

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
I.3 Manfaat Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	7
II.1 Tinjauan Pustaka	7
II.1.1 Sel surya	7
II.1.2 DSSC (<i>Dye-sensitized Solar Cells</i>)	9
II.1.3 Fenoksazina	12
II.1.4 DFT (<i>Density Functional Theory</i>) dan TD-DFT (<i>Time-Dependent Density Functional Theory</i>)	13
II.1.5 PCE (<i>Power Conversion Efficiency</i>)	16
II.1.6 Potensi ionisasi (IP), afinitas elektron (EA), dan energi penataan ulang (λ)	18
II.1.7 NLO (<i>Non-Linear Optics</i>)	19
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	20
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	20
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	20
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	21
II.3 Rancangan Penelitian.	22
BAB III METODE PENELITIAN	23
III.1 Bahan	23
III.2 Peralatan	25
III.2.1 Perangkat lunak	25
III.2.1 Perangkat keras	26
III.3 Prosedur	26
III.3.1 Pembuatan model senyawa dan pemilihan metode	26
III.3.2 Optimasi geometri	26
III.3.3 Perhitungan TD-DFT	27
III.3.4 Perhitungan energi transfer muatan	27

III.3.5 Absorpsi kompleks sensitiser pada permukaan bidang (TiO ₂) ₆	27
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	28
IV. Pemilihan Metode Komputasi	28
IV.2 Analisis Pengaruh Modifikasi Struktur Pertama terhadap Kinerja Zat Warna sebagai Sensitiser dalam DSSC	31
IV.2.1 Struktur geometri	31
IV.2.2 Parameter energi	33
IV.2.3 Sifat fotofisika sensitiser	36
IV.2.4 Analisis injeksi elektron, efisiensi regenerasi sensitiser, dan LHE (<i>Light Harvesting Efficiency</i>)	38
IV.2.5 Analisis energi penataan ulang, potensial ionisasi, dan afinitas elektron	39
IV.2.6 Analisis NLO (<i>Non-Linear Optics</i>)	41
IV.3 Analisis Pengaruh Modifikasi Struktur Kedua terhadap Kinerja Zat Warna sebagai Sensitiser dalam DSSC	42
IV.3.1 Struktur geometri	42
IV.3.2 Parameter energi	44
IV.3.3 Sifat fotofisika sensitiser	47
IV.3.4 Analisis injeksi elektron, efisiensi regenerasi sensitiser, dan LHE (<i>Light Harvesting Efficiency</i>)	49
IV.3.5 Analisis energi penataan ulang, potensial ionisasi, dan afinitas elektron	50
IV.3.6 Analisis NLO (<i>Non-Linear Optics</i>)	51
IV.4 Analisis Pengaruh Modifikasi Struktur Ketiga terhadap Kinerja Zat Warna sebagai Sensitiser dalam DSSC	53
IV.4.1 Struktur geometri	53
IV.4.2 Parameter energi	55
IV.4.3 Sifat fotofisika sensitiser	57
IV.4.4 Analisis injeksi elektron, efisiensi regenerasi sensitiser, dan LHE (<i>Light Harvesting Efficiency</i>)	59
IV.4.5 Analisis energi adsorpsi sensitiser pada kluster (TiO ₂) ₆	61
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	64
V.1 Kesimpulan	64
V.2 Saran.	65
DAFTAR PUSTAKA	66
LAMPIRAN	71