

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian pada reaksi pembentukan COOH di atas permukaan PtMo(111), dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Situs yang paling stabil untuk koadsorpsi CO dan OH pada permukaan PtMo(111) adalah CO pada situs *top* Pt35 dan OH pada situs *top* Mo44, sedangkan situs paling stabil untuk adsorpsi COOH pada permukaan PtMo(111) yaitu COOH pada *top* Pt39.
2. Mekanisme reaksi koadsorpsi CO dan OH menjadi COOH pada permukaan PtMo(111) telah diklarifikasi dengan distribusi muatan dan rapat keadaan lokal pada orbital p_z sebagai orbital yang berperan dalam pembentukan.
3. Kemungkinan pembentukan COOH pada permukaan PtMo(111) telah diidentifikasi dengan menggunakan metode NEB yang menyatakan pembentukan COOH pada permukaan PtMo(111) mungkin terjadi dengan energi *barrier* sebesar 0,63 eV.

5.2 Saran

Saran untuk penelitian selanjutnya yaitu perlu merotasi molekul OH pada koadsorpsi CO dan OH dan rotasi COOH secara horizontal untuk mendapatkan energi adsorpsi paling minimum.