

BAB V

SIMPULAN, IMPLIKASI DAN REKOMENDASI

5.1 Simpulan

Berdasarkan temuan dan pembahasan, dapat diperoleh simpulan sebagai berikut:

1. Energi adsorpsi molekul etanol terhadap sistem LFMO yaitu sebesar -3.93 eV dan sistem LFMO @ rGO sebesar -4.35 eV. Energi adsorpsi diperoleh menggunakan kalkulasi vc-relax untuk menghitung nilai energi total dari adsorbat, adsorben, dan sistem secara keseluruhan. Besarnya energi total yang didapatkan dari vc-relax kemudian disubstitusi ke dalam persamaan 2.14.
2. Energi adsorpsi yang dihasilkan dari molekul etanol terhadap sistem LFMO dan sistem LFMO @ rGO menunjukkan angka negatif. Energi adsorpsi bernilai negatif dengan nilainya yang lebih besar dari 0.8 eV (setelah diabsolutkan) menunjukkan bahwa proses adsorpsi antara molekul etanol terhadap sistem LFMO maupun LFMO @ rGO terjadi secara eksotermik dan *chemisorption*. Sehingga, molekul gas etanol dapat dengan mudah teradsorpsi pada permukaan LFMO dan memiliki potensi selektivitas yang baik.
3. Energi adsorpsi molekul etanol terhadap sistem LFMO @ rGO setelah diabsolutkan mengalami peningkatan sebesar 10.68% jika dibandingkan dengan sistem LFMO tanpa rGO. Dengan terjadinya peningkatan tersebut proses adsorpsi pada sistem LFMO @ rGO terhadap molekul etanol menjadi semakin kuat, sehingga LFMO @ rGO menjadi potensial untuk dijadikan sebagai material sensor gas etanol.

5.2 Implikasi

Penelitian ini diharapkan dapat digunakan sebagai referensi untuk penelitian berikutnya mengenai penggunaan *monolayer* dalam pengembangan material sensor gas. Hal ini dikarenakan energi adsorpsi yang diperoleh dari penambahan lapisan rGO sebagai *functional layer* pada LFMO menunjukkan kemampuan *sensing*

terhadap molekul gas etanol yang lebih baik jika dibandingkan tanpa penambahan lapisan rGO.

5.3 Rekomendasi

Penelitian material LFO dan rGO sebagai material sensor gas etanol ini perlu dikaji lebih mendalam untuk menjalankan pemodelan dan komputasi hingga mencapai hasil yang cukup akurat, dikarenakan terdapat banyak aproksimasi dalam proses perhitungan berbasis DFT (*density functional theory*). Untuk itu terdapat beberapa hal yang dapat dilakukan untuk penelitian selanjutnya, yaitu sebagai berikut:

1. Melakukan uji konvergensi harga *k-points* dan energi *cut-off* pada setiap material yang akan digunakan dalam perhitungan komputasi.
2. Menggunakan harga *k-points* dan energi *cut-off* yang lebih tinggi.
3. Menggunakan variasi file *pseudopotential* dalam pemodelan dan komputasi.
4. Melakukan variasi fraksi *doping* pada LFO.
5. Melakukan variasi *doping* atau *co-doping* pada LFO.
6. Melakukan *doping* pada struktur rGO.
7. Mempertimbangkan input temperatur dalam perhitungan komputasi untuk mengetahui temperatur kerja material.
8. Melakukan perhitungan dan analisis terhadap sifat elektronik material sebelum dan sesudah terpapar molekul gas etanol, dengan cara menentukan *band gap* (celah pita) dan *density of states* (rapat keadaan) material.