

## BAB V

### SIMPULAN, IMPLIKASI, DAN REKOMENDASI

#### 5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian, diperoleh Kesimpulan sebagai berikut :

1. Energi adsorpsi pada Pd-LaFeO<sub>3</sub> -2,01 eV diperoleh dari kalkulasi *vc-relax* terhadap struktur adsorben, adsorbat, dan sistem secara keseluruhan.
2. Energi adsorpsi molekul gas etanol pada Pd-LaFeO<sub>3</sub>@rGO -2,29 eV. Adsorpsi mengalami peningkatan sebesar 13,93% ketika ditambahkan rGO. Dari hal tersebut, penambahan lapisan rGO efektif untuk memperkuat adsorpsi.
3. Struktur bands setelah diberi doping dan rGO semakin menyempit. Energi celah pita Pd-LaFeO<sub>3</sub> sebelum terpapar gas 2,34 eV dan saat terpapar 2,06 eV. Kemudian, energi celah pita Pd-LaFeO<sub>3</sub>@rGO sebelum terpapar sekitar 0,11 eV dan saat terpapar 0,05 eV.

#### 5.2 Implikasi

Penambahan rGO atau Pd-LaFeO<sub>3</sub>@rGO merupakan material yang efektif untuk dibuat sebagai sensor gas karena keunggulan dalam energi adsorpsi yang tinggi (negatif), struktur pita menyempit, serta energi celah pita yang kecil. Dengan demikian material Pd-LaFeO<sub>3</sub>@rGO menunjukkan potensi sebagai sensor gas etanol.

#### 5.3 Rekomendasi

Penelitian terkait sensor gas LaFeO<sub>3</sub> dan rGO masih perlu dikaji lebih lanjut terkait pemodelan maupu komputasi untuk mendapatkan Gambaran eksperimen yang lebih baik. Dari hal tersebut direkomendasikan beberapa saran, sebagai berikut :

1. Melakukan pemodelan dengan *doping* lain yang potensial untuk sensor gas selain Pd.
2. Melakukan pemodelan kombinasi *doping* Pd dengan lainnya pada LFO.

3. Melakukan kalkulasi dengan gas selain etanol untuk material Pd-LaFeO<sub>3</sub>.