

BAB V

SIMPULAN, IMPLIKASI, DAN REKOMENDASI

5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini, dapat diperoleh kesimpulan sebagai berikut:

1. Energi adsorpsi diperoleh dengan kalkulasi vc-relax terhadap struktur adsorben, adsorbat, dan sistem secara keseluruhan. Energi total yang diperoleh dari kalkulasi vc-relax kemudian disubstitusi ke dalam persamaan energi adsorpsi, yaitu persamaan 2.1. Sehingga, dapat diperoleh energi adsorpsi molekul gas etanol terhadap LGFO dan LGFO@ rGO yaitu -2.49 eV dan -2.75 eV.
2. Energi adsorpsi molekul gas etanol pada LGFO diperoleh -2.49 eV. Energi adsorpsi negatif menunjukkan bahwa molekul gas etanol dapat teradsorpsi pada LGFO. Selain itu, energi adsorpsi tersebut lebih dari 0.8 eV (setelah dimutlakkan) menunjukkan adsorpsi terjadi secara *chemisorption*. Dengan energi adsorpsi -2.49 eV juga molekul gas etanol akan lebih mudah teradsorpsi pada permukaan LGFO. Sehingga, LGFO memiliki sensitivitas dan potensi selektivitas yang baik.
3. Energi adsorpsi molekul gas etanol pada LGFO @ rGO diperoleh -2.75 eV. Energi adsorpsi tersebut (setelah dimutlakkan) lebih tinggi dibandingkan LGFO tanpa rGO sebesar 9.45%. Peningkatan energi adsorpsi tersebut menunjukkan efek adsorpsi yang lebih kuat pada LGFO @ rGO dibandingkan LGFO. Peningkatan energi adsorpsi tersebut juga menunjukkan peningkatan selektivitas material LGFO @ rGO terhadap molekul gas etanol. Sehingga LGFO @ rGO sangat potensial untuk aplikasi sensor gas etanol atau sebagai adsorben.

5.2 Implikasi

Pada penelitian ini dapat diperoleh informasi bahwa penambahan rGO dapat meningkatkan energi adsorpsi terhadap molekul gas etanol. Peningkatan tersebut dapat menunjukkan peningkatan sensitivitas dan selektivitas material LGFO @

rGO terhadap molekul gas etanol. Sehingga, hasil penelitian ini dapat menunjukkan kelayakan dan potensi material LGFO @ rGO sebagai material sensor gas etanol.

5.3 Rekomendasi

Penelitian terkait sensor gas etanol dengan material LFO dan rGO ini perlu dikaji lebih mendalam secara pemodelan dan komputasi untuk mendapatkan gambaran yang lebih mendekati eksperimen. Untuk itu terdapat beberapa hal yang dapat dilakukan dan direkomendasikan, sebagai berikut:

1. Melakukan optimasi (relaksasi) struktur pada setiap material yang akan digunakan dalam pemodelan dan komputasi.
2. Melakukan kalkulasi dan analisis terhadap sifat elektronik material sebelum dan setelah dipengaruhi molekul gas etanol, dengan cara menentukan *density of states* (rapat keadaan) dan *band gap* (celah pita energi) material.
3. Melakukan variasi fraksi *doping* pada LFO, untuk memperoleh fraksi *doping* yang optimal.
4. Melakukan variasi *doping* pada LFO maupun *couple doping* untuk meningkatkan sifat elektronik LFO sebagai material sensor gas.
5. Mempertimbangkan parameter temperatur dalam pemodelan dan komputasi untuk memperoleh informasi terkait temperatur kerja material.
6. Melakukan *doping* pada struktur rGO, beberapa penelitian menunjukkan bahwa menambahkan *doping* pada struktur rGO dapat menurunkan temperatur kerja sensor gas.