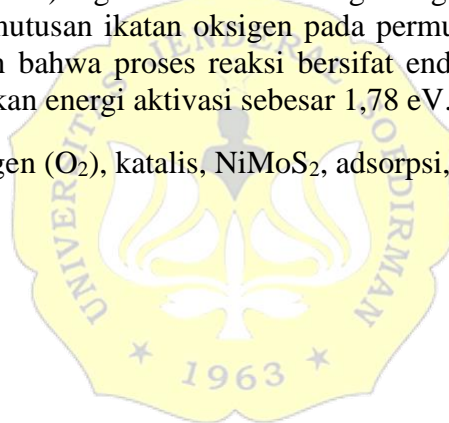


## ABSTRAK

Penelitian ini merupakan studi pendahuluan untuk memahami reaksi yang terjadi pada material katalis NiMoS<sub>2</sub> khususnya di permukaan Ni-Bare dengan molekul oksigen (O<sub>2</sub>) yang bertujuan untuk mengetahui proses pemutusan ikatan oksigen pada molekul O<sub>2</sub> yang menempel pada permukaan Ni-Bare. Katalis NiMoS<sub>2</sub> biasanya digunakan dalam proses *hydrodeoxygenation* (HDO) pada *bio-oil* untuk menghilangkan kandungan oksigen dan meningkatkan kualitas dari *biofuel*. Saat diletakkan di ruang terbuka katalis NiMoS<sub>2</sub> mengalami proses oksidasi karena berinteraksi langsung dengan oksigen. Penelitian *density functional theory* (DFT) ini menyelidiki proses adsorpsi disosiatif oksigen pada permukaan Ni-Bare. Penelitian diawali dengan mencari lokasi ideal untuk proses adsorpsi molekul O<sub>2</sub> pada permukaan Ni-Bare. Konfigurasi struktur yang paling stabil ditunjukkan oleh molekul O<sub>2</sub> yang menempel pada katalis NiMoS<sub>2</sub> dengan nilai energi adsorpsi sebesar -1,06 eV. Melemahnya ikatan O-O pada molekul O<sub>2</sub> pada permukaan Ni-Bare ditandai dengan memanjangnya kedua ikatan O-O sebesar 0,1 Å. Metode *nudged elastic band* (NEB) digunakan untuk menghitung jalur reaksi yang paling ideal untuk proses pemutusan ikatan oksigen pada permukaan Ni-Bare dan hasil kalkulasi menunjukkan bahwa proses reaksi bersifat endotermik dan pemutusan ikatan O-O membutuhkan energi aktivasi sebesar 1,78 eV.

Kata kunci: DFT, oksigen (O<sub>2</sub>), katalis, NiMoS<sub>2</sub>, adsorpsi, disosiasi



## ABSTRACT

*This research is a preliminary study to understand the reaction that occurs in NiMoS<sub>2</sub> catalyst material, particularly on the surface of Ni-Bare edge when interacting with oxygen molecules (O<sub>2</sub>) which aims to determine the oxygen bond breaking process following O<sub>2</sub> adsorption on the edge surface. NiMoS<sub>2</sub> catalyst is commonly used in the hydrodeoxygenation (HDO) process of bio-oil to remove oxygen content and improve the quality of biofuels. In open air atmosphere, the NiMoS<sub>2</sub> catalyst would be oxidized by oxygen. This density functional theory (DFT) study investigates oxygen dissociative adsorption on the Ni-Bare surface of NiMoS<sub>2</sub> catalyst. The work started on finding the most favorable adsorption sites for O<sub>2</sub> molecule on Ni-Bare edge. The most stable geometry is shown to attain an adsorption energy value of -1.06 eV. The adsorbed O<sub>2</sub> molecule has slightly longer O-O bond as its bond length stretched by 0.1 Å. Using nudged elastic band (NEB) method, the reaction path for oxygen dissociative process was examined and the result shows that the reaction is endothermic and an activation energy of 1,78 eV is needed to break the O-O bond.*

*Keyword: DFT, oxygen (O<sub>2</sub>), catalyst, NiMoS<sub>2</sub>, adsorption, dissociation*

