

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

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

1. Penggunaan konfigurasi H₂O dengan kedua atom H turun memberikan hasil yang energi adsorpsi yang lebih stabil dibandingkan dengan konfigurasi H₂O dengan kedua atom H ke atas dengan nilai energi adsorpsi yang lebih rendah.
2. Mekanisme reaksi adsorpsi H₂O pada permukaan Pt(111), PtMo(111) dan PtRu(111). Pada situs paling stabil (*top*), ikatan H₂O dengan permukaan dibentuk melalui pemakaian bersama elektron yang disebut 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 perbaikan pada penelitian selanjutnya adalah:

Perlu dilakukan optimasi struktur adsorpsi dengan memperhitungkan derajat rotasi H₂O.