

## ABSTRAK

### STUDI KOMPUTASI DFT EPOKSIDASI ETILENA YANG DIKATALISIS VANADIUM SILIKA

Studi mekanisme dari epoksidasi etilena oleh hidrogen peroksida yang dikatalisis oleh vanadium yang didoping dalam mesopori silika telah dilaporkan. Perhitungan teori kerapatan elektron dengan basis set B3LYP/G-6311+ digunakan untuk mengamati jalur katalitik. Ada lima tahapan yang diusulkan. Tahap pertama adalah adsorpsi  $H_2O_2$  terhadap pusat atom Vanadium, kemudian diikuti oleh koordinasi etilena terhadap hidrogen peroksida. Tahap selanjutnya adalah tahap pembatas laju yaitu epoksidasi etilena melalui transfer satu atom oksigen. Tahap ini diikuti oleh desorpsi produk etilena oksida dan dehidrasi untuk membentuk kembali katalis. Nilai entalpi ini lebih rendah jika dibandingkan dengan penelitian sebelumnya dari literature dengan menggunakan katalis vanadium yang didoping dalam mesopori silika. Rincian mekanisme yang diuraikan dalam perhitungan ini dapat membantu dalam desain rasional dari katalis epoksidasi baru dan dengan demikian faktor-faktor yang mempengaruhi reaksi, yakni geometri molekul masing-masing interaksi yang hampir sama dengan referensi, muatan atom pada oksigen  $H_2O_2$  lebih negatif, kemudian katalis memiliki momen dipol 9,5676 Debye dan momen celah energi 1,349 eV, serta kerapatan elektron terdapat pada katalis HOMO terutama pada bagian pusat atom vanadium.

Kata-kata kunci: hidrogen peroksida; katalis epoksidasi; pemodelan molekul; vanadium silika; teori kerapatan elektron.

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUNAN GUNUNG DJATI  
BANDUNG

## **ABSTRACT**

### ***A DFT STUDY OF ETHYLENE EPOXIDATION CATALYZED BY VANADIUM SILICA***

*A mechanistic study of ethylene epoxidation by hydrogen peroxide catalyzed by vanadium doped in a silica mesopore is reported. Density functional theory calculations at the B3LYP/G-6311+ level were used to investigate the catalytic pathway. A five-step cycle is proposed. The initial steps are the adsorption of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> to the Vanadium atom center, then followed by coordination of ethylene to the hydrogen peroxide. The next step is rate-limiting step is the subsequent epoxidation of ethylene via transfer of an oxygen atom. Then the end step is followed by desorption of the ethylene oxide product and dehydration to regenerate the catalyst. The reaction barrier is lower than reported for other catalysts in the literature, consistent with recent experimental reports of the efficacy of Nb-doped mesoporous silica catalysts. The mechanistic details elucidated in the present calculations may aid in the rational design of new epoxidation catalysts and thus the factors influencing the reaction that is geometry molecules are reasonable with reference, and charge of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> is 9,5676 Debye, catalys energy gap is 1,349 eV, and electron density is found in the HOMO Catalys structure, especially in the center of the vanadium atom.*

*Keywords: hydrogen peroxide; epoxidation catalyst; molecular modeling; vanadium silica; density functional theory.*



UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUNAN GUNUNG DJATI  
BANDUNG