

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Hasil penelitian pada interaksi antara HCOO^- dan permukaan PtMo (111) menggunakan metode Density Functional Theory, dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Telah terjadi interaksi antara gugus formate dan permukaan PtMo (111) paling stabil dengan energi adsorpsi sebesar -6.74 eV berbentuk konfigurasi *side-on*, dimana atom O1 berikatan dengan atom Mo2, dan atom O2 berikatan dengan atom Pt45.
2. Mekanisme interaksi antara gugus formate dan permukaan PtMo (111) telah diklarifikasi dengan distribusi muatan dan rapat keadaan pada orbital p_z sebagai orbital yang berperan dalam interaksi.

5.2 Saran

Saran untuk penelitian selanjutnya yaitu melakukan simulasi kuantum reaksi pembentukan HCOO^- pada permukaan PtMo (111).

