

ABSTRAK

Lignoselulosa merupakan salah satu sumber energi alternatif terbarukan berbasis tumbuhan yang berasal dari sisa-sisa sampah pertanian yang memiliki potensi sebagai bahan baku untuk produksi biofuel generasi kedua. Agar dapat digunakan sebagai bahan bakar, lignoselulosa perlu menjalani proses pirolisis terlebih dahulu sebelum dikonversi mejadi bio-oil dan dilanjutkan dengan proses hidrodeoksigenasi (HDO) untuk konversi dari bio-oil menjadi biofuel. Anisole merupakan salah satu model senyawa aromatik penyusun lignoselulosa yang memiliki gugus fungsi metoksi (-OCH₃). Dalam penelitian ini, studi pendahuluan dilakukan untuk memahami tahap awal dalam proses hidrodeoksigenasi (HDO) pada anisole ketika berinteraksi dengan permukaan katalis MoS₂ menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui konfigurasi dan mekanisme interaksi anisol dengan permukaan katalis MoS₂ khususnya bagian basal MoS₂ dan bagian tepi yang tertutupi oleh sulfur dengan presentase 50% atom sulfur (Mo-S50) dan bagian tepi yang memiliki kekosongan sulfur (Mo-S50 CUS). Anisol paling stabil berinteraksi dengan Mo-S50 CUS ketika membentuk ikatan Mo-O antara atom O pada anisol dan atom Mo pada situs CUS dengan energi adsorpsi -1,53 eV. Sebagai akibat dari pembentukan ikatan Mo-O terjadi pelebaran puncak *Density of States* terutama pada orbital O-px dan O-py dan pergeseran vibrasi frekuensi anisol pada mode vibrasi stretching C-OCH₃ yang disertai penurunan intensitas yang signifikan bahkan hampir tidak dapat diamati lagi. Pada basal MoS₂ dan Mo-S50 anisol paling stabil ketika cincin aromatik sejajar dengan permukaan basal MoS₂ dan edge Mo-S50. Meskipun tidak terjadi pembentukan ikatan kovalen ataupun ionik namun anisol tetap teradsorpsi melalui interaksi van der Waals ditandai oleh energi adsorpsinya yang rendah yaitu -0,70 eV (basal) dan -0,38 eV (Mo-S50). Pergeseran frekuensi dan perubahan intensitas juga terjadi ketika anisol berinteraksi dengan basal MoS₂ dan edge Mo-S50 sebagai akibat dari interaksi van der Waals dan interaksi dipol meskipun tidak terlalu signifikan jika dibandingkan dengan bagian Mo-S50 CUS.

Kata kunci: DFT, biofuel, *hydrodeoxygenation*, MoS₂, anisol

ABSTRACT

Lignocellulosic is one of plant-based renewable energy mainly originated from the agricultural waste which has the potential as a raw material for the second generation biofuels. In order to utilize it as a fuel, lignocellulosic are required to be first upgraded into bio-oil through pyrolysis process and followed by hydrodeoxygenation (HDO) process for biooil-to-biofuel conversion.. Anisole is a model compound of lignocellulosic with a methoxy functional group (-OCH₃) attached. This research is a preliminary study to understand the early stage of hydrodeoxygenation (HDO) process on anisol when interacting with the MoS₂ surface using the Density Functional Theory (DFT) method. This study aims to determine the configuration and interaction mechanism of anisole with the MoS₂ surface, especially the basal plane of MoS₂, Mo-edge surface with 50% sulfur coverage (Mo-S50) and Mo-edge surface with sulfur vacancy (Mo-S50 CUS). The results is anisole interacts with Mo-S50 CUS when it forms a Mo-O bond between the O atom on the anisole and the Mo atom on the CUS site with an adsorption energy of -1.53 eV. As a result of the Mo-O bond, there is a widening of the Density of States peak, especially in the O-px and O-py orbitals and a shift in the vibration frequency of the anisol in the C-OCH₃ stretching vibration mode, followed by a significant decrease in intensity that can hardly be observed anymore. At MoS₂ basal plane and Mo-S50 edge, anisole is most stable when the aromatic ring is parallel to the MoS₂ basal surface and Mo-S50 edge. Even though no covalent or ionic bond formation occurs, anisole is still adsorbed via van der Waals interactions characterized by its low adsorption energy of -0.70 eV (basal) and -0.38 eV (Mo-S50). Frequency shifts and intensity changes also occur when anisol interacts with basal MoS₂ and edge Mo-S50 as a result of van der Waals and dipole interactions although not significantly when compared to the Mo-S50 CUS.

Keyword: DFT, biofuel, hydrodeoxygenation, MoS₂, anisol