

## **BAB 5**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **5.1 KESIMPULAN**

Berdasarkan penelitian simulasi adsorpsi gugus format dan asam format pada permukaan PtRuMo, maka dapat disimpulkan hasil sebagai berikut

1. Konfigurasi interaksi gugus format dan asam format dengan katalis PtRuMo yang paling stabil adalah *end-on*. Pada konfigurasi tersebut satu atom O gugus format dan asam format berinteraksi di atas atom Mo katalis PtRuMo.
2. Mekanisme interaksi gugus format dan asam format dengan katalis PtRuMo terjadi karena transfer muatan. Pada gugus format transfer muatan terjadi dari atom Mo katalis PtRuMo ke atom O adsorbat. Sebaliknya, pada asam format transfer muatan terjadi dari atom O adsorbat ke atom Mo katalis PtRuMo.

#### **5.2 SARAN**

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka disarankan untuk

1. Dilakukan uji konvergensi sebagai pertimbangan KPOINT yang akan digunakan agar hasil kalkulasi yang diperoleh lebih akurat.
2. Dilakukan variasi konfigurasi interaksi planar (posisi mendatar) gugus format dan asam format pada permukaan PtRuMo untuk perolehan konfigurasi paling stabil.