

Pramita, 2017. **Kajian Teoretis Density Functional Theory dengan Studi Kasus Pengaruh Medan Elektrostatika pada Proses Fotoinaktivasi** . Skripsi ini di bawah bimbingan Febdian Rusydi, S.T.,M.Sc.,Ph.D dan Dr.Suryani Dyah Astuti, M.Si. Departemen Fisika, Fakultas Sains Dan Teknologi, Universitas Airlangga.

ABSTRAK

DFT menggunakan kerapatan elektron sebagai kuantitas unik dalam penyelesaian persamaan Schrödinger pada sistem kompleks. Persamaan numerik dari persamaan Schrödinger pada DFT yaitu persamaan Kohn-Sham. Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari pengaruh medan elektrostatika pada proses fotoinaktivasi di reaksi *quenching* dengan DFT. Medan elektrostatika yang diberikan pada sistem mengganggu operator potensial Kohn-Sham. Akibatnya fungsi gelombang spin-orbital sebagai penyelesaian dari persamaan Kohn-Sham merupakan fungsi gelombang sistem terganggu. Fungsi gelombang sistem memberikan jumlah total elektron sebelum sistem terganggu tidak sama dengan jumlah total elektron setelah sistem terganggu. Hal ini mengartikan bahwa telah terjadi perpindahan muatan pada sistem. Berdasarkan hasil grafik ditunjukkan bahwa medan elektrostatika yang mengarah sumbu Z negatif pada $[ZnP - O_2]$ singlet memberikan peningkatan transfer muatan yang cukup besar pada molekul oksigen. Akibatnya, molekul oksigen menerima kelebihan muatan yang dapat membuat molekul oksigen dari hasil reaksi *quenching* menjadi reaktif.

Kata Kunci: DFT, kerapatan elektron, reaksi *quenching*, medan elektrostatika, perpindahan muatan.