

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dari proses pemutusan ikatan molekul O₂ pada model permukaan Ni-Bare pada katalis NiMoS₂ maka dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Hasil *fitting* data EXAFS menunjukkan struktur sudah sesuai dengan model struktur permukaan Ni-bare pada katalis NiMoS₂ yang ditandai dengan nilai *R-factor* sebesar 0.0167.
2. Molekul O₂ menempel pada permukaan Ni-Bare dengan energi adsorpsi bervariasi antara -0,156 eV dan -1,412 eV. Namun proses pemutusan ikatan O-O hanya memiliki peluang terjadi pada konfigurasi O₂ dengan masing-masing atom oksigen menempel pada satu nikel atom.
3. Reaksi pemutusan molekul O pada permukaan Ni-Bare diawali dengan pembentukan ikatan Ni-O pada permukaan Ni-Bare, dilanjutkan dengan pemutusan ikatan O-O melalui reaksi endoterm dengan energi aktivasi sebesar 1,78 eV.

5.2 Saran

Berhubung hasil penelitian ini hanya menggunakan satu molekul udara (O₂), maka saran untuk penelitian selanjutnya yaitu menginteraksikan kembali dengan molekul penyusun udara terbuka lainnya.