

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang diperoleh dari interaksi CO₂ dengan MgO-doped Zeolite, didapatkan kesimpulan bahwa:

1. Konfigurasi paling stabil untuk interaksi antara CO₂ dengan MgO-doped Zeolite ketika CO₂ berada di atas *surface* berikatan dengan atom Si dengan energi adsorpsi -1,89 eV pada jarak 2,2 Å yang ditandai dengan nilai energi paling rendah dikarenakan pada saat energi semakin rendah gaya tarik menarik atom CO₂ antara atom C dengan Si pada MgO-doped Zeolite berinteraksi semakin kuat.
2. Mekanisme interaksi antara CO₂ dengan MgO-doped Zeolite yaitu:
 - a. Terdapat pergeseran *peak* pada frekuensi 2.364,59 cm⁻¹ *asymetrical stretch* yang menandakan adanya penurunan kekuatan osilator serta penurunan *peak* menjadi 2.036,94 cm⁻¹ *stretching* menandakan adanya interaksi lemah yang terlihat yang disebabkan oleh adanya ikatan baru antara C dan Si.
 - b. Pembentukan ikatan tersebut juga menyebabkan perubahan DOS Dimana adanya penurunan *peak* terlihat dari distribusi muatan pada *charge density difference* serta nilai bader dari Si MgO-doped Zeolite terhadap C dan O pada CO₂ memperlihatkan adanya ikatan.

5.2 Saran

Saran penelitian terkait zeolit yang dapat dilakukan selanjutnya adalah melakukan pemutusan CO₂ pada MgO-doped Zeolite.