

ABSTRAK

SIMULASI PENDETEKSIAN SINYAL SENSOR GAS NH₃ MENGUNAKAN Pt₈₀Au₁₄Ti₆ BERBASISKAN FUNGSI KERJA

Oleh

KURNIA RAHMAWATI

Telah dilakukan penelitian yang bertujuan membuat simulasi reaksi kimia dalam proses pendeteksian gas NH₃ pada permukaan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$). Hasil simulasi ini dibandingkan dengan hasil eksperimen Marjunus (2018) terkait sensor gas NH₃ pada bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆. Simulasi ini diawali dengan membuat Persamaan Diferensial Biasa (PDB) dari tiga reaksi yang mengandung empat hunian gas yaitu θ_{NH_3} , θ_{O} , θ_{NH_2} , dan θ_{OH} . PDB ini diselesaikan dengan program Matlab. Berdasarkan hasil eksperimen yang ada, dilakukan *fitting* grafik untuk sensor gas NH₃ pada bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆. *Fitting* ini perlu dilakukan untuk mengetahui keakuratan dari penyelesaian PDB yang dilakukan oleh Matlab. Rata-rata selisih antara hasil simulasi dan eksperimen pada setiap parameter yang memiliki nilai terkecil dijadikan sebagai nilai terbaik dari parameter tersebut. Proses pencarian nilai parameter dari selisih nilai simulasi dan eksperimen ini dinamakan optimasi parameter. Terdapat 36 parameter dalam simulasi ini yaitu 6 koefisien lengket awal, 12 koefisien Arrhenius, dan 18 energi aktivasi. Sebanyak 23 dari 36 parameter belum diketahui nilainya. Ke-23 nilai tersebut dioptimasi dengan diberikan nilai awal dan nilai-nilai parameter lainnya dibuat konstan. Setelah semua nilai ditemukan, dilakukan optimasi kedua. Selanjutnya, didapatkan grafik perbandingan simulasi dan penelitian dengan *trend* yang sama walaupun hasil *CPD* simulasi yang bernilai -115 mV tidak tepat sama dengan penelitian yaitu (-100±20) mV. Selain itu, dari simulasi juga didapatkan perkiraan *coverage* untuk atom/molekul dalam satuan Mono Layer (ML) pada permukaan Pt₈₀Au₁₄Ti₆, yaitu $\theta_{\text{NH}_3} = 1,152 \times 10^{-1}$ ML, $\theta_{\text{O}} = 1,27 \times 10^{-7}$ ML, $\theta_{\text{NH}_2} = 6,622 \times 10^{-5}$ ML, dan $\theta_{\text{OH}} = 6,622 \times 10^{-5}$ ML.

Kata kunci: *CPD*, sensor gas, amonia, simulasi, perubahan fungsi kerja.

ABSTRACT

SIMULATION OF NH₃ GAS SENSOR SIGNAL DETECTION USING Pt₈₀Au₁₄Ti₆ BASED ON WORK FUNCTION

By

KURNIA RAHMAWATI

Research has been carried out which aims to simulate chemical reactions in the process of detecting NH₃ gas on the surface of Pt₈₀Au₁₄Ti₆ based on the change in work function ($\Delta\phi$). The results of this simulation are compared with Marjunus experimental results (2018) related to the NH₃ gas sensor on Pt₈₀Au₁₄Ti₆ material. This simulation begins by constructing the Ordinary Differential Equation (ODE) of three reactions containing four gas occupancies namely θ_{NH_3} , θ_{O} , θ_{NH_2} , and θ_{OH} . This ODE is solved with the Matlab program. Based on the existing experimental results, a graphic fitting was carried out for the NH₃ gas sensor on Pt₈₀Au₁₄Ti₆ material. This fitting needs to be done to determine the accuracy of the ODE settlement performed by Matlab. The average difference between the simulation and experimental results for each parameter that has the smallest value is used as the best value of that parameter. The process of finding parameter values from the difference between simulation and experimental values is called parameter optimization. There are 36 parameters in this simulation, namely 6 initial sticking coefficients, 12 Arrhenius coefficients, and 18 activation energies. As many as 23 of the 36 parameters are unknown. The 23 values are optimized by being given an initial value and the other parameter values are kept constant. After all the values are found, the second optimization is performed. Furthermore, a comparison graph of the simulation and research was obtained with the same trend even though the simulated CPD results with a value of -115 mV were not exactly the same as the research, namely (-100 ± 20) mV. In addition, from the simulation, the estimated coverage for atoms/molecules in Mono Layer (ML) units on the surface of Pt₈₀Au₁₄Ti₆ is also obtained, namely $\theta_{\text{NH}_3} = 1,152 \times 10^{-1}$ ML, $\theta_{\text{O}} = 1,27 \times 10^{-7}$ ML, $\theta_{\text{NH}_2} = 6,622 \times 10^{-5}$ ML, and $\theta_{\text{OH}} = 6,622 \times 10^{-5}$ ML.

Keywords: CPD, gas sensor, ammonia, simulation, changes in work function.