

## BAB V

### SIMPULAN, IMPLIKASI, & REKOMENDASI

#### 5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini, kesimpulan yang dapat diperoleh adalah sebagai berikut:

1. Konvergensi parameter didapatkan dengan menggunakan kalkulasi SCF (*Self-Consistent Field*) pada struktur LFCO terhadap molekul gas etanol. Didapatkan konvergensi pada sampling yang dilakukan untuk *k-points*, energi *cut-off* dan variasi jarak. Nilai konvergensi pada *k-points* yaitu  $4 \times 4 \times 4$ , kemudian untuk energi *cut-off* sebesar 45 eV. Lalu untuk variasi jarak yang didapatkan LFCO terhadap molekul gas etanol adalah 1 Å dan jarak LFCO dengan rGO sebesar 1 Å.
2. Energi adsorpsi didapatkan dengan menggunakan kalkulasi vc-relax terhadap struktur adsorbat, adsorben dan sistem secara menyeluruh. Didapatkan energi total melalui kalkulasi vc-relax yang kemudian di substitusi kedalam persamaan 2.10. Sehingga, mendapatkan nilai energi adsorpsi molekul gas etanol dengan LFCO sebesar -2.38 eV dan LFCO @ rGO sebesar -2.93 eV.
3. Nilai energi adsorpsi molekul gas etanol dengan LFCO @ rGO didapatkan sebesar -2.93 eV. Nilai tersebut setelah dimutlakan lebih besar dibandingkan dengan tanpa rGO sebesar 23,58 %. Peningkatan nilai energi adsorpsi tersebut menunjukkan peningkatan selektivitas material LFCO @ rGO terhadap molekul gas etanol. Sehingga membuat LFCO @ rGO menjadi potensial untuk diaplikasikan kedalam sensor gas etanol.

#### 5.2 Implikasi

Penelitian ini memperoleh informasi bahwa ketika dilakukan penambahan lapisan rGO pada material LFCO untuk sensor gas terhadap molekul gas etanol dapat meningkatkan energi adsorpsinya.

Sehingga hal ini menunjukkan bahwa terdapat peningkatan dalam hal selektivitas dan sensitivitas material LFCO @ rGO terhadap molekul gas etanol. Oleh karena itu, penelitian ini menunjukkan potensi dan kelayakan material LFCO @ rGO sebagai material sensor gas etanol.

### 5.3 Rekomendasi

Penelitian material LFO dan rGO untuk sensor gas etanol perlu diteliti lebih dalam baik secara komputasi maupun pemodelan. Oleh karena itu, terdapat beberapa hal yang dapat direkomendasikan untuk penelitian tersebut, sebagai berikut:

1. Melakukan kalkulasi serta analisis sifat elektronik material sebelum dan sesudah dipengaruhi molekul gas etanol, yaitu dengan cara menentukan DOS (Density Of States) dan *Band Gap* (Celah Pita Energi) material tersebut.
2. Melakukan variasi *doping* maupun *couple doping* pada material LFO, untuk mendapatkan doping yang optimal.
3. Melakukan *doping* pada struktur rGO, dikarenakan dalam beberapa penelitian diketahui bahwa ketika rGO di-*doping* akan menurunkan temperatur kerja sensor gas.