

## ABSTRAK

Nama : Gina Rizqillah  
Program Studi : Fisika  
Judul : Perhitungan Struktur Elektronik Molekul Theaflavin dan Sianidin-3-Glukosida dengan Metode *Density Functional Theory* sebagai Bahan Aktif *Dye Sensitized Solar Cell*

*Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC) merupakan salah satu generasi sel surya, yang dapat mengubah energi matahari menjadi energi listrik. Salah satu hal yang menarik pada DSSC adalah penggunaan pewarna (alami maupun buatan) sebagai bahan aktifnya. Penelitian dengan DSSC terus dilakukan untuk menemukan dssc dengan efisiensi yang tinggi. Efisiensi yang tinggi berkaitan dengan struktur elektronik *dye* sebagai bahan aktif. Struktur elektronik *dye* dapat diketahui dengan metode komputasi melalui *Density Functional Theory* (DFT). Pada konsepnya, DFT menggantikan sistem  $n$  elektron menjadi satu elektron dengan konsep kerapatan elektron. Pada penelitian ini, molekul yang diuji adalah molekul theaflavin dan molekul sianidin-3-glukosida (S3G). Selain itu, perhitungan dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak quantum ESPRESSO, dengan melakukan variasi beberapa parameter seperti energi *cut-off*, *k-point*, dan *pseudopotentials*. Dari hasil optimasi perhitungan pada kedua molekul tersebut, diperoleh nilai energi total pada molekul theaflavin adalah 10.172,80 eV sedangkan pada S3G 8.442,26 eV. Adapun nilai  $E_g$  yang dihasilkan adalah sebesar 1.96 eV pada theaflavin, dan 1.73 eV pada S3G.

**Kata Kunci:** *DSSC, Density Functional Theory, HOMO-LUMO, Quantum ESPRESSO, Theaflavin, Cyanidin-3-Glucoside.* 2