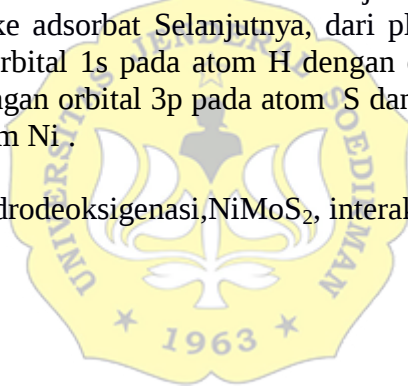


ABSTRAK

Perkembangan teknologi katalisator untuk memenuhi kebutuhan energi global menjadi sangat penting karena ketersediaan sumber energi minyak yang semakin terbatas. Penelitian ini terkait dengan upaya merancang bahan katalis untuk reaksi hidrodoksigenasi (HDO) dalam proses bio-oil untuk meningkatkan produksi bahan bakar nabati.. Ini merupakan studi pendahuluan untuk memahami reaksi hidrodoksigenasi (HDO) yang bertujuan untuk mengetahui mekanisme interaksi guaiacol ($C_7H_8O_2$) dan $NiMoS_2$. Produk biofuel dapat dibuat dari tumbuhan yang mengandung lignoselulosa. Salah satu senyawa penyusun lignoselulosa yang berperan besar dalam proses biofuel adalah guaiacol ($C_7H_8O_2$). Proses bio-oil biasanya dilakukan dengan menggunakan katalis untuk mendapatkan produk yang lebih berkualitas. Dalam studi ini digunakan katalis berbasis molibdenum sulfida (MoS_2) dimodifikasi dengan nikel (Ni) membentuk $NiMoS_2$. Dengan menggunakan perhitungan teori fungsi kerapatan (DFT), penelitian ini menguraikan geometri struktur dan interaksi khas yang terbentuk. Geometri paling stabil ditentukan dengan *scanning* energi potensial. Hasil *scanning* energi potensial menunjukkan bahwa geometri paling stabil adalah ketika benzena dalam guaiacol sejajar dengan permukaan $NiMoS_2$. Mekanisme ini dibahas dengan analisis transfer muatan dan Density of States (DOS). Hasil transfer muatan menunjukkan bahwa adanya perpindahan elektron dari permukaan ke adsorbat. Selanjutnya, dari plot DOS juga diperoleh bahwa terjadi hibridisasi antara orbital 1s pada atom H dengan orbital 3p pada atom S, antara orbital 2s pada atom C dengan orbital 3p pada atom S dan antara orbital 2p pada atom O dengan orbital 3d pada atom Ni.

Kata kunci : DFT, biofuel, hidrodoksigenasi, $NiMoS_2$, interaksi.



ABSTRACT

Developments of catalyst technologies to meet global energy needs is very important as the availability of oil energy sources are becoming increasingly limited. This study is related to the effort to design the catalyst materials for hydrodeoxygenation (HDO) reactions in the bio-oil processes to increase the bio-fuel production. This is a preliminary study to understand the hydrodeoxygenation (HDO) reaction which aims to determine the interaction mechanism of guaiacol ($C_7H_8O_2$) and $NiMoS_2$. Biofuel products can be made from plants containing lignocellulose. One of the lignocellulosic constituents that play a major role in the biofuel process is guaiacol ($C_7H_8O_2$). The bio-oil process is usually carried out using a catalyst to get a higher quality product. In this study, a molybdenum sulfide (MoS_2) based catalyst modified with nickel (Ni) was used to form $NiMoS_2$. By using density function theory (DFT) calculations, this study describes the structural geometry and the typical interactions that are formed. The most stable geometry is determined by scanning potential energy. The potential energy scanning results show that the most stable geometry is when the benzene in guaiacol is parallel to the $NiMoS_2$ surface. This mechanism is discussed with load transfer analysis and Density of States (DOS). The result of charge transfer shows that there is a transfer of electrons from the surface to the adsorbate. Furthermore, from the DOS plot it is also found that there is a hybridization between the 1s orbital on the H atom and the 3p orbital on the S atom, between the 2s orbital on the C atom and the 3p orbital on the S atom and between the orbitals. 2p on the O atom with the 3d orbital on the Ni atom.

Keywords: DFT, biofuel, hydrodeoxygenation, $NiMoS_2$ interactions.

