

## DAFTAR ISI

ABSTRAK .....	i
ABSTRACT .....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI .....	iv
DAFTAR GAMBAR .....	vi
DAFTAR TABEL .....	vii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah Penelitian .....	2
1.3 Ruang Lingkup Penelitian .....	3
1.4 Tujuan Penelitian .....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>	
2.1 Pengertian Kimia Komputasi .....	4
2.2 <i>Dye Sensitized Solar Cells (DSSC)</i> .....	5
2.2.1 Material DSSC .....	6
2.2.2 Cara Kerja DSSC .....	8
2.3 Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT) dan Metode <i>Time Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT) .....	10
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	
3.1 Alat dan Bahan .....	12
3.1.1 Alat .....	12
3.1.2 Bahan .....	12
3.2 Langkah Kerja .....	15
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	
4.1 Sifat Elektronik Senyawa N-etil indol dengan akseptor Katekol .....	17
4.1.1 Struktur Geometri .....	17
4.1.2 Spektrum Serapan UV-Vis .....	19
4.1.3 Distribusi HOMO/LUMO .....	21
4.2 Sifat Elektronik Senyawa N-etil indol dengan akseptor 4-Metil Katekol.....	24
4.2.1 Struktur Geometri .....	24

4.2.2 Spektrum Serapan UV-Vis .....	25
4.2.3 Distribusi HOMO/LUMO .....	27
4.3 Sifat Elektronik Senyawa N-etil indol dengan akseptor Katekol sistem Ti(OH) <sub>2</sub> .....	29
4.3.1 Struktur Geometri .....	29
4.3.2 Spektrum Serapan UV-Vis .....	31
4.3.3 Distribusi HOMO/LUMO .....	33
4.4 Sifat Elektronik Senyawa N-etil indol dengan akseptor 4-Metil Katekol sistem Ti(OH) <sub>2</sub> .....	36
4.4.1 Struktur Geometri .....	36
4.4.2 Spektrum Serapan UV-Vis .....	37
4.4.3 Distribusi HOMO/LUMO .....	39
4.5 Diagram energi HOMO/LUMO .....	41
4.6 Energi Senyawa Zat Warna .....	43
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	
5.1 Kesimpulan .....	45
5.2 Saran .....	45
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	46
<b>LAMPIRAN</b> .....	48