

ABSTRAK

Nama : Claudea Xelyne Saphira
Program Studi : Fisika
Judul : Perhitungan Struktur Elektronik HOMO-LUMO
Molekul Rivina Humilis dengan Metode Density
Functional Theory

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 Rivina Humilis 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 molekul tersebut, diperoleh nilai energi total pada molekul Rivina Humilis adalah -911.0475 eV Adapun nilai E_g yang dihasilkan adalah sebesar $0,01$ eV

Kata Kunci: DSSC, Density Functional Theory, HOMO-LUMO, Quantum ESPRESSO, Rivina Humilis