

ABSTRAK

Nama : PITRIA AMALIA HITANI
Program Studi : Fisika
Judul : Perhitungan Struktur Elektronik Molekul Klorofil Daun Su-ji (Pleomele Angustifolia) dengan Metode Density Functional Theory sebagai Bahan Aktif Dye Sensitized Solar Cell

DSSC merupakan sel surya generasi ketiga yang memanfaatkan dye (alami maupun buatan) sebagai bahan aktif dan mengkonversi energi matahari menjadi energi listrik. DSSC yang baik memiliki nilai efisiensi yang tinggi, untuk mengetahui efisiensinya maka dilakukan perhitungan struktur elektronik. Struktur elektronik suatu molekul dapat dihitung menggunakan metode komputasi. Penelitian ini menggunakan metode komputasi melalui Density Functional Theory (DFT) dengan konsep kerapatan elektron. Pada penelitian ini, molekul yang diuji adalah molekul klorofil dari Pleomele Angustifolia. Perhitungan dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO, dengan melakukan beberapa variasi parameter seperti energi cut-off, k-point, dan pseudopotentials. Dari hasil optimasi perhitungan pada molekul tersebut, diperoleh nilai energi total adalah -14695.766393 eV. HOMO - 1.9191 eV dan LUMO -1.8961 eV. Adapun nilai Energi gap yang dihasilkan adalah sebesar 0.023 eV.

Kata Kunci: DSSC, Density Functional Theory, Quantum ESPRESSO, Energi gap, HOMO-LUMO, Pleomele Angustifolia