

ABSTRAK

Adanya kebutuhan akan bahan bakar energi yang meningkat yang tidak sejalan dengan persediaan energi bumi yang ada, maka dibutuhkan sumber energi alternatif salah satunya ialah biofuel yang mana menggunakan biomassa sebagai bahan bakarnya. Lignoselulosa merupakan salah satu biomassa tersebut, sebelum digunakan menjadi biofuel lignoselulosa diubah menjadi bio-oil melewati proses pirolisis. Anisol merupakan salah satu hasil dari pirolisis tersebut, namun masih belum dapat digunakan sebagai biofuel dikarenakan masih memiliki atom oksigen maka dari itu membutuhkan proses lanjutan untuk mereduksi atom oksigen yaitu dengan proses HDO (Hydrodeoxygenation) menggunakan NiMoS₂ sebagai katalisnya. Oleh karena itu, membutuhkan pengetahuan secara teoritik apa yang terjadi ketika anisol berinteraksi dengan permukaan NiMoS₂ yaitu dengan mencari konfigurasi paling stabil dan memahami mekanisme yang terjadi pada saat anisol berinteraksi dengan permukaan NiMoS₂ tipe Ni-bare, tipe Mo-bare dan basal NiMoS₂. Dengan demikian interaksi antara anisol dengan permukaan NiMoS₂ tipe Ni-bare dan Mo-bare, dan basal NiMoS₂ akan dimodelkan menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*) dengan memperhitungkan interaksi van der Waals. Konfigurasi paling stabil untuk interaksi antara anisol dengan masing-masing permukaan ialah vertikal dan aromatik-S 3,3 Å untuk permukaan Mo-bare, planar dan aromatik-S 3,3 Å untuk permukaan Mo-bare, dan aromatik-S 3,3 Å untuk permukaan basal NiMoS₂. Mekanisme yang terjadi untuk permukaan *non-metal* identik sama yaitu adanya perubahan struktur elektronik dengan ditandai dengan penurunan nilai intensitas pada modus vibrasi yang dihasilkan terutama pada ikatan cincin aromatik, dan adanya pemberian-penerimaan elektron antara cincin aromatik dengan atom S yang berinteraksi. Sedangkan untuk permukaan ujung metal, perubahan yang terjadi ialah adanya pelemahan ikatan atom O-C pada anisol yang dapat terlihat dari penurunan nilai *wavenumber* modus vibrasi yang dihasilkan, adanya pemakaian bersama muatan antara atom O dan metal (Ni/Mo), dan terakhir dapat dilihat dengan perubahan keadaan kerapatan muatan pada orbital *px* dan *py* di atom O yang ditandakan dengan adanya pelebaran puncak yang berarti adanya hibridisasi antara atom O dengan metal (Ni/Mo) yang berinteraksi

Kata Kunci: Anisol, Ni-bare, Mo-bare, basal, NiMoS₂

ABSTRACT

Due to the increasing need for energy fuels that are not equal to the earth's existing energy supply, alternative energy sources are needed, one of which is biofuel which uses biomass as fuel. Lignocellulose is one of these biomasses, before being used as biofuel lignocellulose is converted into bio-oil through the pyrolysis process. Anisol is one of the results of pyrolysis, but it still cannot be used as biofuel because it still has oxygen atoms, therefore it requires an advanced process to reduce oxygen atoms, namely the HDO (Hydrodeoxygenation) process using NiMoS₂ as a catalyst. Therefore, it requires theoretical knowledge of what happens when anisole interacts with the NiMoS₂ surface, namely by finding the most stable configuration and understanding the mechanism that occurs when anisole interacts with Ni-bare type NiMoS₂, Mo-bare type and basal NiMoS₂ surfaces. Thus, the interaction between anisole with Ni-bare and Mo-bare type NiMoS₂ surfaces, and basal NiMoS₂ will be modeled using the DFT (Density Functional Theory) method by taking into account van der waals interactions. The most stable configurations for the interaction between anisole and each surface are vertical and aromatic-S 3.3 Å for Mo-bare surface, planar and aromatic-S 3.3 Å for Mo-bare surface, and aromatic-S 3.3 Å for NiMoS₂ basal surface. The mechanism that occurs for non-metal surfaces is identical, namely the change in electronic structure characterized by a decrease in the intensity value in the resulting vibration modes, especially in the aromatic ring bond, and the electron granting-receiving between the aromatic ring and the interacting S atom. As for the surface of the metal tip, the changes that occur are the weakening of the O-C atomic bond in anisole which can be seen from the decrease in the wavenumber value of the resulting vibration modes, the joint use of charges between O atoms and metal (Ni/Mo), and finally can be seen by changes in the state of charge density in the px and py orbitals in O atoms indicated by the widening of the peak which means hybridization between O atoms and metal (Ni/Mo) interacting.

Key Words: Anisol, Ni-bare, Mo-bare, basal, NiMoS₂