

BAB V

SIMPULAN, IMPLIKASI, DAN REKOMENDASI

5.1 Simpulan

Berdasarkan temuan dan pembahasan, dapat diperoleh simpulan sebagai berikut:

1. Energi adsorpsi sistem ALFO dan ALFO@rGO terhadap molekul etanol berhasil diperoleh melalui kalkulasi *vc-relax* untuk menghitung nilai energi total dari adsorbat, adsorben dari kedua sistem yang kemudian nilainya disubstitusikan pada persamaan 2.4. Besar energi adsorpsi yang diperoleh secara berturut-turut adalah sebesar -4,51 eV dan -6.04 eV. Nilai energi adsorpsi ALFO terhadap molekul etanol setelah dilapisi rGO meningkat secara absolut yang menunjukkan bahwa proses adsorpsi semakin kuat.
2. Energi celah pita pada sistem ALFO dan ALFO@rGO ketika sebelum dan selama terpapar etanol berhasil diperoleh menggunakan struktur sel yang telah terlaksasi pada titik simetri tinggi. Besar energi celah pita ALFO sebelum dan selama terpapar etanol sebesar 0,73 eV dan 0,61 eV. Sedangkan untuk sistem ALFO@rGO sebesar 0,58eV dan 0,43 eV. Penurunan nilai energi celah pita ALFO setelah dilapisi rGO berpotensi dapat meningkatkan respon sensor gas sehingga material ALFO@rGO memiliki potensial yang baik sebagai sensor gas ethanol.

5.2 Implikasi

Penelitian material Ag-LaFeO₃ yang dilapisi rGO dengan metode komputasi DFT ini memberikan potensi pengembangan bagi teknologi sensor gas etanol khususnya untuk material semikonduktor logam oksida (MOS) dengan lapisan rGO. Hasil temuan pada penelitian ini dapat menjadi langkah awal untuk pembuatan prototipe sensor gas berbasis MOS@rGO.

5.3 Rekomendasi

Penelitian sensor gas etanol dengan material ALFO dengan lapisan rGO ini perlu dikaji lebih mendalam baik secara metode komputasi dan analisis untuk mendapatkan gambaran karakteristik material yang lengkap sehingga mendekati hasil eksperimen. Beberapa hal yang dapat saya rekomendasikan adalah:

1. Melakukan komputasi DFT+U dengan menambah nilai koreksi Hubbard (U) untuk menangani sistem dengan elektron terlokalisasi kuat pada orbital tertentu, sehingga dapat memberikan prediksi yang lebih akurat tentang nilai energi celah pita dan sifat elektronik material lainnya.
2. Melakukan pemodelan yang lebih sesuai dengan kondisi material pada saat pengujian paparan molekul gas ethanol, seperti mempertimbangkan kehadiran molekul oksigen, pertimbangan temperatur, dan yang lainnya.