

DAFTAR ISI

SKRIPSI	i
HALAMAN PENGESAHAN SKRIPSI	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
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.2 Tujuan Penelitian	5
I.3 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 Generasi sel surya fotovoltaik	6
II.1.2 <i>Dye-sensitized solar cells</i> (DSSCs)	7
II.1.3 Metode perhitungan kimia komputasi	10
II.1.4 <i>Power Conversion Energy</i> (PCE)	12
II.1.5 Analisis energi penataan ulang (λ), potensial ionisasi (IP), dan afinitas elektron (EA)	14
II.1.6 Aktivitas optika non-linear (NLO)	15
II.2 Perumusan Hipotesis	16
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	16
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	17
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	17
II.2.4 Rancangan penelitian	18
BAB III METODE PENELITIAN	19
III.1 Bahan Penelitian	19
III.2 Alat penelitian	20
III.3 Lokasi penelitian	20
III.4 Prosedur Penelitian	20
III.4.1 Penentuan metode	20
III.4.2 Optimasi Geometri	22
III.4.3 Perhitungan TD-DFT	22
III.4.4 Perhitungan energi transfer muatan	22
III.4.5 Sistem kompleks <i>dye-sensitizer</i> pada permukaan TiO ₂	23
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	24
IV.1 Pemilihan Metode Komputasi	24
IV.2 Analisis Sifat Elektronik Zat Warna pada Kompleks Karbazol	28
IV.2.1 Optimasi geometri	28

IV.2.2 Sifat elektronik geometri teroptimasi keadaan dasar	31
IV.2.3 <i>Molecular Electrostatic Potential</i> (MEP)	34
IV.3 Analisis Sifat Optik Zat Warna pada 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	39
IV.4.2 Analisis energi potensial, afinitas elektron, dan energi penataan ulang	41
IV.4.3 <i>Non-Linear Optics</i> (NLO)	44
IV.4.4 Adsorpsi antarmuka <i>dye</i> /TiO ₂	47
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	50
V.1 Kesimpulan	50
V.2 Saran	51
DAFTAR PUSTAKA	52