

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan mengenai adsorpsi H₂ pada permukaan oksida grafena (*graphene oxide*) dengan metode *density functional theory*, diperoleh kesimpulan berikut.

1. Telah berhasil ditentukan sifat elektronik dari material oksida grafena (*graphene oxide*) dengan menghitung nilai konduktivitas listrik menggunakan perhitungan *Boltztrap* didapatkan semakin tinggi temperatur yang diberi, maka semakin tinggi juga nilai konduktivitas yang dihasilkan. Kemudian juga sifat elektronik dapat dilihat dari perhitungan *band structure* dan didapatkan nilai band gapnya.
2. Telah berhasil ditentukan situs adsorpsi H₂ pada permukaan oksida grafena (*graphene oxide*) yang paling stabil adalah situs bridge C-C tegak lurus H₂.
3. Telah berhasil ditentukan mekanisme adsorpsi H₂ pada permukaan oksida grafena (*graphene oxide*) dengan nilai transfer muatan paling banyak berturut-turut terjadi pada situs *bridge* C-C tegak lurus H₂, *bridge* C-C sejajar H₂, dan *top* C sumbu X. Semakin besar transfer muatan, maka akan semakin kuat pula ikatan adsorbat dengan adsorbennya.

5.2 Saran

Untuk pengembangan penelitian lebih lanjut, disertakan beberapa saran berikut.

1. Perlu dilakukan relaksasi untuk struktur interaksi molekul H₂ dengan oksida grafena (*graphene oxide*).
2. Model molekul H₂ yang diinteraksikan dengan oksida grafena (*graphene oxide*) menggunakan lebih molekul H₂ bukan sebagai molekul tunggal.