

## ABSTRAK

Perkembangan material katalis untuk *biofuel* dalam memenuhi kebutuhan energi di dunia menjadi sangat penting karena sumber energi minyak yang semakin terbatas. Penelitian ini merupakan studi pendahuluan untuk memahami reaksi yang terjadi di sisi NiMoS( $\bar{1}010$ ) pada katalis NiMoS<sub>2</sub> dengan molekul oksigen (O<sub>2</sub>) di udara. Dengan tujuan untuk mengetahui mekanisme pembentukan serta penglepasan molekul SO<sub>2</sub> yang terbentuk akibat adsorpsi molekul oksigen (O<sub>2</sub>) pada katalis tersebut. Katalis NiMoS<sub>2</sub> pada umumnya digunakan dalam proses *hydrodeoxygenation* (HDO) untuk menghilangkan kandungan oksigen dari *bio-oil* agar menjadi *biofuel* dengan kualitas tinggi. Dengan menggunakan perhitungan *density functional theory* (DFT), penelitian ini diawali dengan mencari lokasi ideal untuk adsorpsi molekul oksigen (O<sub>2</sub>) pada sisi NiMoS( $\bar{1}010$ ) di katalis NiMoS<sub>2</sub>. Geometri paling stabil ditunjukkan saat terbentuknya ikatan SO<sub>2</sub> pada katalis tersebut. Adsorpsi molekul O<sub>2</sub> melemahkan ikatan Ni-S pada sisi NiMoS( $\bar{1}010$ ) ditandai dengan memanjangnya kedua ikatan Ni-S. Molekul SO<sub>2</sub> yang terbentuk pada NiMoS( $\bar{1}010$ ) dianalisis menggunakan plot *density of states* (DOS) dan *charge density difference* (CDD). Hasil analisa menunjukkan bahwa ikatan SO<sub>2</sub> lebih kuat dibandingkan dengan ikatan Ni-S pada NiMoS( $\bar{1}010$ ). Hasil kalkulasi *nudged elastic band* (NEB) menunjukkan bahwa molekul SO<sub>2</sub> terlepas dari permukaan NiMoS( $\bar{1}010$ ) melalui reaksi endoterm dengan memerlukan sejumlah energi aktivasi.

**Kata kunci:** pembentukan SO<sub>2</sub>, penglepasan SO<sub>2</sub>, NiMoS<sub>2</sub>, DFT, mekanisme reaksi

## ABSTRACT

*Developments of catalyst materials for biofuels to fulfill the world's energy needs are becoming very important due to limited oil resources. This preliminary research aims to understand the reaction that occurs when oxygen molecules ( $O_2$ ) interact  $NiMoS(\bar{1}010)$  edge of the  $NiMoS_2$  catalyst. The aim is to determine the formation and release mechanism of  $SO_2$  molecules following the adsorption of oxygen molecules ( $O_2$ ) on the catalyst. The catalyst is commonly used in the hydrodeoxygenation (HDO) process to remove the oxygen content within bio-oil. By means of density functional theory (DFT) calculations, this study first investigates preferable  $O_2$  adsorption sites on  $NiMoS(\bar{1}010)$  edge in  $NiMoS_2$  catalyst. The most stable geometry is shown when the  $SO_2$  bond is formed on the catalyst. The adsorbed  $O_2$  molecule weakens the Ni-S bonds on the  $NiMoS(\bar{1}010)$  edge as indicated by two Ni-S bonds being stretched. In addition, the bonding strength of  $SO_2$  formed in  $NiMoS(\bar{1}010)$  was analyzed using density of states (DOS) and charge density difference (CDD) plots and the results suggest that  $SO_2$  bonds are stronger than Ni-S. Nudged elastic band (NEB) calculation shows that  $SO_2$  molecule could desorbed from  $NiMoS(\bar{1}010)$  edge through endothermic reaction with requiring a certain amount of barrier energy.*

**Keyword:**  $SO_2$  formation,  $SO_2$  desorption,  $NiMoS_2$ , reaction mechanism

