

BAB V

PENUTUP

A. Kesimpulan

Adapun kesimpulan yang dapat diambil dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Hasil perhitungan simulasi komputasi DoS dan *Band Structure* dengan menggunakan prinsip pertama DFT (*software* QE) pada material MgB_2 dari hasil *database* dan sintesa (*wire* dan *bulk*), menunjukkan hasil sebagai berikut: grafik dengan *trend* yang sama, namun terdapat sedikit pergeseran yang dibuktikan dengan energi fermi ketiga data yang berbeda-beda, yaitu 7.664 eV pada *wire*, 7.813 eV pada *database*, dan 7.811 eV pada *bulk*. Pada pita valensi didominasi oleh atom B, sedangkan pada pita konduksi didominasi oleh atom Mg. Terlihat bahwa pada atom B terdapat elektron yang dapat menentukan sifat konduktivitas material MgB_2 . Struktur pita yang digunakan sepanjang titik simetri $\Gamma - M - K - \Gamma - A - L - H - A \mid L - M \mid K - H$ pada *Brillouin zone* sesuai dengan struktur kristal hexagonal.
2. Hasil perhitungan simulasi komputasi sifat termoelektrik, sifat listrik, dan sifat termal dengan menggunakan formula Boltzmann (*software* BoltzTraP) pada material MgB_2 dari hasil *database* dan sintesa (*wire* dan *bulk*), menunjukkan hasil sebagai berikut: Perbandingan koefisien seebeck, sifat konduktivitas listrik, dan konduktivitas termal antara *database* dengan data hasil sintesa pada material MgB_2 didapatkan analisa bahwa pada *database* memiliki sifat termoelektrik lebih kecil dengan nilai 0.1 pada suhu 150 K serta sifat konduktivitas listrik dan sifat konduktivitas termal yang tinggi dibanding data hasil sintesa

dengan nilai yang berurutan yaitu $1.18 \text{ 1}/\Omega\text{ms}$ pada suhu 30 K dan 2.09 W/mKs pada suhu 10 K. Sedangkan hasil data sintesa, *bulk* memiliki sifat termoelektrik dan sifat konduktivitas termal yang baik dibandingkan *wire* dengan nilai termoelektrik 0.43 pada suhu 150 K dan nilai konduktivitas termal 0.5 W/mKs pada suhu 20 K. Sedangkan, *wire* memiliki sifat konduktivitas listrik yang lebih baik dibandingkan *bulk* dengan nilai konduktivitas listrik $1.43 \text{ 1}/\Omega\text{ms}$ pada suhu 10 K.

B. Saran

Saran yang ingin penulis berikan untuk penelitian-penelitian selanjutnya, yaitu:

1. Dengan menggunakan metode komputasi kita dapat membuat mengetahui apakah meterial tersebut memiliki sifat konduktivitas termal dan konduktivitas listrik yang kuat atau tidak melalui simulasi komputasi. Sehingga pada saat melakukan eksperimen tidak banyak error yang terjadi, hal ini bisa menghemat waktu dan tenaga yang kita gunakan.

Pada saat melakukan *running* data pastikan *commant* yang dimasukan sudah sesuai agar tidak terjadi error.