

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan dari hasil penelitian yang telah dilakukan mengenai adsorpsi H₂O pada permukaan α -Fe₂O₃ dengan metode *density functional theory*, didapatkan kesimpulan sebagai berikut:

1. Telah berhasil dilakukan adsorpsi H₂O dengan permukaan α -Fe₂O₃ pada situs Top Fe Konfigurasi Kedua Atom H Sejajar Fe, Top Fe Konfigurasi Kedua Atom H Miring, Top Fe Konfigurasi Kedua Atom H Diatas Atom O, top O, dan bridge Fe-O. Situs yang paling stabil adalah situs Top Fe Konfigurasi Kedua Atom H Diatas Atom O yang memiliki energi adsorpsi dengan minus paling negatif.
2. Mekanisme reaksi adsorpsi H₂O pada permukaan α -Fe₂O₃ pada situs yang paling stabil situs Top Fe Konfigurasi Kedua Atom H Diatas Atom O dengan hasil analisis transfer muatan menunjukkan semakin besar transfer muatan maka akan semakin kuat ikatan antara adsorbat dengan adsorben.

5.2 Saran

1. Unit sel dapat diperbesar, untuk meminimalisir adanya kemungkinan interaksi antar atom.
2. Dapat dilakukan pemisahan molekul H₂O di atas permukaan α -Fe₂O₃ dengan metode *density functional theory*.