

INTISARI

Penelitian ini menyelidiki sifat elektronik $CH_3NH_3PbI_3$ menggunakan metode propagasi waktu tight-binding (TB-TPM) yang dikombinasikan dengan dekomposisi Trotter-Suzuki. Penelitian ini berfokus pada perhitungan densitas keadaan (DOS) untuk berbagai ukuran sistem dan parameter langkah waktu, dengan pendekatan ruang-riil untuk memodelkan struktur elektronik material tersebut. Dengan hanya mempertimbangkan orbital-s pada atom Pb dan I, kompleksitas komputasi dapat dikurangi, memungkinkan simulasi yang lebih efisien. Hasil perhitungan menunjukkan perilaku logam yang mana ini menyimpang dari sifat semikonduktor yang dilaporkan dari penelitian sebelumnya. Hal ini disebabkan pengecualian interaksi orbital-p dari atom Pb dan I. Penelitian ini juga menunjukkan pengaruh ukuran *timesteps* terhadap akurasi fungsi korelasi dan DOS, menekankan perlunya langkah waktu yang lebih kecil untuk secara efektif mengidentifikasi fitur spektral. Kajian ini menegaskan keterbatasan model yang digunakan saat ini dan menyarankan untuk mengikutkan interaksi orbital-p atom Pb dan I serta kopling spin-orbit untuk analisis PbI_3 -based perovskite yang lebih komprehensif.

Kata kunci: $CH_3NH_3PbI_3$, tight-binding, densitas keadaan, Trotter-Suzuki, struktur elektronik.

ABSTRACT

This study investigates the electronic properties of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ using the tight-binding time propagation method (TB-TPM) combined with the Trotter-Suzuki decomposition. The research focuses on computing the density of states (DOS) for various system sizes and time step parameters, employing a real-space approach to model the electronic structure of the material. By considering only the s-orbitals of Pb and I atoms, the computational complexity is reduced, enabling efficient simulations. The results indicate a metallic behavior, deviating from the expected semiconducting properties reported in prior studies due to the exclusion of critical p-orbital interactions. The study also highlights the effect of timestep size on the accuracy of the correlation functions and DOS, emphasizing the need for smaller timesteps to resolve spectral features effectively. The findings underscore the limitations of the current model and suggest future work incorporating p-orbital interactions and spin-orbit coupling for a more comprehensive analysis of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Keywords: $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, tight-binding, density of states, Trotter-Suzuki, electronic structure.