

## INTISARI

Studi ini melaporkan pengembangan katalis bifungsional untuk konversi selektif gliserol menjadi propilen glikol (PG) melalui reaksi *catalytic transfer hydrogenolysis* (CTH) yang dikombinasikan dengan produksi hidrogen *in-situ* melalui *aqueous-phase reforming* (APR). Pendekatan eksperimental terstruktur empat tahap yang digunakan mencakup pemilihan material penyangga katalis, optimasi komposisi logam aktif, evaluasi reusabilitas, serta analisis kinetika. Penapisan material penyangga dalam kondisi APR–CTH (250 °C, 6 jam, dan 20% v/v gliserol) mengidentifikasi alumina sebagai penyangga paling efektif karena memiliki situs asam-basa permukaan yang terdistribusi dengan baik. Optimasi selanjutnya menggunakan *augmented simplex centroid design* (ASCD) menunjukkan bahwa formulasi katalis terbaik adalah kombinasi logam Cu-Mg dengan rasio 20:80 wt%. Komposisi ini dipilih karena memberikan efek sinergistik yang mampu menekan jumlah situs asam yang berperan dalam pembentukan 2-propanol, sekaligus meningkatkan jumlah situs basa yang diperlukan untuk memaksimalkan yield PG. Katalis optimum terbukti mencapai konversi gliserol 98,98% dan yield PG 69,37% serta menunjukkan kinerja stabil selama sepuluh siklus berturut-turut, dengan *turnover frequency* (TOF) sebesar 8,17 jam<sup>-1</sup> dan *turnover number* (TON) sebesar 49,01 mol produk per mol situs aktif, yang menegaskan ketahanan dan kemampuan katalis yang baik untuk digunakan berulang. Selanjutnya pemodelan kinetika dengan model *Langmuir Hinshelwood Hougén Watson* (LHHW) mengungkap bahwa konversi gliserol dan reaksi hidrogenolisis menjadi PG berlangsung pada situs basa dengan energi aktivasi sedang (29,49–40,18 kJ·mol<sup>-1</sup>), sedangkan reaksi samping PG menjadi 2-propanol terbatas pada situs asam dengan energi aktivasi yang lebih tinggi (219,78 kJ·mol<sup>-1</sup>). Temuan ini memberikan wawasan bahwa kondisi operasi yang lebih moderat lebih ideal untuk reaksi APR-CTH. Analisis parameter kinetika mengungkapkan bahwa suhu tinggi dan waktu reaksi yang berkepanjangan memicu reaksi samping pada situs asam, sehingga menurunkan yield produk utama. Secara keseluruhan penelitian ini menetapkan Cu–Mg/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sebagai katalis bifungsional yang menjanjikan serta memberikan wawasan yang mendukung peningkatan nilai gliserol secara berkelanjutan menjadi PG yang sejalan dengan SDGs 12 dan 13.

## ABSTRACT

This study reports the development of bifunctional catalysts for the selective conversion of glycerol into propylene glycol (PG) through catalytic transfer hydrogenolysis (CTH) coupled with in-situ hydrogen generation via aqueous phase reforming (APR). A structured four-stage experimental framework was employed, encompassing catalyst support screening, optimization of active metal compositions, evaluation of stability and reusability, and kinetic analysis. Screening of natural clay minerals under APR–CTH conditions (250 °C, 6 h, 20% v/v glycerol) identified alumina as the most effective support owing to its well-balanced physicochemical properties and uniformly distributed surface acid–base sites. Subsequent optimization using an augmented simplex centroid design (ASCD) demonstrated that the optimal catalyst formulation consisted of a Cu–Mg metal combination at a 20:80 wt% ratio. This composition produced a synergistic effect that suppressed the density of acidic sites responsible for 2-propanol formation, while simultaneously increasing the number of basic sites required to maximize PG yield. The optimized Cu–Mg/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst achieved 98.98% glycerol conversion and 69.37% PG yield, and maintained stable performance over ten consecutive reaction cycles, with a turnover frequency (TOF) of 8.17 h<sup>-1</sup> and a turnover number (TON) of 49.01 mol product per mol active site, confirming its robustness and suitability for repeated use. Kinetic modeling using LHHW approach revealed that glycerol conversion and its hydrogenolysis to PG proceeded primarily on basic sites with moderate activation energies (29,49–40,18 kJ mol<sup>-1</sup>). In contrast, the secondary hydrogenolysis of PG to 2-propanol was limited to acidic sites and required a substantially higher activation barrier (219,78 kJ mol<sup>-1</sup>). These findings indicate that more moderate operating conditions are favorable for the APR–CTH process. The kinetic parameters further revealed that elevated temperatures and prolonged reaction times promote side reactions on acidic sites, thereby reducing the yield of the desired product. Overall, this study establishes Cu–Mg/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> as a promising bifunctional catalyst and provides fundamental kinetic and mechanistic insights that support the sustainable upgrading of glycerol into PG in alignment with Sustainable Development Goals (SDGs) 12 and 13.

**Keywords:** glycerol; propylene glycol; aqueous-phase reforming; catalytic hydrogenolysis; organic chemistry; Langmuir Hinshelwood Hougen Watson.