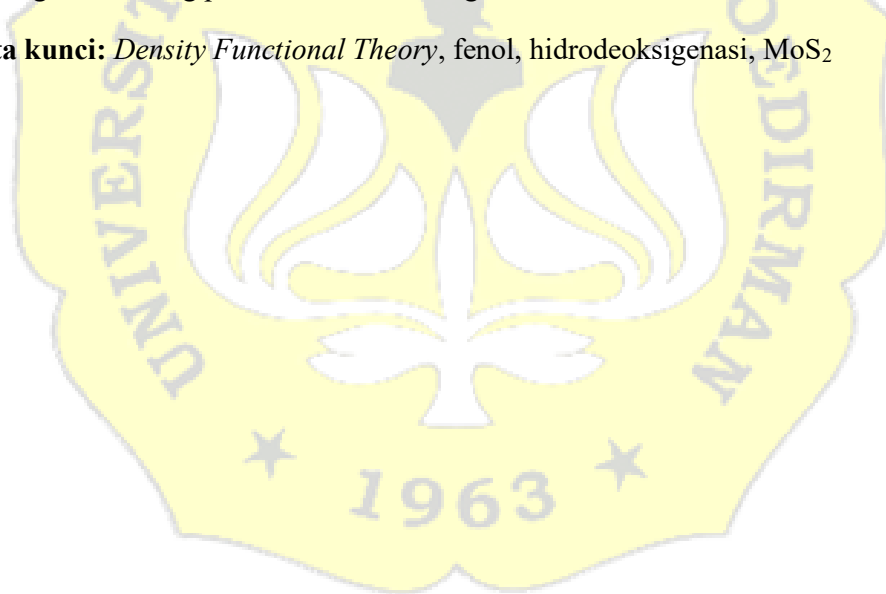


ABSTRAK

Penelitian ini membahas simulasi kuantum terkait interaksi antara fenol (C_6H_5OH) terhidrasi dengan permukaan katalis MoS_2 menggunakan metode *Density Functional Theory*. Dalam penelitian ini, gugus hidroksil pada fenol dihidrodeoksigenasi dengan katalis MoS_2 hingga membentuk benzena, yang kemudian diteliti lebih lanjut untuk dikonversi menjadi sikloheksana, senyawa yang berpotensi sebagai *biofuel*. Katalis MoS_2 dipilih karena telah terbukti efektif dalam proses hidrodeoksigenasi. Tujuan utama dari penelitian ini adalah mengidentifikasi konfigurasi interaksi paling stabil serta memahami mekanisme interaksi antara molekul fenol terhidrasi dan MoS_2 dalam variasi permukaan katalis, yaitu tipe basal, *edge-sulfur*, dan *vacancy-sulfur*. Hasil simulasi menunjukkan pada permukaan tipe basal, konfigurasi paling stabil adalah konfigurasi horizontal dengan jarak 3,01 Å dan energi interaksi sebesar -1,22 eV. Pada tipe *edge-sulfur*, konfigurasi paling stabil terletak pada konfigurasi vertikal dengan jarak 2,78 Å dan energi interaksi sebesar -2,89 eV, sedangkan pada *vacancy-sulfur* konfigurasi paling stabil terletak pada konfigurasi tegak lurus dengan jarak 3,11 Å dan energi interaksi sebesar -3,69 eV. Mekanisme interaksi yang diamati menunjukkan adanya pola yang konsisten di seluruh jenis permukaan, yaitu adanya pelemahan pada ikatan C-O, yang mendukung peristiwa hidrodeoksigenasi.

Kata kunci: *Density Functional Theory*, fenol, hidrodeoksigenasi, MoS_2



ABSTRACT

This research discusses quantum simulation related to the interaction between hydrated phenol (C_6H_5OH) and MoS_2 catalyst surface using Density Functional Theory method. In this study, the hydroxyl group on phenol is hydrodeoxygenated with MoS_2 catalyst to form benzene, which is then further studied for conversion into cyclohexane, a compound with potential as a biofuel. MoS_2 catalyst was chosen because it has been proven effective in the hydrodeoxygenation reaction. The main objective of this research is to identify the most stable interaction configuration as well as to understand the interaction mechanism between hydrated phenol molecules and MoS_2 in a variety of catalyst surfaces, namely basal, edge-sulfur, and vacancy-sulfur types. The simulation results show that on the basal-type surface, the most stable configuration is the horizontal configuration with a distance of 3.01 Å and an interaction energy of -1.22 eV. On the edge-sulfur type, the most stable configuration lies in the vertical configuration with a distance of 2.78 Å and an interaction energy of -2.89 eV, while on the vacancy-sulfur the most stable configuration lies in the perpendicular configuration with a distance of 3.11 Å and an interaction energy of -3.69 eV. The observed interaction mechanism shows a consistent pattern across all surface types, namely the weakening of the C-O bond, which supports hydrodeoxygenation reactions.

Keywords: *Density Functional theory, phenol hydrodeoxygenation, MoS_2*

