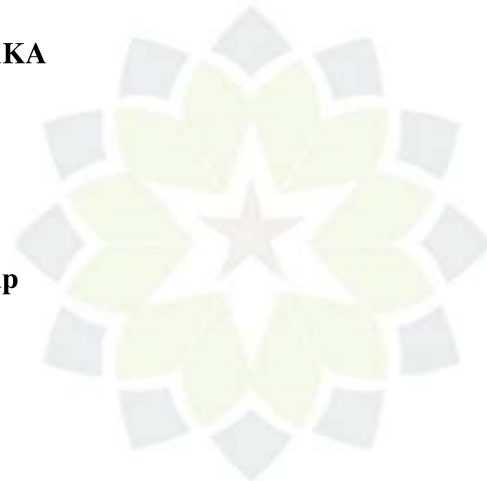


DAFTAR ISI

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI	i
LEMBAR PERSETUJUAN	ii
LEMBAR PENGESAHAN	iii
LEMBAR PERSEMBAHAN	iv
ABSTRAK	v
<i>ABSTRACT</i>	vi
KATA PENGANTAR	vii
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR SINGKATAN	xiv
DAFTAR SIMBOL DAN OPERATOR	xv
1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Manfaat Penelitian	3
1.5 Batasan Masalah Penelitian	4
1.6 Metode Pengumpulan Data	4
1.7 Sistematika Penulisan	4

2	TEORI DASAR	6
2.1	Sel Surya	6
2.2	<i>Dye Sensitized Solar Cells</i> (DSSC)	6
2.2.1	Komponen DSSC	7
2.2.2	Prinsip Kerja DSSC	8
2.2.3	<i>Organic Dye (Natural Sensitizer)</i>	9
2.3	<i>Density Functional Theory</i>	12
2.3.1	Aproksimasi Hohenberg-Kohn	12
2.3.2	Persamaan Kohn-Sham	13
2.3.3	<i>Pseudopotentials</i>	15
2.4	Quantum ESPRESSO	17
3	METODOLOGI PENELITIAN	19
3.1	Tempat dan Waktu Penelitian	19
3.2	Alat, Model Molekul, dan Optimasi Penelitian	19
3.2.1	Alat Penelitian	19
3.2.1.1	Perangkat Keras	19
3.2.1.2	Perangkat Lunak	19
3.2.2	Struktur Molekul	20
3.2.3	Optimasi Penelitian	22
3.3	Prosedur Penelitian	25
4	HASIL DAN PEMBAHASAN	27
4.1	Molekul Theaflavin	27
4.1.1	Variasi Parameter Perhitungan	28
4.1.1.1	Energi <i>Cut-off</i>	28
4.1.1.2	<i>K-Points</i>	29
4.1.1.3	<i>Pseudopotentials</i>	30
4.1.2	Struktur <i>Highest Occupied Molecular Orbital</i> (HOMO) - <i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i> (LUMO)	31
4.1.2.1	Posisi Orbital HOMO-LUMO	31
4.1.2.2	HOMO-LUMO	32
4.2	Molekul Sianidin-3-Glukosida (S3G)	34
4.2.1	Variasi Parameter Perhitungan	34
4.2.1.1	Energi <i>Cut-off</i>	35
4.2.1.2	<i>K-Points</i>	35

4.2.1.3	<i>Pseudopotentials</i>	36
4.2.2	Struktur HOMO - LUMO	37
4.2.2.1	Posisi Orbital	37
4.2.2.2	HOMO-LUMO	39
5	PENUTUP	41
5.1	Kesimpulan	41
5.2	Saran	41
	DAFTAR PUSTAKA	42
	LAMPIRAN	46
A	DATA	46
B	Riwayat Hidup	58



uin

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI
SUNAN GUNUNG DJATI
BANDUNG