

## BAB V

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 5.1 Kesimpulan

Energi Helmholtz okupansi yang diturunkan dari teori vdWP dapat digunakan untuk menentukan okupansi maksimum dari hidrogen dalam struktur es VI/2 sebagai fungsi  $T, p$ . Hasilnya, namun demikian, menunjukkan bahwa metode tersebut berlebihan dalam penentuan okupansi dibandingkan simulasi GCMC karena teori vdWP berasumsi bahwa interaksi antara hidrogen dengan hidrogen dapat diabaikan. Penelitian ini menghasilkan gambaran tentang tren okupansi hidrogen dalam es VI/2 yang sesuai dengan hasil simulasi GCMC, dan hal tersebut dapat dikembangkan untuk menghitung potensial kimia sistem untuk mengevaluasi stabilitas termodinamika.

#### 5.2 Saran

Stabilitas termodinamika dari struktur es VI/2 dapat dikuantifikasi sebagai potensial kimia. Potensial kimia bentuk es lainnya dapat dihitung secara tidak langsung menggunakan teori vdWP.