

DAFTAR ISI

SKRIPSI	i
HALAMAN PENGESAHAN SKRIPSI	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.1 Tujuan Penelitian	3
I.2 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Energi surya	5
II.1.2 Sel surya tersensitasi zat warna (DSSC)	6
II.1.3 Mekanisme produksi arus listrik pada DSSC	7
II.1.4 Zat warna pemeka karbazol	8
II.1.5 Metode perhitungan kimia komputasi	9
II.1.6 Potensi sensitiser terhadap efisiensi DSSC	11
II.1.7 Analisis energi penataan ulang, potensi ionisasi (IP), dan afinitas elektron (EA)	13
II.1.8 Analisis eksitasi elektron	14
II.1.9 Aktivitas Optika Nonlinier (NLO)	15
II.2 Perumusan Hipotesis	16
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	16
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	18
II.2.3 Rancangan penelitian	18
BAB III METODE PENELITIAN	20
III.1 Bahan Penelitian	20
III.2 Alat penelitian	21
III.3 Prosedur Penelitian	21
III.3.1 Pembuatan model awal dan pemilihan metode	21
III.3.2 Optimasi geometri	22
III.3.3 Perhitungan TD-DFT	22
III.3.4 Perhitungan energi transfer muatan	23
III.3.5 Absorpsi kompleks karbazol pada permukaan bidang TiO ₂	23
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	24
IV.1 Pemilihan Metode Komputasi	24
IV.2 Analisis sifat elektronik sensitiser kompleks karbazol	28

IV.2.1 Optimasi geometri	28
IV.2.2 Sifat elektronik geometri teroptimasi keadaan dasar	30
IV.2.3 <i>Molecular Electrostatic Potential</i> (MEP)	35
IV.3 Analisis sifat optik sensitiser kompleks karbazol	36
IV.3.1 Spektra penyerapan UV-Vis	36
IV.4 Analisis Efisiensi Sensitiser Kompleks Karbazol	38
IV.4.1 Injeksi elektron dan efisiensi regenerasi zat warna	38
IV.4.2 Analisis energi potensial, afinitas elektron, dan energi penataan ulang	40
IV.4.3 <i>Non-Linear Optics</i> (NLO)	42
IV.4.4 Adsorpsi antarmuka dye@TiO ₂	45
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	48
V.1 Kesimpulan	48
V.2 Saran	48
DAFTAR PUSTAKA	49