

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan mengenai adsorpsi H₂O pada permukaan PtRuMo(111) dengan metode *density functional theory*, diperoleh kesimpulan berikut:

1. Situs adsorpsi H₂O pada permukaan logam PtRuMo(111) yang paling stabil adalah situs *top* Mo. Penambahan dopan Ru dan Mo terhadap Pt murni akan menstabilkan adsorpsi H₂O, yang ditandai dengan semakin kuatnya interaksi antara H₂O dan PtRuMo(111).
2. Mekanisme reaksi adsorpsi H₂O pada permukaan PtRuMo(111) pada situs paling stabil (*top* Mo), memiliki ikatan kovalen. Hasil analisis transfer muatan juga menunjukkan bahwa semakin besar transfer muatan yang terjadi, maka akan semakin kuat ikatan antara adsorbat dan permukaan logam.

5.2 Saran

Saran-saran yang dapat diberikan untuk penelitian selanjutnya adalah dalam simulasi perlu dilakukan relaksasi *surface* dan adsorbat pada tiap tahap adsorpsi untuk mendekati sistem yang lebih nyata