

ABSTRAK

Penelitian mengenai simulasi kuantum pada proses dehidroksilasi dari guaiacol pada permukaan NiMoS₂ berbasis *Density Functional Theory* (DFT) telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan besar energi aktivasi pada proses pemecahan guaiacol menjadi anisole. Selanjutnya, penelitian ini juga dilakukan untuk menentukan mekanisme reaksi tersebut. Dalam penelitian ini, dilakukan optimasi situs-situs adsorpsi reaktan dan produk pada permukaan NiMoS₂ untuk mendapatkan keadaan awal dan akhir. Energi aktivasi dihitung menggunakan metode *Nudged Elastic Band* (NEB). Dalam reaksi pemecahan ini, diasumsikan berlangsung dengan mengalirkan gas H₂ pada sistem guaiacol diatas permukaan. Kemudian, dari reaktan-reaktan di atas katalis tersebut, terjadi rekombinasi menurut persamaan reaksi $C_7H_8O_2(ad) + H_{2(ad)} \rightarrow C_7H_8O(ad) + H_2O(ad)$. Konfigurasi adsorpsi yang paling stabil dari reaktan adalah pada *top* Ni, baik pada guaiacol maupun H₂. Sedangkan konfigurasi paling stabil dari produk adalah pada *top* S untuk anisole dan *top* Ni pada H₂O. Berdasarkan hasil perhitungan NEB, diperoleh bahwa energi aktivasi cukup kecil sehingga memungkinkan untuk terjadi pemecahan dengan mudah. Selanjutnya, dilakukan analisis *Bader* untuk mendapatkan *charge density difference*. Hasil analisis menunjukkan pada keadaan awal, terjadi transfer muatan dari *surface* ke reaktan. Pada keadaan transisi, *surface* berperan sebagai donor elektron. Kemudian pada keadaan akhir, adsorbat berperan sebagai akseptor yang menerima elektron dari *surface*. Berdasarkan analisis tersebut, jumlah transfer muatan terbesar terjadi pada keadaan awal yaitu dari *surface* ke reaktan. Hal ini diperkuat dengan analisis grafik *Local Density of State* (LDOS) dengan banyaknya hibridisasi yang terjadi saat keadaan awal pada orbital atomik yang ditinjau yaitu orbital p_x pada O dan d_{xy} pada Ni.

Kata Kunci : anisole, dehidroksilasi, DFT, energi aktivasi, NiMoS₂.

ABSTRACT

Research on quantum simulation of the dehydroxylation process of guaiacol on the surface of NiMoS₂ based on Density Functional Theory (DFT) has been carried out. This study aims to determine the amount of activation energy in the process of breaking down guaiacol into anisole. Furthermore, this study was also carried out to determine the mechanism of the reaction. In this study, the adsorption sites of reactants and products were optimized on the NiMoS₂ surface to obtain initial and final states. The activation energy was calculated using the Nudged Elastic Band (NEB) method. In this splitting reaction, it is assumed to take place by flowing H₂ gas in a guaiacol system above the surface. Then, from the reactants above the catalyst, recombination occurs according to the reaction equation $C_7H_8O_{2(ad)} + H_{2(ad)} \rightarrow C_7H_8O_{(ad)} + H_2O_{(ad)}$. The most stable adsorption configuration of the reactants is on top of Ni, both in guaiacol and H₂. While the most stable configuration of the product is in top S for anisole and top Ni on H₂O. Based on the results of the NEB calculation, it is found that the activation energy is small enough to allow for easy breakdown. Furthermore, Bader analysis was performed to obtain a charge density difference. The results of the analysis show that in the initial state, there is a charge transfer from the surface to the reactants. In the transition state, the surface acts as an electron donor. Then in the final state, the adsorbate acts as an acceptor that accepts electrons from the surface. Based on this analysis, the largest amount of charge transfer occurs in the initial state, namely from the surface to the reactants. This is reinforced by the analysis of the Local Density of State (LDOS) graph with the number of hybridizations that occur when the initial state of the atomic orbitals under consideration are p_x orbitals on O and d_{xy} on Ni.

Keywords: *anisole, dehydroxylation, DFT, activation energy, NiMoS₂.*