BAB V
KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari penelitian mengenai pemecahan H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads} , dapat ditarik beberapa kesimpulan, yaitu:

1. Ada tiga jalur reaksi yang berbeda untuk memecah H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads}. Energi aktivasi dari jalur reaksi pertama, kedua, dan ketiga berturut-turut adalah 0,68 eV, 0,69 eV, dan 1,19 eV. Dari data tersebut dapat dinyatakan bahwa pemecahan H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads} lebih mungkin untuk melalui jalur reaksi pertama yang memiliki energi aktivasi terrendah. Pada jalur reaksi pertama ini, diketahui situs-situs yang dilalui atom H adalah dari tom Mo menuju ke HCP Pt35-Mo2-Pt45, kemudian menuju ke situs FCC Pt35-Mo2-Pt36, selanjutnya menuju situs bridge Pt35-Pt36, kemudian ke situs HCP Pt35-Pt36-Pt39, dan berakhir di situs FCC Pt35-Pt38-Pt39.
2. Pemecahan H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads} dapat terjadi akibat molekul H_2O_{ads} menyerap kuat pada atom Mo di permukaan. Muatan di sekitar atom H diketahui berpindah menuju atom Pt di permukaan, sehingga membuat atom H tertarik menuju atom Pt yang kemudian memicu terpecahnya molekul H_2O_{ads}.

5.2 Saran

Adapun saran yang diperoleh dari apa yang didapatkan di penelitian ini adalah dapat dilakukan penentuan jalur reaksi dengan menggunakan metode *Nudget Elastic Band* (NEB) untuk mengetahui bagaimana jalur reaksi yang lebih akurat. Selanjutnya juga perlu dianalisis kembali bagaimana posisi H_2O pada keadaan awal dan keadaan akhirnya untuk dapat mendukung diperolehnya energi aktivasi yang lebih minimum.