

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN SKRIPSI</b>	<b>ii</b>
<b>SURAT PERNYATAAN</b>	<b>iii</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN</b>	<b>x</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiii</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>5</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Mekanisme kerja <i>Dye-Sensitized Solar Cells</i> (DSSCs)	5
II.1.2 <i>Power Conversion Efficiency</i> (PCE)	7
II.1.3 <i>Reorganization energy</i>	9
II.1.4 <i>Intramolecular Charge Transfer</i> (ICT)	10
II.1.5 <i>Non-linear Optical Properties</i> (NLO)	11
II.1.6 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	13
II.2 Perumusan Hipotesis	15
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	15
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	16
II.3 Rancangan Penelitian	16
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>17</b>
III.1 Alat Penelitian	17
III.2 Bahan Penelitian	17
III.3 Prosedur Penelitian	18
III.3.1 Pemilihan metode	18
III.3.2 <i>Non-linear Optical Properties</i> (NLO)	19
III.3.3 <i>Reorganization energy</i>	19
III.3.4 Sistem kompleks <i>dye sensitizer</i> pada permukaan TiO <sub>2</sub>	19
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>20</b>
IV.1 Pemilihan Metode	20
IV.2 Model <i>Dye</i> Dalam Keadaan Bebas	23
IV.2.1 Struktur geometri molekul	23
IV.2.2 Level energi dan <i>Frontier Molecular Orbitals</i> (FMO)	27
IV.2.3 <i>Molecular Electrostatic Potential</i> (MEP)	32
IV.2.4 <i>Non-linear Optical Properties</i> (NLO)	34
IV.2.5 <i>Reorganization energy</i>	36
IV.2.6 Karakter optis <i>dye</i> dalam keadaan bebas	39

IV.2.7 Parameter fotovoltaiik	43
IV.3 Adsorpsi <i>Dye Sensitizer</i> Pada Semikonduktor TiO <sub>2</sub>	48
IV.3.1 Interaksi <i>dye</i> dengan TiO <sub>2</sub> dan level energi	48
IV.3.2 Karakter optis <i>dye</i> dalam keadaan teradsorpsi	51
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>53</b>
V.1 Kesimpulan	53
V.2 Saran	53
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>54</b>
<b>LAMPIRAN</b>	<b>66</b>