

## ABSTRAK

### STUDI KOMPUTASI SENYAWA DOPAMIN DAN BUTIL KATEKOL SEBAGAI DYE UNTUK APLIKASI DYE SENSITIZED SOLAR CELL : “SOFTWARE BENCHMARKING”

Energi listrik merupakan salah satu energi yang sangat dibutuhkan manusia sebagian dihasilkan dari sumber pembangkit listrik yang menggunakan bahan bakar, dimana hasil pembakaran dari bahan bakar tersebut bisa menimbulkan polusi udara. *Dye Sensitized Solar Cell* (DSSC) merupakan sumber energi alternatif ramah lingkungan yang diharapkan dapat membantu memenuhi tingginya kebutuhan listrik di Indonesia. DSSC menggunakan zat warna organik sebagai *sensitizer*. Dalam penelitian ini dianalisis *band gap* HOMO-LUMO, dan sifat optik (spektrum serapan UV-Vis) senyawa dopamin, dopamin yang berikatan dengan  $\text{TiO}_2$ , Butil Katekol dan Butil Katekol yang berikatan dengan  $\text{TiO}_2$ . Penggambaran senyawa dan optimasi dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Avogadro. Perhitungan secara komputasi terhadap senyawa zat warna organik dopamin dan Butil katekol dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Firefly dan Gaussian 03W dengan menggunakan metode DFT (*Dependent Functional Theory*) dan TDDFT (*Time Dependent Density Functional Theory*). Dari hasil perhitungan secara komputasi, diketahui bahwa senyawa zat warna organik dopamin dan Butil katekol berpotensi untuk digunakan dalam sistem sel surya tersensitasi zat warna. Pada penelitian ini senyawa dopamin yang berikatan dengan  $\text{TiO}_2$  memiliki *band gap* paling rendah yaitu 3.38 eV dan 3.33 eV, hal ini dikarenakan adanya  $\text{TiO}_2$  yang berikatan dengan dopamin. *Band gap* yang rendah akan memudahkan elektron untuk berpindah dari orbital HOMO menuju orbital LUMO sehingga energi yang dibutuhkan untuk mengeksitasi elektron relatif lebih kecil.

**Kata Kunci** : studi komputasi, zat warna organik, dopamin, Butil katekol, DSSC.

## ABSTRACT

### COMPUTATION STUDY OF COMPOUNDS DOPAMINE AND BUTYL CATECHOL AS A DYE FOR DYE SENSITIZED SOLAR CELL APPLICATION : “SOFTWARE BENCHMARKING”

Electrical energy is one of the indispensable man of energy generated from sources most power plants that use fuels , which results from the combustion of these fuels can cause air pollution . Dye- sensitized Solar Cell ( DSSC ) is an environmentally friendly alternative energy source that is expected to help meet the high demand for electricity in Indonesia. DSSC using organic dyes as sensitizers . In this study analyzed the HOMO - LUMO band gap and optical properties ( UV - Vis absorption spectrum) compound dopamine, dopamine binds to  $TiO_2$  , Butyl catechol and Butyl catechol binding to  $TiO_2$  . The depiction of compounds and optimization performed using Avogadro software . Computational calculations on compounds of organic dyes and Butyl catechol dopamine done using software Firefly and Gaussian 03W using DFT methods (Dependent Functional Theory) and TDDFT (Time Dependent Density Functional Theory) . From the calculation in computing , it is known that compounds dopamine and organic dyes Butyl catechol potential for use in solar cell system tersensitasi dyes . In this study, compounds that bind to the dopamine  $TiO_2$  has the lowest band gap is 3.38 eV and 3.33 eV , this is due to the presence of  $TiO_2$  which binds to dopamine . Low band gap will allow electrons to move from the HOMO orbital to the LUMO orbitals so that the energy required to excite an electron is relatively smaller .

Keywords : computational studies , organic dyes , dopamine , Butyl catechol , DSSC .