

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Halaman Pengesahan	ii
Halaman Pernyataan	iii
Halaman Persembahan	iv
Halaman Motto	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	5
1.6 Sistematika Penulisan	5
II TINJAUAN PUSTAKA	6
III LANDASAN TEORI	11
3.1 <i>Density Functional Theory</i>	11
3.1.1 Persamaan Schrodinger Banyak Elektron	12
3.1.2 Kerapatan Elektron	14

3.1.3 Model Thomas-Fermi	15
3.1.4 Teorema Hohenberg-Kohn I	15
3.1.5 Teorema Hohenberg-Kohn II	17
3.1.6 Teori Matriks Kerapatan	17
3.1.7 Formulasi Kohn-Sham	18
3.1.8 Pemecahan Masalah Orbital	20
3.1.9 Orbital Kohn- Sham	21
3.1.10 Fungsi Pertukaran dan Korelasi	22
3.1.11 Local Density Approximation (LDA) dan <i>Generalized-Gradient Approximations</i> (GGA)	28
3.2 Sel Surya Organik	32
3.2.1 Semikonduktor	33
3.2.2 Prinsip Kerja Sel	34
3.2.3 Energi Celah Pita	36
3.2.4 Potensial Kimia Elektronik dan Keelektronegatifan Mulliken	37
3.2.5 Transfer Elektron	37
3.2.6 Energi Adsorpsi	39
3.2.7 <i>Graphene</i>	40
3.2.8 <i>Polythiophene</i>	44
IV METODOLOGI PENELITIAN	46
4.1 Metode Penelitian	46
4.2 Fasilitas Penelitian	46
4.3 Metode DFT	47
4.4 Diagram Alir Penelitian	48
4.5 Prosedur Penelitian	52
V HASIL DAN PEMBAHASAN.	59
5.1 Optimasi Kisi <i>Graphene</i>	59
5.2 Konstruksi dan Optimasi Geometri Sistem <i>Graphene</i>	60
5.3 Konstruksi dan Optimasi Sistem P3HT dan <i>Graphene</i>	61
5.4 Density of States (DOS).	67
5.5 Energi Adsorpsi.	70

5.6 Transfer Muatan.....	71
VI KESIMPULAN DAN SARAN.....	73
6.1 Kesimpulan	73
6.2 Saran	73
DAFTAR PUSTAKA.....	74
LAMPIRAN	
A. Analisis Data	78
B. <i>Source Code</i>	79
C. Publikasi.....	94