

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	x
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Kimia Komputasi	5
2.2 Teori Orbital Molekul	8
2.3 Metode <i>Density Functional Theory (DFT)</i> dan <i>Time Dependent Density Fuctional Theory (TDDFT)</i>	9
2.4.1 Substrat Kaca ITO	12
2.4.2 Karakteristik TiO ₂	12
2.4 Organik Zat Warna Sebagai <i>Sensitizer</i>	13
2.5 Sel Surya	14
BAB III METODE PENELITIAN	19
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	19
3.2 Bahan, Alat, dan Instrumentasi	19
3.3 Prosedur	21
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	23
4.1 Metode <i>Density Functional Theory (DFT)</i>	Error! Bookmark not defined.23
4.2 Metode <i>Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT)</i>	33
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	45
5.1 Kesimpulan	45
5.2 Saran	45

DAFTAR PUSTAKA	46
LAMPIRAN A	48
LAMPIRAN B	49
LAMPIRAN C	51
LAMPIRAN D	52



DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1 Pembagian metode kimia komputasi	7
Gambar II.2 Struktur solar sel zat warna tersensitas	10
Gambar II.3 Prinsip kerja DSSC	11
Gambar II.4 Struktur senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3-n-heksiltiopen asam sianokrilik	14
Gambar II.5 Skema mekanisme transfer elektron pada DSSC	16
Gambar II.6 Bentuk kisi-kisi kristal TiO ₂ fasa rutile (kanan) fasa anatase (kiri)	17
Gambar III.1 Diagram alir studi komputasi <i>N</i> -etil indolin berbagai akseptor dengan metode DFT dan TDDFT	22
Gambar IV.1 Hasil optimasi geometri senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n heksiltiopen katekol	24
Gambar IV.2 Hasil optimasi geometri senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n heksiltiopen katekol Ti(OH) ₂	27
Gambar IV.3 Hasil optimasi geometri senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n heksiltiopen 4-metil katekol	29
Gambar IV.4 Spektrum UV-Vis senyawa zat warna <i>N</i> -etil indolin berbagai akseptor	34
Gambar IV.5 Pita celah energi dan Kerapatan orbital pada senyawa <i>N</i> -etil indolin akseptor katekol	40
Gambar IV.6 Pita celah energi dan Kerapatan orbital pada senyawa <i>N</i> -etil indolin katekol Ti(OH) ₂	41
Gambar IV.7 Pita celah energi dan Kerapatan orbital pada senyawa <i>N</i> -etil indolin dengan akseptor 4-metil katekol	42

DAFTAR TABEL

Tabel II.1 Perbedaan antara struktur kristal anatase dan rutile	18
Tabel IV.1 Panjang ikatan pada senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3-n-heksiltiopen katekol	26
Tabel IV.2 Panjang ikatan pada senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n-heksiltiopen katekol Ti(OH) ₂	28
Tabel IV.3 Panjang ikatan pada senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n-heksiltiopen 4-metil katekol	30
Tabel IV.4 Perbandingan nilai energi senyawa zat warna	33
Tabel IV.5 Probalitas eksitasi elektron senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n-heksiltiopen katekol	38
Tabel IV.6 Probalitas eksitasi elektron senyawa <i>N</i> -etil indoli bi-3n-heksiltiopen katekol Ti(OH) ₂	38
Tabel IV.7 Probalitas eksitasi elektron senyawa <i>N</i> -etil indolin bi-3n-heksiltiopen 4-metil katekol	39
Tabel IV.8 Perbandingan energi pita celah energi HOMO/LUMO dari senyawa <i>N</i> -etil indoli bi-3n-heksiltiopen berbagai akseptor	44



DAFTAR ISTILAH

Istilah	Arti / Maksud
Sensitizer	Senyawa kimia yang mampu memancarkan cahaya setelah mendapatkan energi dari molekul yang sebelumnya telah tereksitasi melalui reaksi kimia
Ab Inition	Sebuah konsep perhitungan yang bersifat umum dari penyelesaiannya yang secara praktis dapat diprediksi tentang keakuratannya dan kesalahannya
DFT	Adanya hubungan antara energi elektronik total dan kecepatan elektroniks
TDDFT	Teori kuantum mekanik yan digunakan dalam fisika dan kimia untuk menyelidiki sifat optik dan sifat elektrokimia.
DSSC	Sel surya fotoelektrokimia yang digunakan elektrolit sebagai medium transfer muatan
Dye	Molekul pigmen atau senyawa kimia yang dapat menyerap cahaya
HOMO	Energi tertinggi untuk menaruh atau mengeksitasi elektron
LUMO	Energi terendah untuk menaruh atau mengeksitasi elektron

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

Singkatan/ Lambang	Keterangan
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
TDDFT	<i>Time Dependent Density Functional Theory</i>
HOMO	<i>Highest Occupied Molecular Orbital</i>
LUMO	<i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i>
eV	Elektronvolt
Nm	Nanometer
Å	Amstrong
Eg	Jarak energi

