

ABSTRAK

Nama : Sisi Aqshowati
Program Studi : Jurusan Fisika
Judul : Perhitungan Sifat Optik Absorbansi Molekul Rivina Humilis dengan Metode Density Funcional Theory sebagai Bahan Aktif Dye Sensitized Solar Cell

Telah dilakukan penelitian mengenai perhitungan sifat optik absorbansi sebagai bahan aktif Dye Sensitized Solar Cell (DSSC). DSSC merupakan sel surya yang mengubah energi cahaya menjadi energi listrik. Sifat Optik 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 yang mempunyai zat warna batalain, perhitungan dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO yang diakses melalui kogence.com, dengan melakukan dua variasi parameter perhitungan yaitu energi cut-off dan k-point dengan menggunakan pseudopotentials GGA-PBE. Dari hasil optimasi perhitungan pada molekul tersebut, diperoleh absorbansi dari cut-off 60 adalah 2.138 dengan panjang gelombang 401.1 nm dan dari cutoff-70 adalah 2.134 dengan panjang gelombang 400 nm. Adapun nilai E_g yang dihasilkan adalah sebesar 3.18 eV pada cut-off 60 dan 3.17 eV pada cutoff-70.

Kata Kunci: DSSC, Density Functional Theory, Absorbansi, Rivina Humilis, Quantum ESPRESSO