

ABSTRAK

Studi ini menyelidiki sifat struktural dan elektronik CsSnBr_3 yang didoping Bi menggunakan teori fungsional kerapatan dalam pendekatan gradien umum Perdew–Burke–Ernzerhof (GGA-PBE) dengan pseudopotensial ultrasoft (USPP) dengan mempertimbangkan konsentrasi doping 12,5%, 25,0%, 37,5%, dan 50,0%. Hasilnya menunjukkan bahwa penggabungan Bi menginduksi redistribusi muatan, yang memodulasi lingkungan ikatan lokal dan menyebabkan variasi panjang ikatan Sn–Br dan Bi–Br. Substitusi Bi menyebabkan penurunan non-monotonik pada celah pita energi, menurun dari 0,55 eV pada sistem murni menjadi 0,32, 0,11, 0,23, dan 0,21 eV pada doping 12,5%, 25,0%, 37,5%, dan 50,0%. Analisis celah pita menunjukkan bahwa tingkat Fermi bergeser di atas minimum pita konduksi, menunjukkan perilaku semikonduktor tipe-n degeneratif yang disebabkan oleh keadaan seperti donor yang diperkenalkan oleh substitusi Bi. Hasil kerapatan keadaan menunjukkan bahwa keadaan Bi 6p berkontribusi di dekat pita konduksi, memodifikasi celah pita dan mengurangi energi eksitasi. Sifat optik sangat dipengaruhi oleh doping Bi. Fungsi dielektrik menunjukkan karakteristik seperti logam, seperti yang ditunjukkan oleh bagian riil negatif dan bagian imajiner terbatas pada energi foton rendah, yang terkait dengan keberadaan pembawa muatan bebas. Hal ini menghasilkan peningkatan penyerapan energi rendah dan pergeseran transisi optik karena penyempitan celah pita dan pengisian pita. Reflektivitas meningkat pada energi rendah, dengan pergeseran biru dan pengurangan maksimum dalam rentang tampak. Fungsi kerugian mengungkapkan fitur pembawa bebas energi rendah dan transisi antar pita energi tinggi. Secara keseluruhan, doping Bi secara efektif menyetel sifat elektronik dan optik CsSnBr_3 , menyoroti potensinya untuk aplikasi optoelektronik, khususnya teknologi inframerah dan fotodetektor.

Kata kunci : Perovskit CsSnBr_3 , Doping Bi, Optoelektronik, Teori DFT

Pembimbing I

Pembimbing II

Prof. Dr. Parsaoran Siahaan, M.S.
NIP. 196404241990011001

Prof. Dr. Dwi Hudiyantri, M.Sc.
NIP. 196506221989032001