

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan data penelitian yang didapatkan:

1. Tingkat kekuatan dan kestabilan interaksi molekul anisol dengan permukaan MoS₂ dapat diurutkan sebagai Mo-S50 dengan CUS > Mo-S50 tanpa CUS > basal MoS₂ dengan masing-masing energi adsorpsi -1,53 eV, -0,70 eV, dan -0,38 eV. Molekul anisol paling stabil berinteraksi pada permukaan basal MoS₂ dan edge Mo-S50 tanpa CUS ketika cincin aromatik anisol sejajar dengan permukaan basal MoS₂ dan edge Mo-S50 tanpa CUS. Sementara itu molekul anisol berinteraksi paling kuat dengan permukaan edge Mo-S50 dengan CUS ketika terbentuk ikatan Mo-O antara atom O pada anisol dengan kedua atom Mo pada situs CUS.
2. Mekanisme interaksi antara anisol dengan permukaan basal MoS₂ dan edge Mo-S50 tanpa CUS yaitu interaksi lemah van der Waals disertai dengan perubahan energi dan intensitas mode vibrasi khususnya pada vibrasi C-OCH₃ dan cincin aromatik C-C. Untuk kasus edge Mo-S50 dengan CUS terjadi pembentukan ikatan kovalen Mo-O yang juga disertai perubahan energi dan intensitas mode vibrasi C-OCH₃ dan cincin aromatik C-C.

5.2 Saran

Saran yang dapat diberikan untuk penelitian selanjutnya adalah melanjutkan proses pemutusan ikatan oksigen pada anisol.