

## BAB 5

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dari proses pembentukan dan penglepasan  $\text{SO}_2$  pada model permukaan  $\text{NiMoS}(\bar{1}010)$  pada katalis  $\text{NiMoS}_2$  maka dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Struktur Ni *edge* dari  $\text{NiMoS}_2/\text{Al-PILC}$  diketahui terdapat 2 jenis, yaitu Ni mengikat 3 atom S, dan Ni mengikat 4 atom S. Di mana atom Ni yang mengikat 3 atom S memiliki atom tetangga terdekat pertama berupa 4 atom S dengan jarak rata-rata 2,23 Å, atom tetangga terdekat kedua berupa 2 atom Ni dengan jarak rata-rata 2,95 Å, dan atom tetangga terdekat ketiga yaitu 4 atom S pada jarak rata-rata 4,06 Å. Sedangkan untuk Ni mengikat 4 atom S memiliki atom tetangga terdekat pertama berupa 3 atom S pada jarak rata-rata 2,22 Å, masing-masing 1 atom Mo sebagai atom tetangga terdekat kedua dan ketiga pada jarak 2,76 Å dan 2,94 Å, dan 2 atom S sebagai atom tetangga terdekat keempat pada jarak 3,51 Å. Struktur tersebut sesuai dengan model struktur  $\text{NiMoS}(\bar{1}010)$ .
2. Adsorpsi molekul  $\text{O}_2$  pada permukaan  $\text{NiMoS}(\bar{1}010)$  membentuk ikatan  $\text{SO}_2$  pada permukaan  $\text{NiMoS}(\bar{1}010)$  tersebut, dengan energi adsorpsi sebesar -3,311 eV. Adsorpsi molekul  $\text{O}_2$  mengakibatkan ikatan Ni-S menjadi lemah sedangkan terbentuk ikatan kuat  $\text{SO}_2$  yang merupakan ikatan kovalen polar.
3. Reaksi penglepasan  $\text{SO}_2$  pada permukaan  $\text{NiMoS}(\bar{1}010)$  diawali dengan pembentukan ikatan  $\text{SO}_2$  pada permukaan  $\text{NiMoS}(\bar{1}010)$  secara spontan melalui reaksi eksoterm, kemudian penglepasan molekul  $\text{SO}_2$  terjadi melalui reaksi endoterm dengan energi aktivasi sebesar 1,22 eV.

#### 5.2 Saran

Berhubung hasil penelitian ini hanya menggunakan satu molekul udara ( $\text{O}_2$ ), maka saran untuk penelitian selanjutnya yaitu menginteraksikan kembali molekul

udara ( $O_2$ ) dengan permukaan  $NiMoS(\bar{1}010)$  setelah terjadi kekosongan sulfur akibat penglepasan  $SO_2$ . Hal tersebut berguna untuk mengetahui tahapan proses oksidasi selanjutnya pada permukaan  $NiMoS(\bar{1}010)$ .

