1-x}Cl_x)_3$	35
Gambar 3.1. Flowchart alur penelitian.	39
Gambar 4.1 Hubungan Cut-off Energy terhadap Energi Total	46
Gambar 4.2 Perubahan Energi Total (ΔE) terhadap Cut-off Energy	47
Gambar 4.3 Hubungan K-point Mesh terhadap Energi Total	49
Gambar 4.4 Perubahan Energi Total (ΔE) terhadap K-point Mesh	50
Gambar 4.5 Visualisasi struktur kristal awal $CsPbF_3$	53
Gambar 4.6 Visualisasi struktur kristal <i>bulk</i> $CsPbF_3$ setelah relaksasi	55
Gambar 4.7 Kurva dispersi struktur pita energi material <i>bulk</i> $CsPbF_3$	59
Gambar 4.8 Kurva Total <i>Density of States</i> (DOS) material <i>bulk</i> $CsPbF_3$	62
Gambar 4.9 Kurva Total dan <i>Projected Density of States</i> (PDOS) gabungan material <i>bulk</i> $CsPbF_3$	64
Gambar 4.10 Kurva <i>Projected Density of States</i> (PDOS) dari orbital atom F	65
Gambar 4.11 Kurva <i>Projected Density of States</i> (PDOS) dari orbital atom Timbal (Pb)	66
Gambar 4.12 Kurva <i>Projected Density of States</i> (PDOS) dari orbital atom Cesium (Cs)	67
Gambar 4. 13 (a) Struktur $CsPbF_3$ $2 \times 2 \times 2$, (b) Struktur $CsPbF_3$ $2 \times 2 \times 2$ <i>Vacancy F</i>	70
Gambar 4.14 Kurva dispersi struktur pita energi terhadap defek VF	73
Gambar 4.15 Kurva Total <i>Density of States</i> (DOS) dengan defek	75
Gambar 4.16 <i>Projected Density of States</i> (PDOS) material $CsPbF_3$ dengan defek	76
Gambar 4.17 PDOS orbital atom fluorin pada material $CsPbF_3$ dengan defek	77
Gambar 4.18 PDOS orbital atom timbal pada material $CsPbF_3$ dengan defek	78
Gambar 4.19 PDOS orbital atom sesium pada material $CsPbF_3$ dengan defek	79

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1. Jadwal Rancangan Penelitian (Januari–Juli 2026).....	36
Tabel 4.1 Hasil Uji Konvergensi <i>Cut-off Energy</i>	45
Tabel 4.2 Hasil Uji Konvergensi K-point Mesh	48
Tabel 4.3 Koordinat fraksional atom penyusun struktur awal CsPbF_3	52
Tabel 4.4 Perbandingan struktural <i>bulk</i> CsPbF_3 sebelum dan sesudah relaksasi..	54
Tabel 4.5 Rincian komponen energi sistem <i>bulk</i> CsPbF_3 pada keadaan dasar	57
Tabel 4.6 Perbandingan Nilai Band Gap CsPbF_3 dengan Penelitian Terdahulu...	58
Tabel 4. 7 Hasil konvergensi <i>Self-Consistent Field</i> (SCF) struktur <i>supercell</i> CsPbF_3 dengan <i>vacancy</i> F	71



DAFTAR SINGKATAN



DFT	:	<i>Density Functional Theory</i>
DOS	:	<i>Density of States</i>
PDOS	:	<i>Projected Density of States</i>
SCF	:	<i>Self-Consistent Field</i>
GGA	:	<i>Generalized Gradient Approximation</i>
PBE	:	<i>Perdew–Burke–Ernzerhof</i>
VBM	:	<i>Valence Band Maximum</i>
CBM	:	<i>Conduction Band Minimum</i>
HPC	:	<i>High Performance Computing</i>
QE	:	Quantum ESPRESSO
Ry	:	<i>Rydberg</i>
eV	:	<i>Electron Volt</i>
a.u.	:	<i>Atomic Unit</i>
k-point	:	Titik sampling ruang resiprok