

DAFTAR ISI

DISERTASI	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
DAFTAR SINGKATAN	xv
DAFTAR PUBLIKASI	xvii
INTISARI	xviii
ABSTRACT	xix
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	6
I.3 Manfaat Penelitian	7
I.4 Keaslian dan Kebaruan Penelitian	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	10
II.1 Tinjauan Pustaka	10
II.1.1 Generasi sel surya fotovoltaik	10
II.1.2 <i>Dye-sensitized Solar Cell</i> (DSSC)	11
II.1.3 Metode Perhitungan Kimia Komputasi	25
II.1.4 Pendekatan parameter terhadap efisiensi konversi energi	34

II.1.5 Analisis energi penataan ulang, potensi ionisasi (IP), dan afinitas elektron (EA)	37
II.1.6 Aktivitas Optika Nonlinier (NLO)	38
II.1.7 Analisis transfer muatan intramolekular (ICT)	39
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	41
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	41
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	42
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	43
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	45
II.2.5 Rancangan penelitian.....	46
BAB III METODE PENELITIAN	45
III.1 Peralatan	45
III.1.1 Perangkat lunak	45
III.1.2 Perangkat keras	45
III.2 Bahan	45
III.3 Lokasi Penelitian	47
III.4 Tahap Penelitian	47
III.4.1 Pembuatan model awal dan pemilihan metode	47
III.4.2 Optimasi geometri	47
III.4.3 Perhitungan TD-DFT	47
III.4.4 Perhitungan energi transfer muatan.....	48
III.4.5 Absorpsi kompleks logam-porfirin tersubstitusi pada permukaan bidang [101] TiO ₂ (model <i>anatase</i>).....	48
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	50
IV.1 Pemilihan Metode Komputasi	50
IV.2 Analisis Pengaruh Modifikasi Akseptor Tambahan pada Konfigurasi Struktur D- π -A-A	52

IV.2.1 Analisis pengaruh variasi ko-akseptor terhadap sifat elektronik sensitiser kompleks logam-porfirin.....	52
IV.2.2 Analisis pengaruh variasi ko-akseptor terhadap sifat optik sensitiser kompleks logam-porfirin.....	60
IV.2.3 Analisis pengaruh variasi ko-akseptor terhadap efisiensi sensitiser kompleks logam-porfirin.....	65
IV.3 Analisis Pengaruh Pengaruh Modifikasi Gugus Penahan pada Konfigurasi Struktur D- π -A-A	72
IV.3.1 Analisis pengaruh variasi gugus penahan terhadap sifat elektronik sensitiser kompleks logam-porfirin.....	72
IV.3.2 Analisis pengaruh variasi gugus penahan terhadap sifat optik sensitiser kompleks logam-porfirin.....	80
IV.3.3 Analisis pengaruh variasi gugus penahan terhadap efisiensi sensitiser kompleks logam-porfirin.....	83
IV.4 Analisis Pengaruh Substitusi Ion Logam Pusat pada Cincin Porfirin.....	92
IV.4.1 Analisis pengaruh substitusi ion logam pusat terhadap sifat elektronik sensitiser kompleks logam-porfirin	92
IV.4.2 Analisis pengaruh substitusi ion logam pusat terhadap sifat optik sensitiser kompleks logam-porfirin.....	100
IV.4.1 Analisis pengaruh substitusi ion logam pusat terhadap efisiensi sensitiser kompleks logam-porfirin.....	103
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	108
V.1 Kesimpulan	108
V.2 Saran	109
DAFTAR PUSTAKA	110
LAMPIRAN.....	123