

## DAFTAR ISI

<b>SKRIPSI</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN SKRIPSI</b>	<b>ii</b>
<b>SURAT PERNYATAAN</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	<b>iv</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>x</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xi</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xii</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
I.3 Manfaat Penelitian	5
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>6</b>
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 ( $\lambda$ ), 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
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>19</b>
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 $\text{TiO}_2$	23
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>24</b>
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 <sub>2</sub>	47
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>50</b>
V.1 Kesimpulan	50
V.2 Saran	51
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>52</b>