

**SIMULASI PENDETEKSIAN SINYAL SENSOR GAS NH₃
MENGUNAKAN Pt₈₀Au₁₄Ti₆ BERBASISKAN FUNGSI KERJA**

(Skripsi)

**Oleh
KURNIA RAHMAWATI**



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2023**

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.

**SIMULASI PENDETEKSIAN SINYAL SENSOR GAS NH₃
MENGUNAKAN Pt₈₀Au₁₄Ti₆ BERBASISKAN FUNGSI KERJA**

Oleh

KURNIA RAHMAWATI

Skripsi

**Sebagai Salah Satu Syarat untuk Mencapai Gelar
SARJANA SAINS**

Pada

**Jurusan Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG**

2023

Judul Skripsi : **SIMULASI PENDETEKSIAN SINYAL
SENSOR GAS NH₃ MENGGUNAKAN
PT₈₀AU₁₄TI₆ BERBASISKAN FUNGSI
KERJA**

Nama Mahasiswa : Kurnia Rahmawati

Nomor Pokok Mahasiswa : 1917041003

Jurusan : Fisika

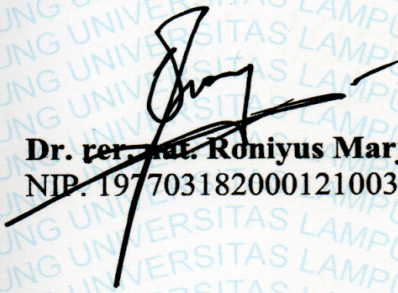
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

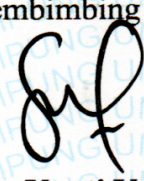


1. Komisi Pembimbing


Pembimbing I

Pembimbing II


Dr. rer. nat. Roniyus Marjunus, M.Si.
NIP. 197703182000121003


Dr. Yanti Yulianti, M.Si.
NIP. 197512192000122003

2. Ketua Jurusan Fisika FMIPA


Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T.
NIP. 198010102005011002

MENGESAHKAN

1. Tim Penguji

Ketua : **Dr. rer. nat. Roniyus Marjunus, M.Si.**

Sekretaris : **Dr. Yanti Yulianti, M.Si.**

Penguji
Bukan Pembimbing: **Dra. Dwi Asmi, M.Si., Ph.D.**



2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



Dr. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si.
NIP. 197110012005011002

Tanggal Lulus Ujian Skripsi : **26 Juli 2023**

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah dilakukan orang lain dan sepengetahuan saya tidak ada karya atau pendapat yang ditulis atau diterbitkan oleh orang lain kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini sebagaimana disebutkan dalam daftar pustaka. Selain itu, saya menyatakan bahwa skripsi ini dibuat oleh saya sendiri.

Apabila ada pernyataan yang tidak benar, maka saya bersedia dikenai sanksi sesuai dengan hukum yang berlaku.

Bandar Lampung, 26 Juli 2023



Kurnia Rahmawati
NPM. 1917041003

RIWAYAT HIDUP



Penulis dilahirkan di Kota Metro, pada 25 Agustus 2001 sebagai anak pertama dari pasangan Bapak Gunawan dan Ibu Hendriyana. Penulis memulai pendidikan di Taman Kanak-Kanak Perwanida, Kota Metro tahun 2006-2007 kemudian melanjutkan pendidikan di SD Negeri 1 Metro Pusat tahun 2007-2013. Penulis menempuh pendidikan sekolah menengah pertama di SMP Negeri 1 Kota Metro tahun 2013-2016 kemudian melanjutkan pendidikan di SMA Negeri 2 Pringsewu pada tahun 2016-2019. Selama menempuh pendidikan sekolah menengah atas, penulis aktif mengikuti kegiatan Jurnalistik dan Olimpiade Komputasi.

Penulis terdaftar sebagai mahasiswa Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung melalui jalur Seleksi Nasional Masuk Perguruan Tinggi Negeri (SNMPTN) pada tahun 2019. Selama menjadi mahasiswa, penulis aktif sebagai pengurus organisasi Himpunan Mahasiswa Fisika (Himafi) pada bidang SAINTEK tahun 2019 – 2022. Selain aktif dalam berbagai kepanitian kegiatan Himafi, penulis juga pernah menjadi asisten praktikum Fisika Dasar, Pemrograman Komputer, dan Fisika Komputasi. Penulis menempuh kegiatan Praktik Kerja Lapangan (PKL) di PT Perkebunan Nusantara VII, Bekri, Lampung Tengah pada awal tahun 2022. Dalam bidang kepenulisan ilmiah, penulis memiliki pengalaman menulis laporan PKL dengan judul “Analisis Kehilangan Minyak Pada Pengolahan Minyak Kelapa Sawit Kasar / *Crude Palm Oil* (CPO) Di Pabrik Kelapa Sawit PTPN VII Bekri Lampung Tengah”.

MOTTO

“Hatiku tenang karena mengetahui bahwa apa yang melewatkanmu tidak akan pernah menjadi takdirmu, dan apa yang ditakdirkan untukmu tidak akan pernah melewatkanmu”

(Umar bin Khattab)

“Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai dengan kesanggupannya”

(QS. Al-Baqarah: 286)

“Nasib memang diserahkan kepada manusia untuk digarap, tetapi takdir harus ditandatangani di atas materai dan tidak boleh digugat kalau nanti terjadi apa-apa, baik atau buruk.”

(Prof. Dr. Sapardi Djoko Damono)

“Perbanyak bersyukur, kurangi mengeluh. Buka mata, jembarkan telinga, perluas hati. Sadari kamu ada pada sekarang, bukan kemarin atau besok, nikmati setiap momen dalam hidup, berpetualanglah.”

(Ayu Estiningtyas)

PERSEMBAHAN

Dengan penuh rasa syukur kepada Allah Subhanahu wa ta'ala, karya ini dipersembahkan kepada:

Kedua Orang Tuaku

Bapak Gunawan & Ibu Hendriyana

Terima kasih untuk segala do'a, dukungan, dan usaha yang selalu diberikan demi kesuksesan putrinya hingga mampu menyelesaikan pendidikan di tingkat Universitas sebagai Sarjana Fisika

Tak lupa untuk adikku tersayang...

Aulia Izzatunnisa & Naura Alysa Azzahra

Semoga kalian dapat mengambil kebaikan-kebaikan yang terdapat dalam penulisan skripsi ini.

Keluarga Besar & Teman-teman

Terima kasih atas segala dukungan yang telah diberikan sehingga dapat tetap bertahan dalam keadaan suka maupun duka.

Almamater Tercinta

UNIVERSITAS LAMPUNG

KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Allah Yang Maha Esa, yang telah memberikan kemudahan, kelancaran dan berkat karunia-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul **“Simulasi Pendeteksian Sinyal Sensor Gas NH₃ Menggunakan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ Berbasis Fungsi Kerja”**. Skripsi ini ditulis sebagai syarat untuk meraih gelar Sarjana Sains (S.Si) pada bidang Fisika Material Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan skripsi ini masih banyak kekurangan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritikan dan saran yang membangun sebagai bahan perbaikan di masa mendatang. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat dan menjadi literatur serta rujukan bagi penelitian-penelitian berikutnya.

Bandar Lampung, 26 Juli 2023
Penulis,

Kurnia Rahmawati

SANWACANA

Puji syukur kehadirat Allah SWT. yang telah memberikan nikmat sehat serta karuniaNya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“Simulasi Pendeteksian Sinyal Sensor Gas NH₃ Menggunakan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ Berbasis Fungsi Kerja”**. Penulisan skripsi ini dapat diselesaikan karena penulis menerima banyak bantuan baik secara langsung ataupun tidak langsung. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis akan menyampaikan terima kasih kepada pihak-pihak yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan skripsi ini antara lain:

1. Ayah dan Ibu, atas doa dan usaha yang tidak pernah lelah diberikan hingga penulis mampu menyelesaikan pendidikan di Universitas Lampung;
2. Bapak Dr. rer. nat. Roniyus Marjunus, M.Si. selaku Dosen Pembimbing I yang telah memberikan bimbingan, arahan, saran, cerita, wejangan, dan motivasinya selama proses penelitian dan penulisan skripsi;
3. Ibu Dr. Yanti Yulianti, M.Si. selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan bimbingan, bantuan, dan masukannya selama proses penelitian, penulisan skripsi serta pembuatan artikel untuk dipublikasi di Jurnal Internasional;
4. Ibu Dra. Dwi Asmi, M.Si., Ph.D. selaku Dosen Pembahas yang telah memberikan banyak saran positif yang telah diberikan untuk penulisan skripsi ini agar lebih baik lagi;
5. Bapak Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T. selaku Ketua Jurusan Fisika.
6. Bapak Arif Surtono, S.Si., M.Si., M.Eng. selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan bimbingan, arahan, dan sarannya selama penulis menempuh kuliah;

7. Bapak dan Ibu dosen Jurusan Fisika atas ilmu yang telah diberikan selama penulis menempuh bangku perkuliahan, baik ilmu akademik maupun non akademik
8. Bapak Dr. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si. selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam;
9. Staf jurusan Fisika (Pak Badri, Pak Edi, dan Teh Amnah) yang telah membantu dalam keseharian di jurusan Fisika.
10. Teman seperjuangan semasa kuliah dan skripsi: Aryu Kusmita, Ajeng Rianti Dewi, Mela Retnosari, Sohwatunnisa, dan Cerly Dwi Anggraini. Terima kasih atas dukungannya sehingga penulis bias menyelesaikan tugas akhir ini.
11. Teman-teman KKN: Rahmat Wahyudi, Lisana Shidqin 'Aliya, Intan Permatasari, Haposan L.H. Sihombing, M. Faris Fakhza, dan Yudha Setiawan. Terima kasih telah memberikan semangat sehingga penulis bisa menyelesaikan tugas akhir ini.

Akhir kata, penulis haturkan do'a dan panjatkan rasa syukur kepada Allah SWT, semoga Allah SWT memberikan imbalan yang berlipat atas bantuan semua pihak yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan skripsi ini dan semoga Allah SWT selalu memudahkan langkah kita dalam menuju kebaikan.

Bandar Lampung, 26 Juli 2023
Penulis,

Kurnia Rahmawati

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	i
ABSTRAK	ii
ABSTRACT	iii
HALAMAN JUDUL	iv
LEMBAR PERSETUJUAN	v
LEMBAR PENGESAHAN	vi
HALAMAN PERNYATAAN	vii
RIWAYAT HIDUP	viii
MOTTO	ix
PERSEMBAHAN	x
KATA PENGANTAR	xi
SANWACANA	xii
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR SIMBOL	xviii
DAFTAR GAMBAR	xxi
DAFTAR TABEL	xxx
I. PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3

1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Gas Amonia	5
2.2 Sensor Gas Amonia.....	6
2.3 Fungsi Kerja (ϕ).....	9
2.4 Interaksi Gas dengan Permukaan Bahan.....	10
2.4.1 Adsorpsi	10
2.4.2 Reaksi.....	12
2.4.3 Disosiasi.....	13
2.4.4 Desorpsi	13
2.5 Reaksi dalam Proses Pendeteksian Gas NH ₃	13
2.6 Pendeteksian Gas NH ₃ pada Bahan Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆	17

III. METODE PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	20
3.2 Alat dan Bahan.....	20
3.3 Prosedur Penelitian	20
3.3.1 Penyusunan Persamaan Differensial Biasa (PDB).....	20
3.3.2 Formulasi Persamaan Hasil Eksperimen.....	20
3.3.3 Optimasi Parameter	21
3.3.4 Optimasi Ulang Parameter	23
3.3.5 Simulasi Akhir	24
3.4 Diagram Alir Penelitian	25

IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Penyusunan Persamaan Differensial Biasa.....	29
4.2 <i>Fitting</i> Persamaan Garis Hasil Penelitian Marjunus (2018)	30
4.3 Optimasi Parameter.....	33
4.3.1 Energi Adsorpsi NH ₃ pada Bahan Pt (E_{fPt}).....	33
4.3.2 Energi Desorpsi NH ₃ pada Bahan Pt (E_{rPt}).....	35
4.3.3 Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Pt (ν_{f3Pt}).....	38
4.3.4 Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Pt (ν_{r3Pt}).....	40
4.3.5 Energi Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Pt (E_{f3Pt})	43
4.3.6 Energi Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Pt (E_{r3Pt})	46
4.3.7 Koefisien Lengket Awal NH ₃ pada Bahan Au (S_{01Au}).....	48
4.3.8 Koefisien Arrhenius Desorpsi NH ₃ pada Bahan Au (ν_{r1Au})	51
4.3.9 Energi Adsorpsi NH ₃ pada Bahan Au (E_{f1Au})	53
4.3.10 Energi Desorpsi NH ₃ pada Bahan Au (E_{r1Au})	56
4.3.11 Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Au (ν_{f3Au}).....	58
4.3.12 Energi Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Au (E_{f3Au}).....	60
4.3.13 Energi Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Au (E_{r3Au}).....	63

4.3.14	Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Au (ν_{f3Au}).....	66
4.3.15	Koefisien Lengket Awal NH ₃ pada Bahan Ti (S_{01Ti})	68
4.3.16	Koefisien Arrhenius Desorpsi NH ₃ pada Bahan Ti (ν_{f1Ti})	71
4.3.17	Energi Adsorpsi NH ₃ pada Bahan Ti (E_{f1Ti})	74
4.3.18	Energi Desorpsi NH ₃ pada Bahan Au (E_{r1Ti})	77
4.3.19	Koefisien Arrhenius Desorpsi O pada Bahan Ti (ν_{f2Ti}).....	80
4.3.20	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Ti (ν_{f3Ti})	82
4.3.21	Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Ti (ν_{r3Ti})	85
4.3.22	Energi Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Ti (E_{f3Ti}).....	88
4.3.23	Energi Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Ti (E_{r3Ti}).....	90
4.4	Optimasi Ulang Parameter	95
4.4.1	Energi Adsorpsi NH ₃ pada Bahan Pt (E_{f1Pt}).....	95
4.4.2	Energi Desorpsi NH ₃ pada Bahan Pt (E_{r1Pt})	96
4.4.3	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Pt (ν_{f3Pt}).....	98
4.4.4	Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Pt (ν_{r3Pt}).....	100
4.4.5	Energi Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Pt (E_{f3Pt})	102
4.4.6	Energi Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Pt (E_{r3Pt})	104
4.4.7	Koefisien Lengket Awal NH ₃ pada Bahan Au (S_{01Au})	106
4.4.8	Koefisien Arrhenius Desorpsi NH ₃ pada Bahan Au (ν_{f1Au})	107
4.4.9	Energi Adsorpsi NH ₃ pada Bahan Au (E_{f1Au})	108
4.4.10	Energi Desorpsi NH ₃ pada Bahan Au (E_{r1Au})	110
4.4.11	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Au (ν_{f3Au}).....	111
4.4.12	Energi Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Au (E_{f3Au}).....	112
4.4.13	Energi Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Au (E_{r3Au}).....	114
4.4.14	Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Au (ν_{r3Au}).....	116
4.4.15	Koefisien Lengket Awal NH ₃ pada Bahan Ti (S_{01Ti})	117
4.4.16	Koefisien Arrhenius Desorpsi NH ₃ pada Bahan Ti (ν_{f1Ti})	118
4.4.17	Energi Adsorpsi NH ₃ pada Bahan Ti (E_{f1Ti})	119
4.4.18	Energi Desorpsi NH ₃ pada Bahan Au (E_{r1Ti})	121
4.4.19	Koefisien Arrhenius Desorpsi O pada Bahan Ti (ν_{f2Ti}).....	123
4.4.20	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Ti (ν_{f3Ti})	125
4.4.21	Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Ti (ν_{r3Ti})	126
4.4.22	Energi Reaksi Maju NH ₃ dan O pada Bahan Ti (E_{f3Ti}).....	127
4.4.23	Energi Reaksi Balik NH ₂ dan OH pada Bahan Ti (E_{r3Ti}).....	129
4.5	Simulasi Akhir	132

V. SIMPULAN DAN SARAN

5.1	Simpulan	138
-----	----------------	-----

5.2 Saran	139
-----------------	-----

DAFTAR PUSTAKA

LAMPIRAN

DAFTAR SIMBOL

Simbol	Deskripsi	Satuan
CPD	<i>Contact Potential Difference</i>	V
E_F	Tingkat energi Fermi	eV
E_a	Energi adsorpsi	eV
E_{diss}	Energi disosiasi	eV
E_d	Energi desorpsi	eV
E_{vac}	Energi vakum	eV
E_{f1Au}	Energi adsorpsi NH ₃ pada bahan Au	eV
E_{f1Pt}	Energi adsorpsi NH ₃ pada bahan Pt	eV
E_{f1Ti}	Energi adsorpsi NH ₃ pada bahan Ti	eV
E_{f3Au}	Energi reaksi maju NH ₃ dan O pada bahan Au	eV
E_{f3Pt}	Energi reaksi maju NH ₃ dan O pada bahan Pt	eV
E_{f3Ti}	Energi reaksi maju NH ₃ dan O pada bahan Ti	eV
E_{r1Au}	Energi desorpsi NH ₃ pada bahan Au	eV
E_{r1Pt}	Energi desorpsi NH ₃ pada bahan Pt	eV
E_{r1Ti}	Energi desorpsi NH ₃ pada bahan Au	eV
E_{r3Au}	Energi reaksi balik NH ₂ dan OH pada bahan Au	eV
E_{r3Pt}	Energi reaksi balik NH ₂ dan OH pada bahan Pt	eV
E_{r3Ti}	Energi reaksi balik NH ₂ dan OH pada bahan Ti	eV
E_R	Energi aktivasi reaksi antara atom/molekul gas A dan B	eV
F	Fluks molekul yang datang ke permukaan bahan	molekul.m ⁻² .s ⁻¹
F_X	Faktor adsorbansi untuk gas X	-
M	Massa dari molekul	Kg
N_{ads}	Jumlah atom atau molekul yang teradsorpsi Permukaan	atom atau molekul
P	Tekanan parsial gas	Pa
RH	Kelembaban relative	%
S	Probabilitas lengket	-
S_0	Koefisien lengket awal	-
S_{01Au}	Koefisien lengket awal NH ₃ pada bahan Au	-
S_{01Ti}	Koefisien lengket awal NH ₃ pada bahan Ti	-
T	Temperatur	K
$\Delta\phi$	Perubahan fungsi kerja	eV

Simbol	Deskripsi	Satuan
ϕ	Fungsi kerja	eV
$\phi_{\text{NH}_2\text{-Au}}$	Fungsi kerja Au sebagai fungsi hunian NH_2 (θ_{NH_2})	eV
$\phi_{\text{NH}_2\text{-Pt}}$	Fungsi kerja Pt sebagai fungsi hunian NH_2 (θ_{NH_2})	eV
$\phi_{\text{NH}_2\text{-Ti}}$	Fungsi kerja Ti sebagai fungsi hunian NH_2 (θ_{NH_2})	eV
$\phi_{\text{NH}_3\text{-Au}}$	Fungsi kerja Au sebagai fungsi hunian NH_3 (θ_{NH_3})	eV
$\phi_{\text{NH}_3\text{-Pt}}$	Fungsi kerja Pt sebagai fungsi hunian NH_3 (θ_{NH_3})	eV
$\phi_{\text{NH}_3\text{-Ti}}$	Fungsi kerja Ti sebagai fungsi hunian NH_3 (θ_{NH_3})	eV
$\phi_{\text{O-Au}}$	Fungsi kerja Au sebagai fungsi hunian O (θ_{O})	eV
$\phi_{\text{O-Pt}}$	Fungsi kerja Pt sebagai fungsi hunian O (θ_{O})	eV
$\phi_{\text{O-Ti}}$	Fungsi kerja Ti sebagai fungsi hunian O (θ_{O})	eV
$\phi_{\text{OH-Au}}$	Fungsi kerja Au sebagai fungsi hunian OH (θ_{OH})	eV
$\phi_{\text{OH-Pt}}$	Fungsi kerja Pt sebagai fungsi hunian OH (θ_{OH})	eV
$\phi_{\text{OH-Ti}}$	Fungsi kerja Ti sebagai fungsi hunian OH (θ_{OH})	eV
θ	Hunian gas pada lapisan sensitif Permukaan	ML
θ_{NH_3}	Hunian NH_3 pada permukaan bahan	ML
θ_{O}	Hunian O pada permukaan bahan	ML
θ_{NH_2}	Hunian NH_2 pada permukaan bahan	ML
θ_{OH}	Hunian OH pada permukaan bahan	ML
σ	Kepadatan permukaan atom pada lapisan sensitif permukaan	atom/m ²
u_{diss}	Faktor pra-eksponensial/koeffisien Arrhenius yang menentukan frekuensi disosiasi AB	disosiasi/s
u_{f3Au}	Koeffisien Arrhenius reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Au	s ⁻¹
u_{f3Pt}	Koeffisien Arrhenius reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Pt	s ⁻¹
u_{f3Ti}	Koeffisien Arrhenius reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Ti	s ⁻¹
u_{r1Au}	Koeffisien Arrhenius desorpsi NH_3 pada bahan Au	s ⁻¹
u_{r1Ti}	Koeffisien Arrhenius desorpsi NH_3 pada bahan Ti	s ⁻¹

Simbol	Deskripsi	Satuan
u_{r2Ti}	Koefisien Arrhenius desorpsi O pada bahan Ti	s^{-1}
u_{r3Au}	Koefisien Arrhenius reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Au	s^{-1}
u_{r3Pt}	Koefisien Arrhenius reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Pt	s^{-1}
u_{r3Ti}	Koefisien Arrhenius reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Ti	s^{-1}
u_r	Faktor pra-eksponensial/koefisien Arrhenius yang menentukan frekuensi reaksi A dan B	reaksi/s
u_d	Faktor pra-eksponensial/koefisien Arrhenius yang menentukan frekuensi desorpsi	desorpsi/s
r_a	Tingkat perubahan hunian gas pada permukaan dalam proses adsorpsi	atom/s atau molekul/s
r_f	Laju adsorpsi Reaksi	s^{-1}
$r_{f,r}$	Laju reaksi untuk reaksi maju/mundur	s^{-1}
T	Waktu	S
Z	Faktor 1 untuk gas tidak terdisosiasi dan 2 untuk gas terdisosiasi	-

DAFTAR GAMBAR

		Halaman
Gambar 2.1	Diagram perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$) pada permukaan bahan, (a) terpapar gas pengoksidasi, (b) tidak terpapar gas, dan (c) terpapar gas pereduksi	9
Gambar 2.2	<i>CPD</i> dari bahan Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆ terhadap 50 ppm pada temperatur ruangan 30°C	18
Gambar 3.1	Diagram alir optimasi parameter.....	26
Gambar 3.2	Diagram alir optimasi ulang parameter.....	27
Gambar 3.3	Diagram alir simulasi akhir penelitian	28
Gambar 4.1	<i>Fitting</i> kurva terhadap grafik eksperimen Marjunus (2018).....	31
Gambar 4.2	Grafik optimasi parameter E_{f1Pt} pada <i>range</i> energi 0-10eV dengan lebar partisi 1 eV.....	34
Gambar 4.3	Grafik optimasi parameter E_{f1Pt} pada <i>range</i> energi 0-10eV dengan lebar partisi 0,1 eV.....	34
Gambar 4.4	Grafik optimasi parameter E_{f1Pt} pada <i>range</i> energi 0-1eV dengan lebar partisi 0,01 eV	35
Gambar 4.5	Grafik optimasi parameter E_{r1Pt} pada <i>range</i> energi 0-10eV dengan lebar partisi 1 eV.....	36
Gambar 4.6	Grafik optimasi parameter E_{r1Pt} pada <i>range</i> energi 0-10eV dengan lebar partisi 0,1 eV.....	36
Gambar 4.7	Grafik optimasi parameter E_{r1Pt} pada <i>range</i> energi 0-1eV dengan lebar partisi 0,01 eV	37
Gambar 4.8	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{r1Pt} pada <i>range</i> energi 0-1eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	37

Gambar 4.9	Grafik optimasi parameter ν_{f3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{15} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{14} s^{-1}	38
Gambar 4.10	Grafik optimasi parameter ν_{f3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{15} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{13} s^{-1}	39
Gambar 4.11	Grafik optimasi parameter ν_{f3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{15} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$	39
Gambar 4.12	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{f3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{15} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$	40
Gambar 4.13	Grafik optimasi parameter ν_{r3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{15} s^{-1}	41
Gambar 4.14	Grafik optimasi parameter ν_{r3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{14} s^{-1}	41
Gambar 4.15	Grafik optimasi parameter ν_{r3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$	42
Gambar 4.16	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{r3Pt} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$	43
Gambar 4.17	Grafik optimasi parameter E_{f3Pt} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi 1 eV	44
Gambar 4.18	Grafik optimasi parameter E_{f3Pt} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,1 \text{ eV}$	44
Gambar 4.19	Grafik optimasi parameter E_{f3Pt} pada <i>range</i> energi $0-1 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,01 \text{ eV}$	45
Gambar 4.20	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{f3Pt} pada <i>range</i> energi $0-1 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,01 \text{ eV}$	45
Gambar 4.21	Grafik optimasi parameter E_{r3Pt} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi 1 eV	46
Gambar 4.22	Grafik optimasi parameter E_{r3Pt} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,1 \text{ eV}$	47
Gambar 4.23	Grafik optimasi parameter E_{r3Pt} pada <i>range</i> energi $0-1 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,02 \text{ eV}$	47
Gambar 4.24	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{r3Pt} pada <i>range</i> energi $0-1 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,01 \text{ eV}$	48

Gambar 4.25	Grafik optimasi parameter S_{01Au} pada <i>range</i> nilai 0-10 dengan lebar partisi 1	49
Gambar 4.26	Grafik optimasi parameter S_{01Au} pada <i>range</i> nilai 0-10 dengan lebar partisi 0,1	49
Gambar 4.27	Grafik optimasi parameter S_{01Au} pada <i>range</i> nilai 0-1 dengan lebar partisi 0,01	50
Gambar 4.28	Perbesaran grafik optimasi parameter S_{01Au} pada <i>range</i> nilai 0-1 dengan lebar partisi 0,01	51
Gambar 4.29	Grafik optimasi parameter ν_{r1Au} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{14} s^{-1} dengan lebar partisi 10^{13} s^{-1}	51
Gambar 4.30	Grafik optimasi parameter ν_{r1Au} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{14} s^{-1} dengan lebar partisi 10^{12} s^{-1}	52
Gambar 4.31	Grafik optimasi parameter ν_{r1Au} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{14} s^{-1} dengan lebar partisi $5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$	53
Gambar 4.32	Grafik optimasi parameter E_{f1Au} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 1 eV	53
Gambar 4.33	Grafik optimasi parameter E_{f1Au} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,1 eV	54
Gambar 4.34	Grafik optimasi parameter E_{f1Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	55
Gambar 4.35	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{f1Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	55
Gambar 4.36	Grafik optimasi parameter E_{r1Au} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 1 eV	56
Gambar 4.37	Grafik optimasi parameter E_{r1Au} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,1 eV	57
Gambar 4.38	Grafik optimasi parameter E_{r1Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.	57
Gambar 4.39	Grafik optimasi parameter ν_{f3Au} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{16} s^{-1} dengan lebar partisi 10^{15} s^{-1}	58
Gambar 4.40	Grafik optimasi parameter ν_{f3Au} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{16} s^{-1} dengan lebar partisi 10^{14} s^{-1}	59

Gambar 4.41	Grafik optimasi parameter ν_{f3Au} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	59
Gambar 4.42	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{f3Au} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	60
Gambar 4.43	Grafik optimasi parameter E_{f3Au} pada <i>range</i> energi $0-10 eV$ dengan lebar partisi $1 eV$	61
Gambar 4.44	Grafik optimasi parameter E_{f3Au} pada <i>range</i> energi $0-10 eV$ dengan lebar partisi $0,1 eV$	61
Gambar 4.45	Grafik optimasi parameter E_{f3Au} pada <i>range</i> energi $0-1 eV$ dengan lebar partisi $0,01 eV$	62
Gambar 4.46	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{f3Au} pada <i>range</i> energi $0-1 eV$ dengan lebar partisi $0,01 eV$	63
Gambar 4.47	Grafik optimasi parameter E_{r3Au} pada <i>range</i> energi $0-10 eV$ dengan lebar partisi $1 eV$	63
Gambar 4.48	Grafik optimasi parameter E_{r3Au} pada <i>range</i> energi $0-10 eV$ dengan lebar partisi $0,1 eV$	64
Gambar 4.49	Grafik optimasi parameter E_{r3Au} pada <i>range</i> energi $0-10 eV$ dengan lebar partisi $0,05 eV$	65
Gambar 4.50	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{r3Au} pada <i>range</i> energi $0-10 eV$ dengan lebar partisi $0,05 eV$	65
Gambar 4.51	Grafik optimasi parameter ν_{r3Au} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $10^{15} s^{-1}$	66
Gambar 4.52	Grafik optimasi parameter ν_{r3Au} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $10^{14} s^{-1}$	67
Gambar 4.53	Grafik optimasi parameter ν_{r3Au} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	67
Gambar 4.54	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{r3Au} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	68
Gambar 4.55	Grafik optimasi parameter S_{01Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10$ dengan lebar partisi 1	69
Gambar 4.56	Grafik optimasi parameter S_{01Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10$ dengan lebar partisi $0,1$	69

Gambar 4.57	Grafik optimasi parameter S_{01Ti} pada <i>range</i> nilai 0-1 dengan lebar partisi 0,01	70
Gambar 4.58	Perbesaran grafik optimasi parameter S_{01Ti} pada <i>range</i> nilai 0-1 dengan lebar partisi 0,01	71
Gambar 4.59	Grafik optimasi parameter ν_{11Ti} pada <i>range</i> nilai 0- 10^8 s ⁻¹ dengan lebar partisi 10^7 s ⁻¹	72
Gambar 4.60	Grafik optimasi parameter ν_{11Ti} pada <i>range</i> nilai 0- 10^8 s ⁻¹ dengan lebar partisi 10^6 s ⁻¹	72
Gambar 4.61	Grafik optimasi parameter ν_{11Ti} pada <i>range</i> nilai 0- 10^8 s ⁻¹ dengan lebar partisi 5×10^5 s ⁻¹	73
Gambar 4.62	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{11Ti} pada <i>range</i> nilai 0 - 10^8 s ⁻¹ dengan lebar partisi 5×10^5 s ⁻¹	74
Gambar 4.63	Grafik optimasi parameter E_{f1Ti} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 1 eV	74
Gambar 4.64	Grafik optimasi parameter E_{f1Ti} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,1 eV	75
Gambar 4.65	Grafik optimasi parameter E_{f1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	76
Gambar 4.66	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{f1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	77
Gambar 4.67	Grafik optimasi parameter E_{r1Ti} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 1 eV	77
Gambar 4.68	Grafik optimasi parameter E_{r1Ti} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,1 eV	78
Gambar 4.69	Grafik optimasi parameter E_{r1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	79
Gambar 4.70	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{r1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	79
Gambar 4.71	Grafik optimasi parameter ν_{22Ti} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{15} s ⁻¹ dengan lebar partisi 10^{14} s ⁻¹	80
Gambar 4.72	Grafik optimasi parameter ν_{22Ti} pada <i>range</i> nilai 0- 10^{15} s ⁻¹ dengan lebar partisi 10^{13} s ⁻¹	81

Gambar 4.73	Grafik optimasi parameter ν_{f2Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{15} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$	81
Gambar 4.74	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{f2Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{15} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$	82
Gambar 4.75	Grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{15} s^{-1}	83
Gambar 4.76	Grafik optimasi parameter ν pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{14} s^{-1}	83
Gambar 4.77	Grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$	84
Gambar 4.78	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$	85
Gambar 4.79	Grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{15} s^{-1}	85
Gambar 4.80	Grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi 10^{14} s^{-1}	86
Gambar 4.81	Grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$	87
Gambar 4.82	Perbesaran grafik optimasi parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> nilai $0-10^{16} \text{ s}^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$	87
Gambar 4.83	Grafik optimasi parameter E_{f3Ti} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi 1 eV	88
Gambar 4.84	Grafik optimasi parameter E_{f3Ti} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,1 \text{ eV}$	89
Gambar 4.85	Grafik optimasi parameter E_{f3Ti} pada <i>range</i> energi $0-1 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,01 \text{ eV}$	89
Gambar 4.86	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{f3Ti} pada <i>range</i> energi $0-1 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,01 \text{ eV}$	90
Gambar 4.87	Grafik optimasi parameter E_{r3Ti} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi 1 eV	91
Gambar 4.88	Grafik optimasi parameter E_{r3Ti} pada <i>range</i> energi $0-10 \text{ eV}$ dengan lebar partisi $0,1 \text{ eV}$	91

Gambar 4.89	Grafik optimasi parameter E_{r3Ti} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,05 eV	92
Gambar 4.90	Grafik optimasi parameter E_{r3Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	93
Gambar 4.91	Perbesaran grafik optimasi parameter E_{r3Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	93
Gambar 4.92	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f1Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	96
Gambar 4.93	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r1Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	97
Gambar 4.94	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r1Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	98
Gambar 4.95	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{f3Pt} pada <i>range</i> 0 - $10^{15} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} s^{-1}$	99
Gambar 4.96	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{f3Pt} pada <i>range</i> 0 - $10^{15} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} s^{-1}$	100
Gambar 4.97	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{r3Pt} pada <i>range</i> 0 - $10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	101
Gambar 4.98	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{r3Pt} pada <i>range</i> 0 - $10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	102
Gambar 4.99	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f3Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	103
Gambar 4.100	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f3Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	104
Gambar 4.101	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r3Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,02 eV.....	105
Gambar 4.102	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r3Pt} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,02 eV	106

Gambar 4.103	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter S_{01Au} pada <i>range</i> 0 - 1 dengan lebar partisi 0,01	107
Gambar 4.104	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{f1Au} pada <i>range</i> 0 - $10^{14} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{11} s^{-1}$	108
Gambar 4.105	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f1Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	109
Gambar 4.106	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f1Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	110
Gambar 4.107	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r1Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	111
Gambar 4.108	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{f3Au} pada <i>range</i> 0 - $10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	112
Gambar 4.109	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f3Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	113
Gambar 4.110	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f3Au} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	114
Gambar 4.111	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r3Au} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,05 eV.....	115
Gambar 4.112	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r3Au} pada <i>range</i> energi 0-10 eV dengan lebar partisi 0,05 eV	116
Gambar 4.113	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{r3Au} pada <i>range</i> 0 - $10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	117
Gambar 4.114	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter S_{01Ti} pada <i>range</i> 0 - 1 dengan lebar partisi 0,01	118
Gambar 4.115	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{f1Ti} pada <i>range</i> 0 - $10^8 s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^5 s^{-1}$	119
Gambar 4.116	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	120
Gambar 4.117	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	121

Gambar 4.118	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	122
Gambar 4.119	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r1Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	123
Gambar 4.120	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{t2Ti} pada <i>range</i> $0 - 10^{15} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} s^{-1}$	124
Gambar 4.121	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{t2Ti} pada <i>range</i> $0 - 10^{15} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{12} s^{-1}$	125
Gambar 4.122	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{f3Ti} pada <i>range</i> $0 - 10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	126
Gambar 4.123	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter ν_{r3Ti} pada <i>range</i> $0 - 10^{16} s^{-1}$ dengan lebar partisi $5 \times 10^{13} s^{-1}$	127
Gambar 4.124	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f3Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	128
Gambar 4.125	Perbesaran grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{f3Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV	129
Gambar 4.126	Grafik perbandingan optimasi awal dan ulang parameter E_{r3Ti} pada <i>range</i> energi 0-1 eV dengan lebar partisi 0,01 eV.....	130
Gambar 4.127	Grafik perbandingan <i>CPD</i> eksperimen Marjunus (2018), <i>fitting</i> kurva Marjunus (2018), dan hasil simulasi pada bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$	133
Gambar 4.128	Grafik hunian gas NH_3 (θ_{NH_3}) pada permukaan bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$	134
Gambar 4.129	Grafik hunian atom O (θ_O) pada permukaan bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$	135
Gambar 4.130	Grafik hunian gas NH_2 (θ_{NH_2}) pada permukaan bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$	136
Gambar 4.131	Grafik hunian gas OH (θ_{OH}) pada permukaan bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$	136

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 2.1 Data efek kesehatan dari ammonia.....	5
Tabel 2.2 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Pt.....	15
Tabel 2.3 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Au	16
Tabel 2.4 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Ti	17
Tabel 3.1 Parameter yang dioptimasi	22
Tabel 4.1 Persamaan garis hasil <i>fitting</i> penelitian Marjunus (2018).....	31
Tabel 4.2 Nilai parameter setelah optimasi awal.....	94
Tabel 4.3 Nilai akhir 23 parameter setelah optimasi awal dan optimasi ulang....	131
Tabel 4.4 Nilai terbaik semua parameter yang digunakan pada simulasi akhir ...	132

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Amonia merupakan senyawa kimia dengan rumus NH_3 yang mewakili indeks pencemaran udara dalam bentuk bau. Gas amonia tidak berwarna, berbau menyengat, biasanya amonia yang dihasilkan oleh aktivitas mikroba, amonia industri, pengolahan air limbah dan pengolahan batubara. Amonia di atmosfer bereaksi dengan nitrat dan sulfat membentuk garam amonium yang sangat korosif (Yuwono, 2010). Amonia dihasilkan dari siklus nitrogen sampah organik yang diurai oleh mikroorganisme dan kandungan bakteri yang biasa terdapat pada sampah yaitu bakteri heterotrof. Bakteri heterotrof merupakan bakteri yang memanfaatkan sampah organik atau sisa-sisa organisme sebagai sumber energi, termasuk bakteri nitrit (*Nitrosococcus*), bakteri nitrifikasi (*Nitrobacter*) dan spesies jenis *Clostridium* di samping organisasi pembusuk utama, yang memiliki peran dalam memecah asam amino dalam protein organisme (Lestari, 2010).

Udara yang terkontaminasi amonia dapat menyebabkan masalah pernapasan. Amonia tidak berwarna tetapi memiliki bau yang menyengat dan bersifat korosif dan sangat beracun bahkan pada konsentrasi rendah. Gas amonia pada 0,003 ppm dapat tercium. Kehadiran amonia juga memiliki risiko iritasi kulit manusia dan selaput lendir serta dapat menyebabkan kesulitan bernapas. Jika terkena amonia dalam konsentrasi tinggi, dapat menyebabkan luka bakar pada kulit, mata, tenggorokan atau paru-paru. Sedangkan efek kronis pada konsentrasi >35 ppm dapat menyebabkan kerusakan ginjal, kerusakan paru-paru, penurunan perkembangan dan disfungsi otak, serta penurunan nilai darah yang mengganggu proses fisiologis manusia (Puspita, 2014).

Resiko dari penggunaan NH_3 tersebut dapat diminimalisir apabila ada sensor yang mampu mendeteksi kebocoran gas tersebut, yaitu dengan sensor gas. Sensor gas merupakan salah satu sensor kimia yang terdiri dari transduser dan lapisan aktif yang digunakan untuk mengubah informasi kimia yang didapat menjadi signal elektronik seperti perubahan arus, frekuensi, dan tegangan (Yunusa dkk., 2014). Kemampuan dari sensor gas bergantung pada beberapa parameter seperti sensitivitas, selektivitas, batas deteksi, waktu respon dan waktu *recovery*. Terdapat 2 jenis tipe sensor gas, yaitu sensor gas berbasis perubahan fungsi kerja dan berbasis resistivitas (Gu dkk., 2012). Salah satu tipe sensor yang sering dipakai adalah sensor gas berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$), contohnya *Floating Gate Field Effect Transistor* (FGFET) (Korotcenkov, 2013). Sensor tersebut menggunakan *Field Effect Transistor* (FET) sebagai transduser untuk mengukur perubahan fungsi kerja dan mengubahnya menjadi sinyal listrik (Widanarto, 2007). Dalam fisika zat padat, fungsi kerja (ϕ , dalam eV) merupakan energi minimum yang diperlukan untuk memindahkan elektron dari logam atau semikonduktor (Senft dkk., 2011). Penelitian ini mengacu pada hasil eksperimen tentang sensor gas ammonia pada bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ (Marjunus, 2018), hasil simulasi sensor gas hidrogen pada bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ (Marjunus dkk., 2022), dan hasil simulasi sensor gas ammonia pada bahan ZnO (Susanto, 2020).

Dalam penelitian tentang sensor NH_3 menggunakan sejumlah reaksi antara gas dengan permukaan bahan. Pada setiap reaksinya, terdapat 3 parameter, yaitu *sticking coefficient* (koefisien lengket), koefisien Arrhenius, dan energi aktivasi. Akan tetapi referensi untuk nilai parameter pada bahan-bahan tertentu sangatlah minim, sehingga diperlukan suatu penelitian terkait proses optimasi untuk mendapatkan nilai dari parameter-parameter tersebut (Senft dkk., 2012).

Penelitian lebih lanjut tentang metode deteksi gas NH_3 perlu dilakukan untuk lebih memahami interaksi, reaksi, dan perilaku sensor gas yang terbuat dari bahan tertentu. Oleh karena itu, simulasi pendeteksian sinyal sensor gas NH_3 ini diperlukan untuk menerjemahkan proses penginderaan gas NH_3 ke dalam bahasa pemrograman yang lebih sederhana. Sebelum melakukan simulasi ini, beberapa hal yang diperlukan adalah mengetahui interaksi antara gas dan bahan serta nilai-

nilai dari parameter yang belum diketahui. Nilai akhir semua parameter yang telah dioptimasi disimulasikan menggunakan *software* Matlab untuk mendapatkan nilai hunian/*coverage* (θ), fungsi kerja total (ϕ_{Total}) dan *CPD*. Kemudian, nilai *CPD* hasil eksperimen dari hasil penelitian Marjunus (2018) dibandingkan dengan nilai *CPD* hasil simulasi. Pada penelitian ini, sensor gas yang digunakan pada saat proses simulasi adalah sensor gas NH_3 berbasis perubahan fungsi kerja dan material yang digunakan adalah $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$. Berdasarkan laporan Marjunus (2018), *CPD* untuk gas NH_3 (50 ppm) adalah (-100 ± 20) mV untuk sensor yang terbuat dari $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$. Belum ada simulasi terkait pendeteksian sinyal sensor gas NH_3 pada bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$ berdasarkan hasil survei literatur yang telah dilakukan. Oleh karena itu, pada penelitian ini dilakukan simulasi sinyal sensor gas NH_3 pada permukaan material $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dijelaskan, rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimanakah proses optimasi untuk mendapatkan nilai parameter-parameter pada reaksi pendeteksian gas NH_3 pada permukaan bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$?
2. Bagaimanakah perbandingan nilai *Contact Potential Different (CPD)* hasil eksperimen dengan simulasi?
3. Bagaimanakah *coverage* atau hunian (θ) atom atau molekul gas di permukaan bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Gas yang dideteksi pada penelitian ini adalah gas NH_3 pada bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$;
2. Menggunakan nilai *Contact Potential Different (CPD)* sebagai pembanding antara eksperimen dengan komputasi;
3. Menggunakan *software* Matlab dalam proses komputasi;

4. Hanya menggunakan 3 reaksi pada permukaan bahan, yaitu penyerapan NH_3 , penyerapan O_2 , serta reaksi penggabungan NH_3 dan O .

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dilakukannya penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Mengetahui proses optimasi dalam pencarian parameter pendeteksian gas NH_3 pada permukaan bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$;
2. Membandingkan *Contact Potential Different (CPD)* hasil simulasi dengan eksperimen;
3. Mengetahui *coverage* atau hunian (θ) atom atau molekul gas di permukaan bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$.

1.5 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi penting terkait nilai parameter-parameter dan model reaksi kimia pada simulasi pendeteksian gas NH_3 pada bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$. Hasil penelitian ini diharapkan bisa menjadi acuan dalam mekanisme pendeteksian sensor gas, sehingga nilai parameter-parameter dan model reaksi kimia yang diperoleh dapat mengembangkan penelitian-penelitian lebih lanjut dengan jenis gas dan material yang berbeda.

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Gas Amonia

Gas amonia merupakan gas yang tidak memiliki warna dan bau yang ditimbulkan sangat menyengat. Akibat paparan gas amonia dalam kadar yang cukup tinggi dapat menyebabkan batuk dan iritasi terhadap sistem pernapasan. Gas amonia (NH_3) di atmosfer terbentuk melalui siklus nitrogen. Jika di atmosfer terkandung amonia yang berlebihan akan berbahaya bagi manusia dan ekosistem. Batas ambang kadar amonia di udara hanya 25 ppm bagi manusia. Namun demikian, amonia banyak diproduksi dan dimanfaatkan di banyak industri kimia, medis, otomotif, serta pemantauan di peternakan.

Gas amonia dengan kadar yang sangat rendah menimbulkan bau yang tajam, khas dan sangat menyengat. Pada tingkat kadar sedang, gas amonia dapat mengiritasi mata dan saluran pernapasan. Sedangkan pada kadar tinggi, dapat menyebabkan ulkus kornea pada mata dan iritasi parah pada saluran pernafasan. Berikut tabel efek kesehatan yang ditimbulkan tiap kadar gas amonia.

Tabel 2.1 Data efek kesehatan dari amonia (Siswanti dan Suryonno, 2016).

Kadar (ppm)	Respon kesehatan
24 – 50	Iritasi mata dan saluran pernapasan atas setelah sepuluh menit paparan.
51 – 130	Iritasi hidung dan tenggorokan.
500 – 1720	Perubahan tingkat pernapasan dan timbul batuk.
2500 – 6500	Sesak napas dengan cepat, luka bakar (mata, wajah, dan mulut)
Di atas 10.000	Edema paru, berpotensi fatal akumulasi cairan di paru-paru dan kematian.

Amonia merupakan senyawa anorganik yang diperlukan sebagai sumber energi dalam proses nitrifikasi bakteri aerobik. Pada air, amonia berada dalam dua bentuk yaitu amonia tidak terionisasi dan amonia terionisasi. Amonia yang tidak terionisasi bersifat racun dan akan mengganggu syaraf pada ikan sedangkan amonia yang terionisasi memiliki kadar racun yang rendah. Daya racun amonia dalam air akan meningkat saat kelarutan oksigen rendah. Keberadaan bakteri pengurai sangat berpengaruh terhadap persediaan oksigen yang secara alami terlarut dalam air tambak (Komarawidjaja, 2003).

Amonia (NH_3) dan garam-garamnya merupakan senyawa yang bersifat mudah larut dalam air. Ion ammonium merupakan bentuk transisi dari amonia. Selain terdapat dalam bentuk gas, amonia juga dapat berbentuk kompleks dengan beberapa ion logam. Amonia banyak digunakan dalam proses produksi urea, industri bahan kimia, serta industri bubur kertas. Amonia yang terukur di perairan berupa amonia total (NH_3 dan NH_4^+). Amonia yang bebas tidak dapat terionisasi, sedangkan amonium (NH_4^+) dapat terionisasi (Effendi, 2003).

2.2 Sensor Gas Amonia

Deteksi amonia memainkan peran penting dalam pemantauan dan inspeksi lingkungan untuk mengamankan keselamatan publik. Lebih jauh lagi, deteksi amonia memiliki prospek yang baik dalam diagnosis medis. Misalnya, pemeriksaan amonia yang dihembuskan dapat digunakan untuk menganalisis kadar urea untuk pemantauan gangguan ginjal. Saat ini, bahan elemen penginderaan dari amonia komersial yang paling umum adalah sensor yang terdiri dari bahan polimer atau oksida logam semikonduktor.

Keterbatasan sensor ini meliputi: tinggi biaya, waktu hidup terbatas, suhu kerja tinggi, daya konsumsi tinggi, sensitivitas rendah, selektivitas buruk, dan tidak mencukupi pengulangan. Sebagai alternatif, graphene, dua dimensi setebal satu atom karbon nanomaterial memiliki sifat fisik yang sangat baik, telah banyak diteliti sebagai bahan untuk sensor gas amonia dalam dekade terakhir. Hal ini

terbukti menghasilkan kinerja yang sangat baik dalam hal sensitivitas, reversibilitas dan kerja suhu.

Sensor gas amonia berbasis graphene pertama dilaporkan oleh Grup Andre Geim menggunakan pembelahan mikromekanis dari grafit pada substrat silikon teroksidasi pada tahun 2007. Inisial respon ~4% pada paparan 1 ppm NH₃ pada suhu kamar diikuti oleh saturasi, dan sensor dapat pulih ke keadaan awal dengan anil pada 150°C dalam ruang hampa. Pada tahun 2009, penelitian tindak lanjut dilakukan oleh kelompok Johnson, yang menegaskan bahwa respon intrinsik graphene terhadap gas amonia, ternyata sangat kecil (~1%) bahkan pada paparan 1000 ppm NH₃.

Perhitungan pertama menunjukkan bahwa kontaminasi residu diperkenalkan dari proses nanolitografi konvensional bisa berperan penting dalam meningkatkan respon graphene. Hasil perhitungan itu menunjukkan bahwa ada ikatan yang lemah (~20 meV) dan transfer muatan (~0,027 e) antara NH₃ dan graphene. Penelitian yang disebutkan di atas mengilhami jalur untuk memfasilitasi penerapan graphene terhadap penginderaan gas melalui fungsionalisasi. Setelah itu, dimodifikasi secara kimia sensor amonia berbasis graphene menjadi terkenal, mengandung pengurangan sensor amonia berbasis *reduced graphene oxide* (rGO), rGO/partikel logam sensor amonia berbasis hibrida, rGO/sensor amonia hibrida oksida logam, hibrida rGO/polimer sensor amonia berbasis bahan, dan lain-lain.

Kisi atom sempurna asli dari graphene berpotensi untuk digunakan selama proses modifikasi kimia karena pembentukan ikatan kovalen memperkenalkan kelompok fungsional, yang sangat merusak sifat listrik intrinsik graphene. Selain itu, modifikasi kimia biasanya membutuhkan reaksi serta pemrosesan yang kompleks. Beberapa bekerja pada sensor amonia berbasis graphene murni dilaporkan juga, melibatkan amonia berbasis graphene yang disejajarkan secara vertical sensor dan deposit uap kimia (CVD) berbasis graphene sensor amonia. CVD dapat menghasilkan graphene berkualitas tinggi sementara itu datang bersama dengan beberapa kelemahan, misalnya, peralatan mahal dan canggih, produk sampingan gas beracun dan langkah transfer yang rumit, dan lain-lain. Yang disebutkan di

atas keterbatasan rGO atau CVD graphene sangat membatasi efisiensi aplikasi komersial sensor amonia berbasis grapheme (Huang dkk., 2021).

Dalam dekade terakhir, banyak sensor gas baru telah diusulkan, dikembangkan dan digunakan di berbagai bidang untuk aplikasi seperti industri, analisis lingkungan, dan produksi pertanian. Gas amonia (NH_3) adalah salah satu dari spesies gas berbahaya yang menarik perhatian dalam disiplin pengembangan sensor gas dan peneliti akademisi karena amonia adalah salah satu bahan kimia yang paling umum yang diproduksi dan digunakan di berbagai aplikasi, terutama untuk pupuk berbasis nitrogen, pembersihan produk dan produksi petrokimia. Gas amonia diklasifikasikan sebagai basa dan cukup korosif. Gas amonia adalah gas tidak berwarna dengan bau yang menyengat dan bisa berbentuk cair ketika gas dimasukkan di bawah tekanan yang cukup.

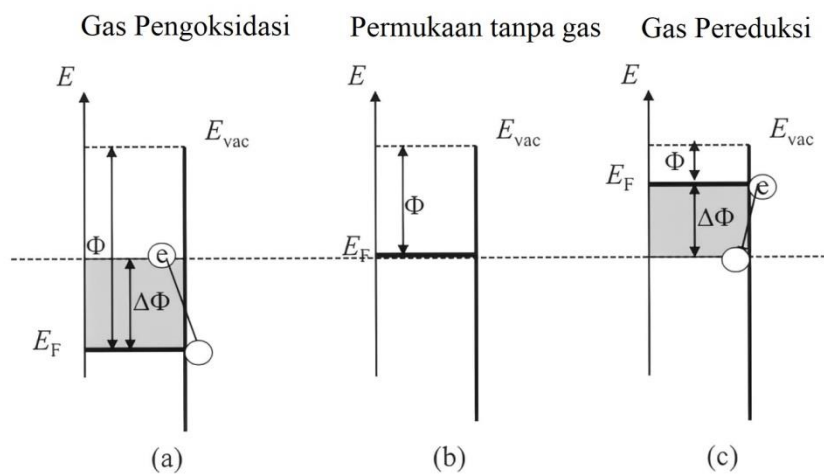
Menurut *Occupational Safety and Health Administration (OSHA)*, batas paparan NH_3 untuk manusia adalah 25 ppm selama 8 jam dan 35 ppm selama 10 menit. Tingkat khas gas NH_3 berada di tingkat ppb rendah (1-5 ppb). Namun, mengekspos dan menghirup lebih dari tingkat yang aman gas tersebut dapat menyebabkan gangguan kesehatan manusia seperti penyakit kulit, mata, dan paru-paru. Oleh karena itu, penting untuk mengembangkan sensor sensitif untuk deteksi gas amonia.

Saat ini, ada beberapa teknik untuk gas amonia: deteksi termasuk penginderaan elektrokimia, sensor berbasis oksida logam, dan sensor optik menggunakan laser dioda yang dapat disetel spektroskopi. Masayasu dkk, punya mengembangkan sensor gas amonia optik menggunakan resonator cincin mikro silikon yang dilapisi oleh graphene. Mereka telah mendeteksi konsentrasi gas menggunakan resonator cincin mikro dengan pergeseran panjang gelombang resonansi (Hashwan dkk., 2021).

2.3 Fungsi Kerja (ϕ)

Dalam fisika zat padat, fungsi kerja (ϕ , dalam eV) merupakan energi minimum yang diperlukan untuk memindahkan elektron dari logam atau semikonduktor. Fungsi kerja (ϕ) juga didefinisikan sebagai selisih antara energi Fermi electron (E_F , dalam eV) dengan energi vakum (E_{vac} , dalam eV), seperti ditunjukkan pada Gambar 2.1 dan Persamaan (2.1) (Senft dkk., 2011).

$$\Phi = E_F - E_{vac}. \quad (2.1)$$



Gambar 2.1 Diagram perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$) pada permukaan bahan, (a) terpapar gas pengoksidasi, (b) tidak terpapar gas, dan (c) terpapar gas pereduksi (Senft dkk., 2011).

Apabila sebuah gas pengoksidasi mendekati bahan, gas tersebut akan mengambil beberapa elektron, yang berakibat berkurangnya energi Fermi. Sesuai dengan Persamaan (2.1), ketika tingkat energi Fermi berkurang maka fungsi kerja suatu bahan akan meningkat seperti Gambar 2.1(a). Keadaan berbalik terjadi apabila gas pereduksi mendekati permukaan dari bahan seperti pada Gambar 2.1(c). Jika pada permukaan bahan diberikan suatu gas, maka fungsi kerja bahan (ϕ dalam eV) akan berubah seperti ditunjukkan pada Persamaan (2.2).

$$\Delta\phi = E_F^{\text{setelah}} - E_F^{\text{sebelum}}. \quad (2.2)$$

Nilai fungsi kerja (ϕ) bahan yang berubah karena datangnya gas dapat dikonversi menjadi *CPD* (*Contact Potential Difference*) sebagai sinyal sensornya.

Pengukuran *CPD* sering digunakan karena merupakan salah satu metode paling sederhana dalam penentuan fungsi kerja bahan (Novikov dan Timoshenkov, 2003). Hubungan fungsi kerja dengan *CPD* dituliskan pada Persamaan (2.3) (Vilitis dkk., 2016),

$$CPD = \frac{\Delta\phi}{|e|}, \quad (2.3)$$

dengan $\Delta\phi$ adalah nilai perubahan fungsi kerja bahan terhadap gas yang datang dan e merupakan muatan elektron.

2.4 Interaksi Gas dengan Permukaan Bahan

Ketika suatu gas datang ke permukaan bahan, maka akan terjadi beberapa reaksi antara gas dengan permukaan bahan tersebut. Reaksi antara gas dengan permukaan bahan tersebut dapat dijelaskan sebagai berikut:

2.4.1 Adsorpsi

Adsorpsi merupakan suatu peristiwa dimana molekul-molekul dari suatu senyawa terikat oleh permukaan zat padat. Molekul-molekul pada zat padat atau zat cair mempunyai gaya dalam keadaan tidak seimbang dimana gaya kohesi cenderung lebih besar daripada gaya adhesi. Ketidaksetimbangan gaya-gaya tersebut menyebabkan zat padat atau zat cair tersebut cenderung menarik zat-zat lain atau gas yang bersentuhan pada permukaannya. Fenomena konsentrasi zat pada permukaan padatan atau cairan disebut fasa teradsorb atau adsorbat, sedangkan zat yang menyerap atau menariknya disebut adsorben. Proses adsorpsi pada suatu adsorben terutama terjadi pada pori-pori kecilnya (*micropore*). Sementara itu, *macropore* hanya berperan sebagai tempat transfer adsorbat dari permukaan luar ke *micropore* (Ding dan Bhatia, 2003).

Dalam adsorpsi gas, jumlah molekul yang teradsorpsi pada permukaan padatan bergantung pada kondisi dalam fasa gas. Jumlah molekul adsorbat yang teradsorpsi pada permukaan tersebut akan meningkat dengan kenaikan tekanan dan temperatur. Ketika ketebalan dari fasa yang teradsorpsi pada permukaan padatan

sama dengan diameter molekul adsorbat, maka adsorpsi dikatakan membentuk monolayer. Setelah terbentuknya monolayer ini, maka peningkatan tekanan akan menghasilkan multilayer (Sudibandriyo, 2003).

Berdasarkan interaksi molekular antara permukaan adsorben dengan adsorbat, adsorpsi dibagi menjadi dua bagian, yaitu adsorpsi fisika dan adsorpsi kimia. Adsorpsi fisika merupakan bentuk yang paling umum dari adsorpsi. Adsorpsi ini terjadi karena terjadi gaya Van der Waals yaitu gaya tarik-menarik yang relatif lemah terjadi antara adsorbat dengan permukaan adsorben. Pada adsorpsi fisika, adsorbat tidak terikat kuat pada permukaan adsorben sehingga adsorbat dapat bergerak dari suatu bagian permukaan ke bagian permukaan lainnya, dan dapat diganti oleh adsorbat lainnya. Sedangkan adsorpsi kimia merupakan adsorpsi yang terjadi karena terbentuknya ikatan kovalen dan ion antara molekul-molekul adsorbat dengan adsorben. Karena ikatan yang terbentuk merupakan ikatan yang kuat maka lapisan yang terbentuk adalah lapisan monolayer. Untuk adsorpsi kimia, yang paling penting adalah spesifikasi dan kepastian pembentukan monolayer. Pendekatannya adalah dengan menentukan kondisi reaksi, sehingga hanya adsorpsi kimia dan hanya terbentuk monolayer (Othmer, 1994).

Jumlah gas yang berada di permukaan bahan akan berubah per satuan waktu. Untuk menghitung banyaknya gas yang diserap per satuan waktu (r_a dalam atom/detik atau molekul/detik) dapat menggunakan Persamaan (2.4) (Nix, 2014),

$$r_a = \frac{dN_{\text{ads}}}{dt}, \quad (2.4)$$

dengan N_{ads} adalah jumlah atom atau molekul yang diserap pada permukaan yang dapat dihitung menggunakan Persamaan (2.5),

$$N_{\text{ads}} = \sigma\theta, \quad (2.5)$$

dengan σ adalah rapat atom permukaan dari bahan (dalam atom/m²) dan θ adalah hunian (*coverage*) gas pada permukaan bahan (dalam mono layer atau ML). Nilai r_a juga tergantung pada fluks molekul yang datang ke permukaan bahan (F , dalam

molekul. $\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$) yang disebut dengan Hukum Hertz-Knudsen seperti pada Persamaan (2.6) (Yan dan Xu, 2010),

$$F = \frac{P}{\sqrt{2\pi mkT}}, \quad (2.6)$$

dengan P adalah tekanan parsial dari gas (dalam Pa), m adalah massa dari molekul gas (dalam kg), k adalah konstanta Boltzmann = $1,38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ dan T adalah suhu (dalam K). Probabilitas lengket (S) ditunjukkan pada Persamaan (2.7),

$$S = S_0(1 - \theta)^z \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (2.7)$$

dengan S_0 adalah koefisien lengket awal atau ketika hunian gas masih nol dan z bernilai 1 untuk gas yang tidak terdisosiasi dan 2 untuk gas yang terdisosiasi. Jika Persamaan (2.4) - (2.7) digabungkan, akan diperoleh nilai perubahan hunian gas pada suatu permukaan dalam proses adsorpsi seperti pada Persamaan (2.8) (Marjunus, 2018),

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{S_0(1 - \theta)^z}{\sigma\sqrt{2\pi mkT}} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right). \quad (2.8)$$

2.4.2 Reaksi

Ketika suatu atom molekul A dan B diserap, maka gas A akan bereaksi dengan atom atau molekul yang diserap dari gas B pada permukaan menjadi molekul AB. Berdasarkan mekanisme Langmuir-Hinshelwood, nilai perubahan hunian AB dapat dihitung dengan Persamaan (2.9) (Somorjai dan Li, 2010),

$$\frac{d\theta_{AB}}{dt} = \nu_r \exp\left(-\frac{E_r}{kT}\right) \theta_A \theta_B, \quad (2.9)$$

dengan ν_r adalah koefisien Arrhenius atau dikenal juga dengan istilah frekuensi reaksi A dan B (dalam reaksi/detik). E_r adalah energi aktivasi dari reaksi antara atom atau molekul gas A dan B (dalam eV), θ_A dan θ_B sebagai nilai hunian dari gas A dan B.

2.4.3 Disosiasi

Jika suatu gas diserap misalnya gas AB, maka gas tersebut akan terpisah menjadi gas A dan B. Peristiwa pemisahan molekul gas menjadi bentuk semula ini dinamakan disosiasi. Pada proses disosiasi ini nilai hunian gas A dapat dihitung menggunakan Persamaan (2.10),

$$\frac{d\theta_A}{dt} = \nu_{\text{diss}} \exp\left(-\frac{E_{\text{diss}}}{kT}\right) \theta_{\text{AB}}, \quad (2.10)$$

dengan ν_{diss} adalah koefisien Arrhenius atau frekuensi disosiasi AB (dalam disosiasi/detik), E_{diss} adalah energi aktivasi dari disosiasi gas AB (dalam eV) dan θ_{AB} adalah hunian molekul gas AB.

2.4.4 Desorpsi

Penyerapan bersifat reversibel (dapat balik). Molekul gas yang diserap oleh permukaan akan dilepaskan kembali dari permukaan. Peristiwa pelepasan gas dari permukaan bahan disebut dengan desorpsi. Desorpsi dapat terjadi apabila molekul gas diberikan energi yang disebut dengan energi desorpsi (E_d dalam eV). Ketika proses desorpsi terjadi, nilai perubahan hunian atom atau molekul di atas permukaan sampel dapat dihitung menggunakan Persamaan (2.11) (Senft, 2009),

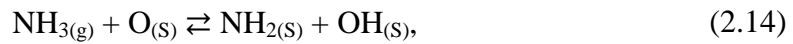
$$\frac{d\theta}{dt} = \nu_d \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right) \theta, \quad (2.11)$$

dengan ν_d adalah koefisien Arrhenius atau frekuensi desorpsi (dalam desorpsi/detik).

2.5 Reaksi dalam Proses Pendeteksian Gas NH₃

Berdasarkan studi literatur yang telah dilakukan, diperoleh beberapa model reaksi terkait pendeteksian gas NH₃. Appari dkk., (2011) melaporkan bahwa gas NH₃ dapat terserap oleh permukaan bahan dan dapat kembali dilepaskan ke udara sebagaimana terdapat pada Persamaan (2.12). Callaghan's (2006) menyatakan bahwa gas O₂, dapat duduk di permukaan bahan dan mengalami reaksi seperti ditunjukkan pada Persamaan (2.13). Erdtman dkk., (2017) menyatakan bahwa gas

NH₃ di permukaan bahan dapat bereaksi dengan gas O di permukaan bahan sebagaimana ditunjukkan pada Persamaan (2.14),



dengan simbol (g) mewakili fase gas dan simbol (S) mewakili permukaan bahan atau fase adsorpsi gas. Reaksi Persamaan (2.12) - (2.14) merupakan reaksi akan digunakan untuk melakukan simulasi pada penelitian ini. Ketiga reaksi yang digunakan (persamaan 2.12. – 2.14.) memiliki nilai parameter-parameter selama proses pendeteksian yaitu koefisien Arrhenius, koefisien lengket (*sticking coefficient*) dan energi aktivasi.

Tabel 2.2 menunjukkan data nilai parameter-parameter yang terdapat pada reaksi gas dengan permukaan Pt. Pada reaksi NH₃ dengan platinum, gas tersebut memiliki nilai koefisien lengket 0,75 (Guthrie et al., 1981). Sedangkan nilai koefisien Arrhenius pada reaksi NH₃ dengan platinum adalah sebesar $0,46 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ (Slot et al., 2020). Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju dan mundur pada reaksi hidrogen dengan platinum berturut-turut adalah sebesar 0,13 eV dan 0,91 eV (Callaghan, 2006). Pada reaksi oksigen dengan platinum, gas tersebut memiliki nilai koefisien lengket $0,07 \times (300/T)$ dan nilai koefisien Arrhenius $8,0515 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ (Behrendt, 1999). Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju adalah 0,53 eV (Matsuda dan Harada, 2005) sedangkan untuk reaksi mundur dibutuhkan $2,20966 - 0,622\theta_{\text{O}}$ eV (Behrendt, 1999). Pada permukaan platinum, ternyata dapat juga terjadi reaksi pembentukan uap air dengan nilai koefisien Arrhenius pada reaksi maju adalah sebesar $7,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ (Marjunus dkk., 2022) sedangkan untuk reaksi mundur sebesar $3,1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (Picolin dkk., 2009). Sedangkan energi aktivasi yang dibutuhkan untuk reaksi maju adalah sebesar 0,42 eV dan untuk reaksi mundurnya sebesar 0,68 eV (Michaelides dan Hu, 2001).

Tabel 2.2 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Pt (Marjunus dkk., 2022).

No	S ₀ dan koefisien Arrhenius (s ⁻¹)		Energi aktivasi (eV)	
	Reaksi maju (<i>forward</i>)	Reaksi mundur (<i>reverse</i>)	Reaksi maju (<i>forward</i>)	Reaksi mundur (<i>reverse</i>)
1	S _{01Pt} = 0,75	ν _{r1Pt} = 4,6×10 ¹²	E _{f1Pt} = 0,13	E _{r1Pt} = 0,91
2	S _{02Pt} = 0,07×(300/T)	ν _{r2Pt} = 8,0515×10 ¹²	E _{f2Pt} = 0,53	E _{r2Pt} = 2,20966-0,622θ _O
3	ν _{f3Pt} = 7,5×10 ¹⁴	ν _{r3Pt} = 3,1×10 ¹⁵	E _{f3Pt} = 0,42	E _{r3Pt} = 0,68

Tabel 2.3 menunjukkan data nilai parameter-parameter yang terdapat pada reaksi gas dengan permukaan Au. Penelitian yang dilakukan Winkler (1998) tentang interaksi molekul dan atom hidrogen dengan beberapa permukaan bahan menunjukkan nilai koefisien lengket awal dari hidrogen dengan Au sebesar 0,5 dan memiliki koefisien Arrhenius $1,0 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ (Pan dkk., 2013). Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju dan mundur hidrogen dengan Au menurut Callaghan dkk. (2006) berturut-turut adalah sebesar 0,16 eV dan 0,68 eV. Pada reaksi oksigen dengan permukaan Au didapatkan nilai koefisien lengketnya 0,005 (Linsmeier dan Wanner, 2000) dan koefisien Arrhenius sebesar $1,0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ (Gottfried dkk., 2002). Energi aktivasi yang dibutuhkan untuk reaksi maju dan mundur oksigen pada permukaan Au berturut-turut adalah sebesar 2,17 eV (Chester dan Somorjai, 1975) dan 1,6 eV (Canning dkk., 1984). Nilai koefisien Arrhenius pada reaksi pembentukan H₂O-nya pada reaksi maju adalah sebesar $9,85 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ dan untuk reaksi mundur sebesar $3,25 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (Marjunus dkk., 2022). Sedangkan energi aktivasi yang dibutuhkan untuk reaksi maju adalah sebesar 0,92 eV dan untuk desorpsi H₂O diperlukan energi 2,3 eV (Liu, 2013).

Tabel 2.3 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Au (Marjunus dkk., 2022).

No	S ₀ dan koefisien Arrhenius (s ⁻¹)		Energi aktivasi (eV)	
	Reaksi maju (<i>forward</i>)	Reaksi mundur (<i>reverse</i>)	Reaksi maju (<i>forward</i>)	Reaksi mundur (<i>reverse</i>)
1	S _{01Au} = 0,5	ν _{r1Au} = 1,0×10 ¹³	E _{f1Au} = 0,16	E _{r1Au} = 0,68
2	S _{02Au} = 0,005	ν _{r2Au} = 1,0×10 ¹¹	E _{f2Au} = 2,17	E _{r2Au} = 1,6
3	ν _{f3Au} = 9,85×10 ¹⁵	ν _{r3Au} = 3,25×10 ¹⁵	E _{f3Au} = 0,92	E _{r3Au} = 2,3

Tabel 2.4 menunjukkan data nilai parameter-parameter yang terdapat pada reaksi gas dengan permukaan Ti. Penelitian dari Kasemo dan Tornqvist (1979) tentang interaksi hidrogen pada lapisan Ti menunjukkan nilai dari parameter koefisien lengket awal (S₀) dari H₂ pada bahan tersebut sebesar 0,17 dan koefisien Arrhenius sebesar 2,1×10⁷ s⁻¹ (Wei dkk., 2004). Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju H₂ pada Ti adalah 0,5 eV (Iniguez dkk., 2007) sedangkan energi aktivasi untuk reaksi mundurnya adalah 0,51 eV (Wang dkk., 2016). Koval dkk. (2015), melaporkan bahwa nilai koefisien lengket dari O₂ pada Ti sebesar 0,62 sedangkan nilai koefisien Arrheniusnya 7,11×10¹⁴ s⁻¹ (Marjunus dkk., 2022). Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju O₂ pada Ti adalah 1,15 eV (Niemeyer dkk., 2002) sedangkan energi aktivasi untuk reaksi mundurnya adalah 0,152 eV (He dkk., 2014). Nilai koefisien Arrhenius pada reaksi antara O dan H pada permukaan bahan Ti pada reaksi maju adalah sebesar 3,425×10¹⁵ s⁻¹ dan untuk reaksi mundur sebesar 2,725×10¹⁵ s⁻¹ (Marjunus dkk., 2022). Sedangkan energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju dan mundurnya berturut-turut adalah sebesar 1,09 eV dan 1,10 eV (Wang dkk., 2016).

Tabel 2.4 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Ti (Marjunus dkk., 2022).

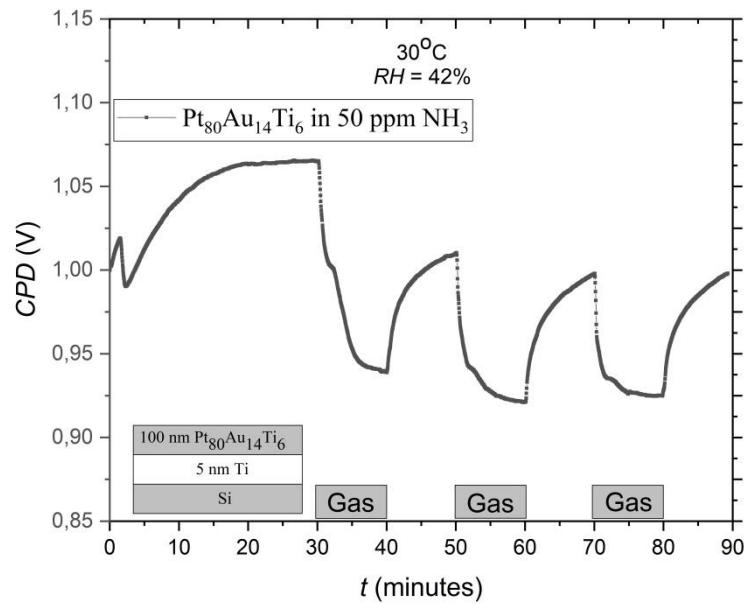
No	S_0 dan koefisien Arrhenius (s^{-1})		Energi aktivasi (eV)	
	Reaksi maju (<i>forward</i>)	Reaksi mundur (<i>reverse</i>)	Reaksi maju (<i>forward</i>)	Reaksi mundur (<i>reverse</i>)
1	$S_{01Ti} = 0,17$	$\nu_{r1Ti} = 2,1 \times 10^7$	$E_{f1Ti} = 0,5$	$E_{r1Ti} = 0,51$
2	$S_{02Ti} = 0,62$	$\nu_{r2Ti} = 7,11 \times 10^{14}$	$E_{f2Ti} = 1,15$	$E_{r2Ti} = 0,152$
3	$\nu_{f3Ti} = 3,425 \times 10^{15}$	$\nu_{r3Ti} = 2,725 \times 10^{15}$	$E_{f3Ti} = 1,09$	$E_{r3Ti} = 1,10$

Umumnya, terkait simulasi reaksi gas dalam hal pendeteksian gas pada perubahan fungsi kerja seperti yang telah dilakukan oleh Senft dkk., (2011), Simon (2015) dan Marjunus (2018) terdapat nilai hunian (θ) pada permukaan bahan. Akan tetapi, dari hasil studi literatur yang telah dilakukan tidak didapatkan data untuk hunian (θ) pada gas NH_3 , NH_2 , dan OH pada fungsi kerja bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$. Sehingga, akan diusulkan berupa nilai fungsi kerja (ϕ) $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$ yang berbanding lurus dengan nilai θ_{NH_3} , θ_{NH_2} , dan θ_{OH} yang akan dipaparkan pada Bab 3.

2.6 Pendeteksian Gas NH_3 pada Bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$

Kadar gas NH_3 pada suatu tempat yang memiliki kandungan gas NH_3 tinggi seperti pada industri kimia harus terus dipantau. Agar kadar gas NH_3 tidak melebihi ambang batas yang ditentukan, diperlukan alat berupa sensor untuk mendeteksi keberadaannya. Sensor merupakan perangkat yang berguna sebagai monitoring, controlling dan proteksi. Sensor yang baik harus memiliki stabilitas, sensitivitas dan respon kerja yang baik (Chang dkk., 2002).

Marjunus (2018) melaporkan tentang hasil pendeteksian gas pada bahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$, yaitu NH_3 (50 ppm). Hasil *CPD* dari proses ini adalah (-100 ± 20) mV untuk 50 ppm NH_3 . Grafik *CPD* terhadap waktu ditunjukkan pada Gambar 2.2.



Gambar 2.2 CPD dari bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ terhadap 50 ppm pada temperatur ruangan 30°C (Marjunus, 2018).

Pada Gambar 2.2 dapat dilihat pengujian yang dilakukan pada gas yaitu NH_3 . Pendeteksian gas NH_3 dilakukan selama 90 menit pada suhu 30°C . Diawali dengan pemberian atmosfer (*synthetic air*) selama 30 menit. Kemudian diberikan gas NH_3 sebanyak 50 ppm selama 10 menit dan diakhiri dengan pemberhentian gas NH_3 selama 10 menit pula. Selama proses tersebut, diperoleh nilai CPD sebesar (-100 ± 20) mV.

Nilai fungsi kerja (ϕ) pada suatu bahan bergantung pada nilai hunian/*coverage* (θ) dari gas. Fungsi kerja (ϕ) pada bahan Pt dituliskan pada Persamaan (2.15) dan (2.16) (Derry dan Ross, 1985).

$$\phi_{\text{O-Pt}} = 2,663\theta_{\text{O}} \text{ eV, jika } \theta_{\text{O}} < 0,0086 \text{ ML.} \quad (2.15)$$

$$\phi_{\text{O-Pt}} = (0,577\theta_{\text{O}} + 0,184) \text{ eV, jika } \theta_{\text{O}} \geq 0,0086 \text{ ML.} \quad (2.16)$$

Pada penelitian Gottfried (2003) tentang penyerapan dan reaksi gas oksigen, karbon monoksida, serta karbon dioksida pada Au, fungsi kerja (ϕ) bahan Au terhadap oksigen diformulasikan pada Persamaan (2.17).

$$\phi_{O-Au} = \left(\frac{1,7 \times 10^{19} \times 3,3 \times 10^{-30} \theta_O}{8,85 \times 10^{12} (1 + 9 \times 1,5 \times 10^{-24}) (1,7 \times 10^{19} \theta_O)^{1,5}} \right) \text{eV}. \quad (2.17)$$

Pada bahan Ti, formula fungsi kerja (ϕ) Ti terhadap O ditunjukkan pada Persamaan (2.18) (Jonker dkk., 1981),

$$\phi_{O-Ti} = (0,586\theta_O - 0,0415) \text{eV}, \quad (2.18)$$

karena nilai fungsi kerja dari ϕ_{NH_3-Pt} , ϕ_{NH_2-Pt} , ϕ_{OH-Pt} , ϕ_{NH_3-Au} , ϕ_{NH_2-Au} , ϕ_{OH-Au} , ϕ_{NH_3-Ti} , ϕ_{NH_2-Ti} , dan ϕ_{OH-Ti} tidak didapatkan, maka nilai dari fungsi kerjanya dibuat sama dengan nilai hunian/*coverage* (θ) seperti yang ditunjukkan Persamaan (2.19) – (2.27).

$$\phi_{NH_3-Pt} = \theta_{NH_3-Pt} \text{eV}. \quad (2.19)$$

$$\phi_{NH_2-Pt} = \theta_{NH_2-Pt} \text{eV}. \quad (2.20)$$

$$\phi_{OH-Pt} = \theta_{OH-Pt} \text{eV}. \quad (2.21)$$

$$\phi_{NH_3-Au} = \theta_{NH_3-Au} \text{eV}. \quad (2.22)$$

$$\phi_{NH_2-Au} = \theta_{NH_2-Au} \text{eV}. \quad (2.23)$$

$$\phi_{OH-Au} = \theta_{OH-Au} \text{eV}. \quad (2.24)$$

$$\phi_{NH_3-Ti} = \theta_{NH_3-Ti} \text{eV}. \quad (2.25)$$

$$\phi_{NH_2-Ti} = \theta_{NH_2-Ti} \text{eV}. \quad (2.26)$$

$$\phi_{OH-Ti} = \theta_{OH-Ti} \text{eV}. \quad (2.27)$$

III. METODE PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini akan dilakukan di Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung, pada bulan Februari sampai Mei 2023.

3.2 Alat dan Bahan

Alat dan bahan yang digunakan pada penelitian ini adalah sebuah komputer yang telah terinstal *software* Matlab untuk melakukan simulasi dan *software* Origin untuk melakukan *plotting* grafik. Penelitian ini menggunakan Matlab karena salah satu keuntungannya, yaitu mampu memberikan visualisasi dalam bentuk grafik bahkan untuk fungsi matematis yang kompleks sekalipun.

3.3 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian yang akan dilakukan pada penelitian ini secara sistematis dijelaskan sebagai berikut:

3.3.1 Penyusunan Persamaan Differensial Biasa (PDB)

Pada langkah ini reaksi pada Persamaan (2.12) – (2.14) disusun menjadi persamaan diferensial orde satu untuk mendapatkan nilai hunian (θ) gas dan perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$) pada permukaan bahan $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$.

3.3.2 Formulasi Persamaan Hasil Eksperimen

Sebelum dilakukan proses optimasi parameter, perlu dilakukan pendekatan grafik eksperimen Marjunus (2018) untuk memudahkan perhitungan nilai *error*. Oleh karena itu, akan dilakukan formulasi persamaan hasil eksperimen dengan cara

fitting untuk mendapatkan persamaan garisnya. Langkah yang akan dilakukan adalah sebagai berikut:

1. Data hasil penelitian Marjunus (2018) dimasukkan ke dalam *software* Origin.
2. Dilakukan *plotting* grafik penelitian Marjunus (2018).
3. Didapatkan grafik hasil penelitian Marjunus (2018).
4. Dilakukan *fitting* persamaan garis pada *software* Origin.
5. Didapatkan grafik hasil *fitting* dan persamaan garis.

3.3.3 Optimasi Parameter

Sebagaimana telah disebutkan pada Tabel 2.2, 2.3, dan 2.4, maka penelitian ini memerlukan beberapa parameter sebagai penunjang dalam proses simulasi mekanisme reaksi. Pada langkah ini, parameter yang akan dicari dapat diukur berdasarkan nilai rerata *error* terkecil dengan lebar partisi dan *range* yang berbeda. Rerata *error* adalah nilai *error* terkecil yang didapatkan dari banyaknya data yang digunakan. Oleh karena itu, semakin banyak data yang digunakan dan semakin halus lebar partisi yang digunakan maka standar *error* yang didapatkan akan semakin kecil dan *representatif* (mewakili). Langkah yang dilakukan adalah sebagai berikut:

1. Solusi PDB orde pertama dibuat sebagai program dalam perangkat lunak MatLab.
2. *Fitting* persamaan garis hasil penelitian Marjunus (2018) dimasukkan ke dalam program untuk didapatkan nilai rerata *error* terkecil.
3. Pendeteksian gas NH₃ dilakukan selama 90 menit pada suhu 30°C. Diawali dengan pemberian atmosfer (*synthetic air*) selama 30 menit. Kemudian diberikan gas NH₃ sebanyak 50 ppm selama 10 menit dan diakhiri dengan pemberhentian gas NH₃ selama 10 menit pula.
4. Parameter fungsi kerja (ϕ) Pt₈₀Au₁₄Ti₆ untuk oksigen diberikan oleh Persamaan (2.15) – (2.18). Sedangkan nilai fungsi kerja (ϕ) Pt₈₀Au₁₄Ti₆ untuk NH₃, NH₂, dan OH akan diusulkan berbanding lurus dengan nilai $\theta_{\text{NH}_3\text{-Pt}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Pt}}$, $\theta_{\text{OH-Pt}}$, $\theta_{\text{NH}_3\text{-Au}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Au}}$, $\theta_{\text{OH-Au}}$, $\theta_{\text{NH}_3\text{-Ti}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Ti}}$, dan $\theta_{\text{OH-Ti}}$ seperti pada Persamaan (2.19) – (2.27).

5. Nilai parameter-parameter yang telah diketahui sebelumnya yaitu S_{01Pt} , ν_{r1Pt} , S_{02Pt} , ν_{r2Pt} , E_{f2Pt} , E_{r2Pt} , S_{02Au} , ν_{r2Au} , E_{f2Au} , E_{r2Au} , S_{02Ti} , E_{f2Ti} , dan E_{r2Ti} akan dibuat konstan. Akan tetapi, untuk nilai parameter lainnya yang belum diketahui akan diusulkan dengan memberikan nilai tebakan awal atau nilai coba dengan mengikuti nilai yang ada pada Tabel 3.1.

Tabel 3.1 Parameter yang dioptimasi.

No	Parameter	Nilai tebakan awal
1	E_{f1Pt}	0,13 eV
2	E_{r1Pt}	0.91 eV
3	ν_{f3Pt}	$7,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
4	ν_{r3Pt}	$3,1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$
5	E_{f3Pt}	0,42 eV
6	E_{r3Pt}	0,68 eV
7	S_{01Au}	0,5
8	ν_{r1Au}	$1,0 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
9	E_{f1Au}	0,16 eV
10	E_{r1Au}	0,68 eV
11	ν_{f3Au}	$9,85 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$
12	ν_{r3Au}	$3,25 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$
13	E_{f3Au}	0,92 eV
14	E_{r3Au}	2,3 eV
15	S_{01Ti}	0,17
16	ν_{r1Ti}	$2,1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$
17	E_{f1Ti}	0,5 eV
18	E_{r1Ti}	0,51 eV
19	ν_{r2Ti}	$7,11 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
20	ν_{f3Ti}	$3,425 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$
21	ν_{r3Ti}	$2,725 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$
22	E_{f3Ti}	1,09 eV
23	E_{r3Ti}	1,10 eV

6. Program PDB orde 1 dijalankan berulang kali untuk mendapatkan nilai hunian (θ), perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$) dan *CPD* dengan memvariasikan satu persatu parameter yang belum diketahui nilainya dengan dibuatnya nilai yang konstan pada nilai coba yang lain. Nilai fungsi kerja tiap material dituliskan pada Persamaan (3.1) – (3.3) dan nilai fungsi kerja total (ϕ_{Total}) dihitung dari penjumlahan persentase fungsi kerja (ϕ) tiap material seperti pada Persamaan (3.4). Nilai *CPD* diberikan oleh Persamaan (2.3).

$$\phi_{\text{Pt}} = \phi_{\text{NH}_3\text{-Pt}} + \phi_{\text{O-Pt}} + \phi_{\text{NH}_2\text{-Pt}} + \phi_{\text{OH-Pt}} \quad (3.1)$$

$$\phi_{\text{Au}} = \phi_{\text{NH}_3\text{-Au}} + \phi_{\text{O-Au}} + \phi_{\text{NH}_2\text{-Au}} + \phi_{\text{OH-Au}} \quad (3.2)$$

$$\phi_{\text{Ti}} = \phi_{\text{NH}_3\text{-Ti}} + \phi_{\text{O-Ti}} + \phi_{\text{NH}_2\text{-Ti}} + \phi_{\text{OH-Ti}} \quad (3.3)$$

$$\phi_{\text{Total}} = (80\%) \times \phi_{\text{Pt}} + (14\%) \times \phi_{\text{Au}} + (6\%) \times \phi_{\text{Ti}} \quad (3.4)$$

7. Grafik *CPD* dari setiap parameter versus waktu diperoleh.
8. Grafik *CPD* hasil simulasi diselisihkan dengan grafik hasil eksperimen yang dibuat oleh Marjunus (2018) untuk mencari nilai *error* terkecil.
9. Nilai rerata *error* ($\Delta\bar{E}$) diperoleh.
10. Nilai terbaik dari setiap parameter diperoleh berdasarkan rata-rata *error* terkecil ($\Delta\bar{E}$).

3.3.4 Optimasi Ulang Parameter

Jika nilai parameter tersebut telah diperoleh, maka parameter ini harus dioptimasi lagi untuk menguji kemungkinan perubahan nilai setiap parameter. Prosedurnya adalah sebagai berikut:

1. Solusi PDB orde pertama terkopel dibuat sebagai program dalam perangkat lunak MatLab.
2. *Fitting* persamaan garis hasil penelitian Marjunus (2018) dimasukkan ke dalam program untuk didapatkan nilai rerata *error* terkecil.
3. Pendeteksian gas NH_3 dilakukan selama 90 menit pada suhu 30°C . Diawali dengan pemberian atmosfer (*synthetic air*) selama 30 menit. Kemudian diberikan gas NH_3 sebanyak 50 ppm selama 10 menit dan diakhiri dengan pemberhentian gas NH_3 selama 10 menit pula.

4. Parameter fungsi kerja (ϕ) $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ untuk oksigen diberikan oleh Persamaan (2.15) – (2.18). Sedangkan nilai fungsi kerja (ϕ) $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ untuk NH_3 , NH_2 , dan OH akan diusulkan berbanding lurus dengan nilai $\theta_{\text{NH}_3\text{-Pt}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Pt}}$, $\theta_{\text{OH-Pt}}$, $\theta_{\text{NH}_3\text{-Au}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Au}}$, $\theta_{\text{OH-Au}}$, $\theta_{\text{NH}_3\text{-Ti}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Ti}}$, dan $\theta_{\text{OH-Ti}}$ seperti pada Persamaan (2.19) – (2.27).
5. Program PDB orde pertama diselesaikan dengan memvariasikan satu persatu dari parameter-parameter yang telah dioptimasi sebelumnya untuk mendapatkan nilai hunian (θ), perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$), dan *CPD*.
6. Grafik *CPD* dari setiap parameter versus waktu diperoleh.
7. Grafik *CPD* hasil simulasi diselisihkan dengan grafik hasil eksperimen yang dibuat oleh Marjunus (2018) untuk mencari nilai *error* terkecil.
8. Nilai rerata *error* ($\Delta\bar{E}$) diperoleh.
9. Nilai terbaik dari setiap parameter diperoleh berdasarkan rata-rata *error* terkecil ($\Delta\bar{E}$).
10. Jika nilai parameter berubah, nilai parameter akhir adalah rata-rata dari nilai awal dengan nilai yang baru dioptimasi ulang.

3.3.5 Simulasi Akhir

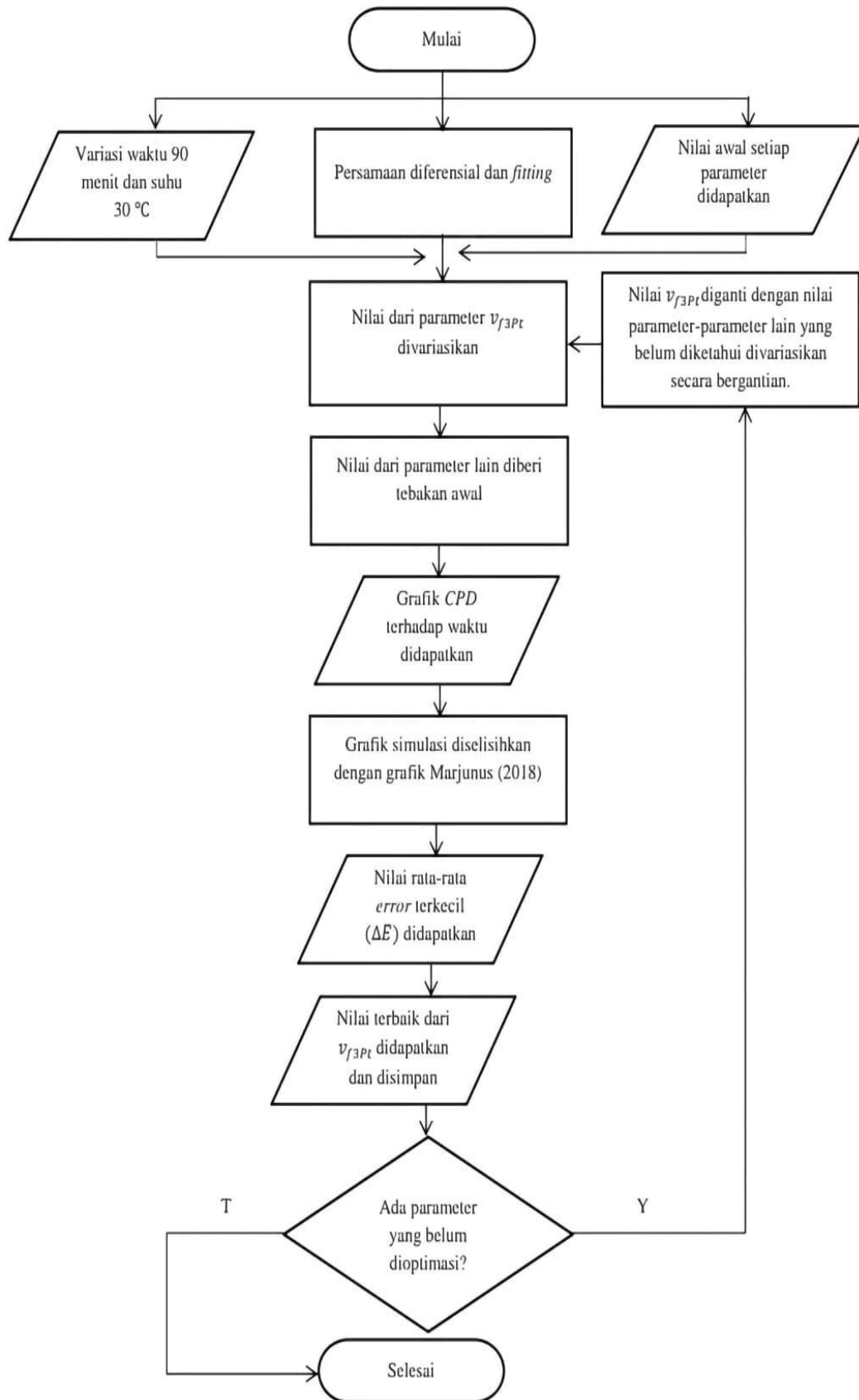
Proses akhir dari penelitian ini adalah simulasi dengan semua nilai parameter yang telah dioptimasi. Langkah-langkah yang digunakan adalah sebagai berikut:

1. Solusi PDB orde pertama dibuat sebagai program dalam perangkat lunak MatLab.
2. Pendeteksian gas NH_3 dilakukan selama 90 menit pada suhu 30°C . Diawali dengan pemberian atmosfer (*synthetic air*) selama 30 menit. Kemudian diberikan gas NH_3 sebanyak 50 ppm selama 10 menit dan diakhiri dengan pemberhentian gas NH_3 selama 10 menit pula.
3. Parameter fungsi kerja (ϕ) $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ untuk oksigen diberikan oleh Persamaan (2.15) – (2.18). Sedangkan nilai fungsi kerja (ϕ) $\text{Pt}_{80}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ untuk NH_3 , NH_2 , dan OH akan diusulkan berbanding lurus dengan nilai $\theta_{\text{NH}_3\text{-Pt}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Pt}}$, $\theta_{\text{OH-Pt}}$, $\theta_{\text{NH}_3\text{-Au}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Au}}$, $\theta_{\text{OH-Au}}$, $\theta_{\text{NH}_3\text{-Ti}}$, $\theta_{\text{NH}_2\text{-Ti}}$, dan $\theta_{\text{OH-Ti}}$ seperti pada Persamaan (2.19) – (2.27).

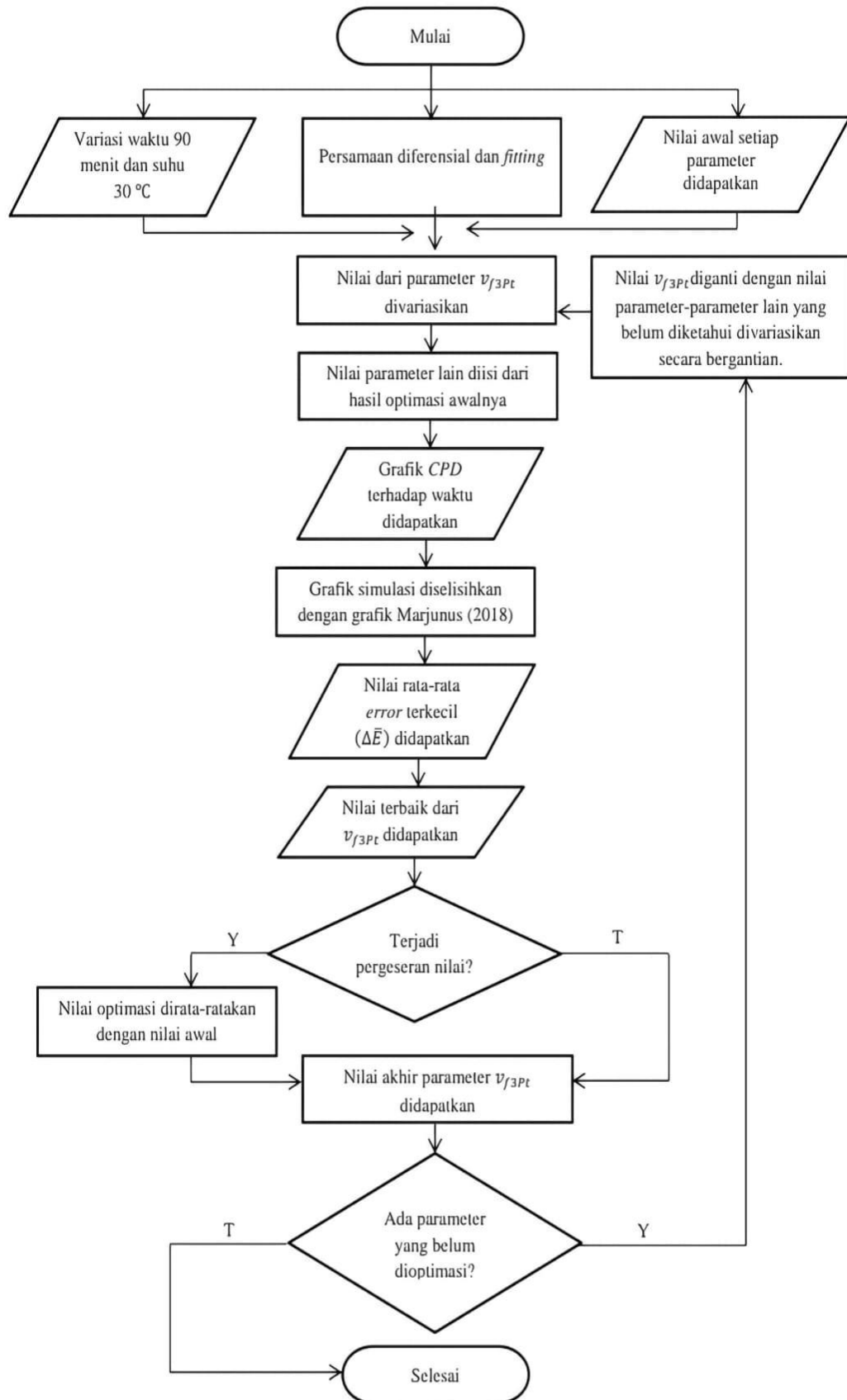
4. Program dijalankan dengan semua parameter yang sudah didapatkan dimasukkan ke dalam penyelesaian persamaan diferensial.
5. Program PDB orde pertama terkopel dijalankan berulang kali untuk mendapatkan nilai hunian (θ), fungsi kerja total (ϕ_{Total}) dan *CPD*. Nilai *CPD* diberikan oleh Persamaan (2.3).
6. Grafik *CPD* dari setiap parameter versus waktu diperoleh.
7. Grafik *CPD* hasil simulasi diselisihkan dengan grafik hasil eksperimen yang dibuat oleh Marjunus (2018).

3.4 Diagram Alir Penelitian

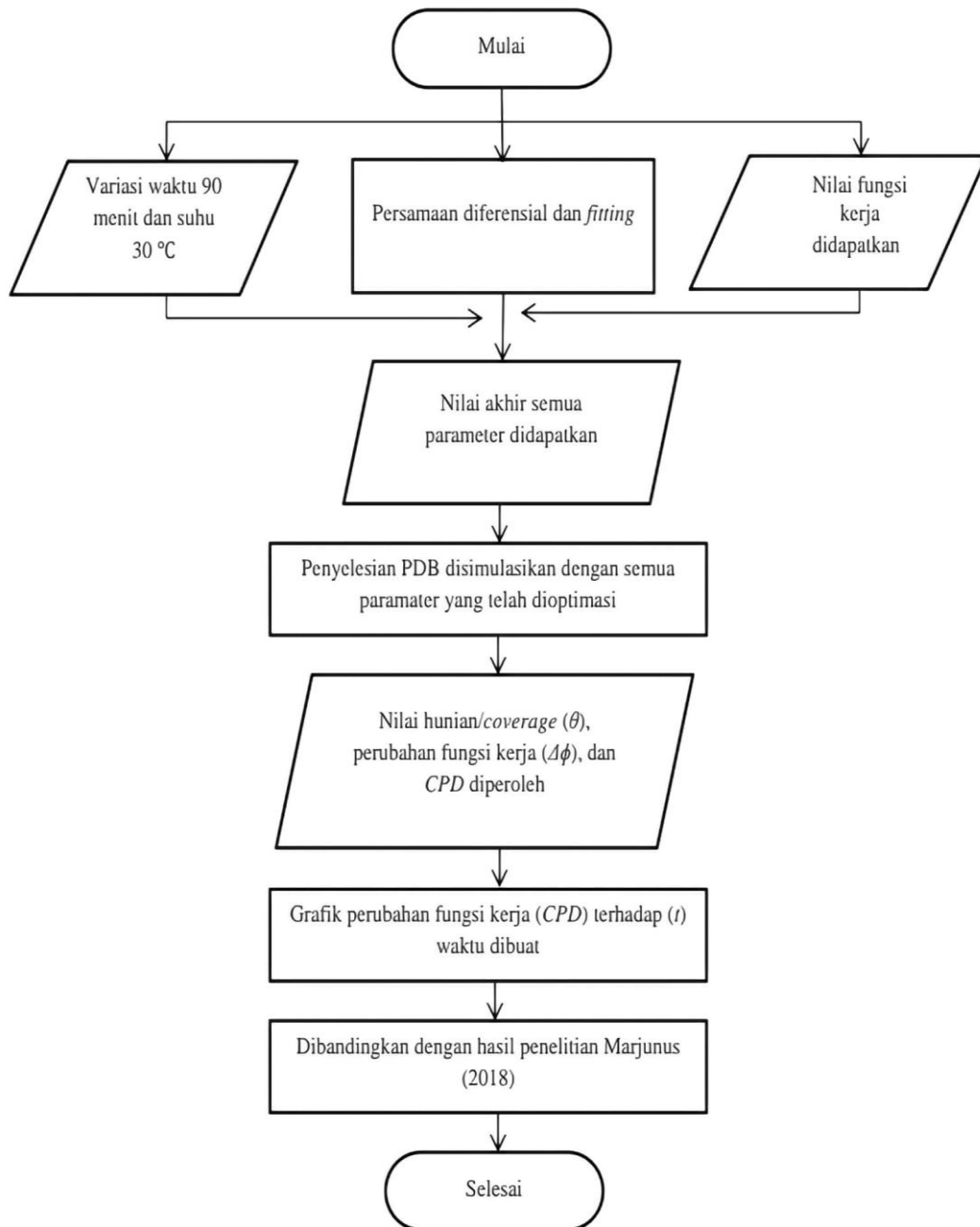
Diagram alir yang terdapat pada penelitian ini ditunjukkan pada Gambar 3.1 - Gambar 3.3.



Gambar 3.1 Diagram alir optimasi parameter.



Gambar 3.2 Diagram alir optimasi ulang parameter.



Gambar 3.3 Diagram alir simulasi akhir penelitian.

V. SIMPULAN DAN SARAN

5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dijelaskan pada Bab 4, maka dapat diambil kesimpulan sebagai berikut:

1. Penelitian ini berhasil mendapatkan nilai-nilai parameter dari reaksi yang terlibat dengan melakukan optimasi parameter. Nilai parameter ini dapat berguna untuk penelitian terkait pendeteksian gas dengan syarat bahwa reaksi yang digunakan dan bahan yang digunakan sama persis seperti pada penelitian ini. Nilai dari parameter-parameter yang berhasil dioptimasi yaitu energi adsorpsi NH_3 pada bahan Pt (E_{f1Pt}) sebesar 0,15 eV, energi desorpsi NH_3 pada bahan Pt (E_{r1Pt}) sebesar 0,78 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Pt (ν_{f3Pt}) sebesar $8,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Pt (ν_{r3Pt}) sebesar $3,25 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, energi reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Pt (E_{f3Pt}) sebesar 0,43 eV, energi reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Pt (E_{r3Pt}) sebesar 0,68 eV, koefisien lengket awal NH_3 pada bahan Au (S_{01Au}) sebesar 0,655, koefisien Arrhenius desorpsi NH_3 pada bahan Au (ν_{r1Au}) sebesar $1,025 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, energi adsorpsi NH_3 pada bahan Au (E_{f1Au}) sebesar 0,155 eV, energi desorpsi NH_3 pada bahan Au (E_{r1Au}) sebesar 0,68 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Au (ν_{f3Au}) sebesar $8,9 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Au (ν_{r3Au}) sebesar $6,825 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, energi reaksi maju NH_3 dan O pada bahan Au (E_{f3Au}) sebesar 0,72 eV, energi reaksi balik NH_2 dan OH pada bahan Au (E_{r3Au}) sebesar 0,9 eV, koefisien lengket awal NH_3 pada bahan Ti (S_{01Ti}) sebesar 0,355, koefisien Arrhenius desorpsi NH_3 pada bahan Ti (ν_{r1Ti}) sebesar $5,375 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, energi adsorpsi NH_3 pada bahan Ti (E_{f1Ti}) sebesar 0,435 eV, energi desorpsi NH_3 pada bahan Au (E_{r1Ti}) sebesar

0,59 eV, koefisien Arrhenius desorpsi O pada bahan Ti (ν_{r2Ti}) sebesar $9,75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi maju NH₃ dan O pada bahan Ti (ν_{f3Ti}) sebesar $1,2 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi balik NH₂ dan OH pada bahan Ti (ν_{r3Ti}) sebesar $6,45 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, energi reaksi maju NH₃ dan O pada bahan Ti (E_{f3Ti}) sebesar 0,405 eV, dan energi reaksi balik NH₂ dan OH pada bahan Ti (E_{r3Ti}) sebesar 0,38 eV.

2. Nilai *Contact Potential Difference* (CPD) yang dihasilkan pada penelitian ini sebesar -115 mV, sedangkan pada hasil eksperimen Marjunus (2018) sebesar (-100±20) mV. Dapat disimpulkan bahwa penelitian ini berhasil mensimulasikan sinyal sensor gas NH₃ pada bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ karena grafik hasil simulasi yang diperoleh pada penelitian ini memiliki *trend* yang sama dengan hasil eksperimen Marjunus (2018).
3. Berdasarkan hasil simulasi yang dilakukan, nilai hunian/*coverage* gas NH₃ (θ_{NH_3}), nilai hunian/*coverage* atom O (θ_O), nilai hunian/*coverage* gas NH₂ (θ_{NH_2}), dan nilai hunian/*coverage* gas OH (θ_{OH}) pada permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ dalam *Mono Layer* (ML) berturut-turut diperkirakan sebesar $1,152 \times 10^{-1}$ ML, $1,27 \times 10^{-7}$ ML, $6,622 \times 10^{-5}$ ML, dan $6,622 \times 10^{-5}$ ML.

5.2 Saran

Saran untuk penelitian berikutnya terkait pemodelan atau simulasi mekanisme pendeteksian gas NH₃ pada bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\phi$) agar menambahkan jumlah reaksi dan atom/molekul gas yang berinteraksi pada permukaan bahan seperti gas hidrogen, nitrogen atau H₂O (uap air). Penambahan jumlah reaksi kemungkinan besar juga berpengaruh terhadap hasil simulasi, sehingga diperlukan reaksi yang jumlahnya sama atau mendekati jumlah reaksi pada eksperimen. Selain itu, diperlukan pula suatu studi literatur lebih lanjut terkait formulasi hunian dari atom atau gas yang terlibat khususnya untuk gas NH₃, NH₂, dan OH.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdulgafour, H. I., Darwoysh, H. H., and Hassan, F. H. 2016. Hydrogen Gas Sensor Based on ZnO Nanoroad on Si by Thermal Evaporation. *Journal of Material Science and Engineering A*, Vol. 6, No. 3, Hal. 51 – 56.
- Appari, S., Janardhanan, V, M., Jayanti, S., Tischer, S., and Deutschmann, O. 2011. Micro-Kinetic Modeling of NH₃ Decomposition on Ni and Its Application to Solid-Oxide Fuel Cells. *Chemical Engineering Science*, Vol. 66, No. 21, Hal. 5184-5191.
- Behrendt, F. 1999. Experimentelle and Numerische Beschreibung Katalytischer Zund and Verbrennungsprozesse. *Habilitationsschrift*. Fakultät für Energietechnik der Universität Stuttgart.
- Bundaleski, N., Silva, A. G., Schroder, U., Moutinho, A. M. C., and Teodoro, O. M. N. D. 2010. Adsorption Dynamics of Water on Surface of TiO₂ (110). *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 257, No 1, Hal. 12008.
- Callaghan, C. A. 2006. Kinetic and Catalysis of Water-Gas-Shift Reaction: A Microkinetic and Graph Theoretic Approach. *PhD Tesis*. Worcester Polytechnic Institute.
- Canning N. D. S., Outka, D. and Madix, R. J. 1984. The Adsorption of Oxygen on Gold. *Surface Science*, Vol. 141, No. 1, Hal. 240 – 254.
- Chang, J. F., Kuo, H. H., Leu, I. C., and Hon, M. H. 2002. The Effects of Thickness and Operation Temperature on ZnO: Al Thin Film CO Gas Sensor. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, Vol. 84, No. 2, Hal. 258-264.
- Chester, M. A. and Somorjai, G. A. 1975. The Chemisorption of Oxygen, Water and Selected Hydrocarbons on the (111) and Stepped Gold Surfaces. *Surface Science*, Vol. 52, No. 1, Hal. 21 – 28.
- Christmann, K., Ertl, G., and Pignet, T. 1976. Adsorption of Hydrogen on a Pt (111) Surface. *Surface Science*, Vol. 54, No. 2, Hal. 386 – 392.
- Derry, G. N., and Ross, P. N. 1985. A Work function Change Study of Oxygen Adsorption on Pt(111) dan Pt(100). *Journal of Chemical Physics*, Vol 82, No. 6, Hal. 2772 – 2778.

- Ding, L.P., and Bhatia, S.K. 2003. Analysis of Multicomponent Adsorption Kinetics on Activated Carbon, *AIChE Journal*, Vol. 49, No. 4, Hal. 883-895.
- Effendi, H. 2003. *Telaah Kualitas Air Bagi Pengelolaan Sumber Daya dan Lingkungan Perairan*. Yogyakarta. Penerbit Kanisius.
- Erdtman, E., Andersson, M., Spetz, A, L., and Ojamile, L. 2017. Simulations of The Thermodynamics and Kinetics of NH₃ at the RuO₂ (110) Surface. *Surface Science*, Vol 656, No. 2, Hal. 77-85.
- Gottfried, J. M. 2003. CO Oxidation Over Gold: Adsorption and Reaction of Oxygen, Carbon Monoxide, and Carbon Dioxide on an Au(110)-(1x2) surface. *PhD Tesis*. Universitas Berlin.
- Gottfried, J. M., Schmidt, K. J., Schroeder, S. L. M., dan Christman, K. 2002. Spontaneous and Electron-Induced Adsorption of Oxygen on Au(110)-(1x2). *Surface Science*, Vol. 511, Hal. 65 – 82.
- Gu, H., Wang, Z., and Hu, Y. 2012. Hydrogen Gas Sensor Based on Semiconductor Oxide Nanostructure. *Sensor*, Vol. 12, Hal. 5517 – 5550.
- Guthrie, W. L., Sokol, J. D., and Somorjai, G. A. 1981. The decomposition of ammonia on the flat (111) and stepped (557) platinum crystal surfaces. *Surface Science*, Vol. 109, No. 2, Hal. 390-418.
- Hakim, L. N., Taqwa, A., dan Ziad, I. 2019. Rancang Bangun Pendeteksi Kebocoran Gas Konsentrasi Amonia (NH₃) menggunakan Modul Wifi ESP8266. *Prosiding SENIATI*, Hal. 193-196.
- Hashwan, S. S. B., Khir, M. M., Al-Douri, Y., Yousif, A., Ramza, H., and Arjo, S. 2021. Design and Simulation of MEMS Electrostatic Resonator for Ammonia Gas Detection Based on SOIMUMPs. In *2020 8th International Conference on Intelligent and Advanced Systems (ICIAS)*, Hal. 1-5.
- He, J., Jing, Dapeng, and Vidali, G. 2014. Atomic Oxygen Diffusion on and Desorption from Amorphous Silicate Surfaces. *Physical Chemistry*, Vol. 16, Hal. 3493 – 3500.
- Heinzinger, K. 1991. Molecular Dynamics Studies of Platinum/Water Interfaces. *Pure and Applied Chemistry*, Vol. 63, No. 12, Hal. 1733 – 1742.
- Huang, S., Panes-Ruiz, L. A., Croy, A., Löffler, M., Khavrus, V., Bezugly, V., and Cuniberti, G. (2021). Highly sensitive room temperature ammonia gas sensor using pristine graphene: The role of biocompatible stabilizer. *Carbon*, Vol. 173, Hal. 262-270.
- Iniguez, J., Zhou, W., and Yildirim, T. 2007. Vibrational Properties of TiHn Complexes Adsorbed on Carbon Nanostructures. *Chemical Physics Letters*, Vol. 444, No. 140 – 144.

- Jonker, B. T., Morar, J. F., and Park, R.L. 1981. Surface State and Oxygen Chemisorption on Ti(0001). *Physics Review B*, Vol. 24, Hal. 2951 – 2957.
- Kadhim, I. H., Hassan, H. A., and Abdullah, Q. N. 2016. Hydrogen Gas Sensor Based on Nanocrystalline SnO₂ Thin Film Grown on bare Si Substrates. *Nano Micro Letter*, Vol. 8, Hal. 20 – 28.
- Kasemo, B., and Tornqvist, E. 1979. The Kinetic of Hydrogen Interaction with TiH_x Films, $0 \leq x \leq 2$. *Application of Surface Science*, Vol. 3, Hal. 307 – 328.
- Kirk, R.E. and Othmer, V.R., 1994, *Encyclopedia of Chemical Technology, vol.11 Flavor Characterization to Fuel Cells, 4th ed.*, John Wiley and Sons Inc., New York.
- Komarawidjaja, W. 2003. Pengaruh Aplikasi Konsorsium Mikroba Penitrifikasi Terhadap Konsentrasi Amonia (NH₃) pada Air Tambak. *Jurnal Teknologi Lingkungan*, Vol. 4, No. 2, Hal. 63-64.
- Korotcenkov, G. 2013. *Handbook of Gas Sensor Material: Properties, Advantages and Shortcomings for Application Volume 1 Conventional Approaches*. Springer-Verlag New York.
- Koval, I. P., Len, Y. A., Nakhodkin, M.G., Svishevskiy, M. O., and Yakovenko, M. Y. 2015. Interaction of Molecular Oxygen with Si(001) Surface Covered with a Chromium or Titanium Monolayer. *Ukrainian Journal Physics*, Vol. 60, Hal. 46 – 51.
- Kwak, D., Wang, M., Koski, K. J., Zhang, L., Sokol, H., Maric, R., and Lei, Y. (2019). Molybdenum trioxide (α -MoO₃) nanoribbons for ultrasensitive ammonia (NH₃) gas detection: integrated experimental and density functional theory simulation studies. *ACS applied materials & interfaces*, Vol 11, No. 11, Hal. 10697-10706.
- Lestari, F. 2010. *Bahaya Kimia, Sampling dan Pengukuran Kontaminan Kimia di Udara*. Jakarta. Penerbit Buku Kedokteran EGC.
- Linsmeier, C. and Wanner, J. 2000. Reactions of Oxygen Atoms and Molecules with Au, Be, and W Surfaces. *Surface Science*, Vol. 454, Hal. 305 – 309.
- Li, Z., Yao, Z., Haidry, A. A., Plecenik, T., Xie, L., Sun, L., dan Fatima, Q. 2018. Resistive-Type Hydrogen Sensor Based on TiO₂: A review. *International Journal of Hydrogen Energy* XXX, Vol. 1, No. 19, Hal. 1 – 19.
- Liu, R. 2013. Adsorption and Dissociation of H₂O on Au(111) Surface: A DFT Study. *Computational and Theoretical Chemistry*, Vol. 1019, Hal. 141 – 145.
- Marjunus, R. 2018. Development of Pt-Based Sensitive Layer for Carbon Monoxide Work Function Change Based Sensor in Air Temperatur. *Dr Dissertation*. Universitat Der Bundeswehr Munchen.

- Marjunus, R., Al Fath, Y., Yulianti, Y., and Widanarto, W. 2022. Simulation of Pt₈₀Au₁₄Ti₆ Work Function Change-Based Sensor of H₂ Gas. *Journal of Physical Science*, Vol. 33, No. 3, Hal. 45-62.
- Matsuda, K. dan Harada, S. 2005. Dynamical desorption process of oxygen on Platinum by using a gas controllable H₂ |H⁺ Electrolyte| Pt cell. *Materials Transactions*, Vol. 46, No. 5, Hal. 1058 – 1063.
- Michaelides, A. and Hu, P. 2001. Catalytic Water Formation on Platinum: A FirstPrinciples Study. *Journal American Chemistry Society*, Vol. 123, Hal. 4235 – 4242.
- Niemeyer, T.C., Gimenez, J. M. A., Almeida, L. H., Grandini, C.R., and Florencio, O. 2002. Activation Energy Measurement of Oxygen Ordering in a Nb-Ti Alloy by Anelastic Relaxation. *Material Research*, Vol. 5, Hal. 143 – 147.
- Nix, R. 2014. *An Introduction to Surface Chemistry*. London: University of London. Hal. 67-69.
- Novikov, S. N. and Timoshenkov, S. P. 2003. Measurement of Contact Potential Difference (Work Function) of Metal and Semiconductor Surface by the Static Ionized Capacitor Method. *Advance in Colloid and Interface Science*, Vol. 105, Hal. 329 – 339.
- Pak, Y., Jeong, Y., Alaal, N., Kim, H., Chae, J., Min, J. W., Devi, A. A. S., Mitra, S., Lee, D. H., Kumaresan, Y., Park, W., Kim, T. W., Roqan, I. S., and Jung, G. Y. 2018. Highly Stable and Ultrafast Hydrogen Gas Sensor Based on 15 nm Nanogaps Switching in a Palladium-Gold Nanoribbons Array. *Advanced Material Interfaces*, Vol. 6, Hal. 1–9.
- Pan, M., Brush, A. J., Pozun, Z. D., Ham, H. C., Yu, W. H., Henkelmen, G., Hwang, G. S., and Mullins, C. B. 2013. Model Studies of Heterogeneous Catalytic Hydrogenation Reaction with Gold. *Chemical Society Review*, Vol. 42, Hal. 5002 – 5013.
- Picolin, A., Busse, C., Redinger, A., Morgenstern, M., dan Michely, T. 2009. Desorption of H₂O from Flat and Stepped Pt(111). *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 113, Hal. 691 – 697.
- Pour, G. H., Aval, L. F., dan Eslami, S. 2018. Sensitive Capacitive-Type Hydrogen Sensor Based on Ni Thin Film in Different Hydrogen Concentration. *Current Nanoscience*, Vol. 14, Hal. 136 – 142.
- Puspita, N., Sari, Tri Rima Setyawati, A. H. Y. 2014. Kondisi hematologi pemulung yang terpapar gas amoniak di Tempat Pemrosesan Akhir (TPA) sampah Batu Layang Pontianak. *Protobiont*. Hal. 31–39.
- Senft, C. 2009. Austrittsarbeitsbasierte Wassertofdetektion für Fahrzeuge mit Brennstoffzellenantrieb. *PhD Tesis*. Universität der Bundeswehr München.

- Senft, C., Iskra, P., Eisele, I., dan Hansch, W. 2011. *Work function – Based Sensor: Schottky and FET Base Devices (in Chemical Sensor: Comprehensive Sensor Technologies, Editor : G. Korotchenkov)*, Volume 4. Momentum Press. New York.
- Senft, C., Iskra, P., dan Eisele, I. 2012. Theory and Application of Suspended Gate FET Gas Sensor. *Chemical Sensor and Biosensor*, Vol. 11, Hal. 79 – 112.
- Simon, S. 2015. Development and Testing of A Work Function-Based Carbon Monoxide Sensor for Fuel Cell Application. *Dissertation*. Faculty of Electrical Engineering and Information Technology. Munich: University of The Bundeswehr Munich.
- Siswanti, A., dan Suryono, S. (2016). *Wireless Sensor System* untuk Pemantauan Kadar Gas Amonia (NH₃) Menggunakan Algoritma Berbasis Aturan. *Youngster Physics Journal*, Vol. 5, No. 2, Hal. 59-68.
- Slot, T. K., Riley, N., Shiju, N. R., Medlin, J. W., and Rothenberg, G. 2020. An experimental approach for controlling confinement effects at catalyst interfaces. *Chemical Science*, Vol. 11, No. 40, Hal. 11024-11029.
- Somorjai, G. A., dan Li, Y. 2010. *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis Second Edition*. John Wiley and Son. New Jersey.
- Sudibandriyo, Mahmud. 2003. *A Generalized Ono-Kondo Lattice Model For High Pressure Adsorption On Carbon Adsorbents*. Oklahoma States University.
- Susanto, Y. A. 2020. Simulasi Mekanisme Reaksi Pendeteksian Gas Amonia (NH₃) pada Permukaan ZnO Berbasis Perubahan Fungsi Kerja. *Skripsi*. Universitas Lampung. Bandar Lampung.
- Tanjung, F. A. 2017. Rancang Bangun Alat Pendeteksi Konsentrasi Gas Amonia (NH₃) Pada Ruangan Berbasis Arduino Dengan Sensor MQ135. *Project Akhir 2*. Sumatera Utara. Universitas Sumatera Utara.
- Vilitis, O., Rutkis, M., Busenberg, J., dan Meerkulov, D. 2016. Determination of Contact Potential Difference by the Kelvin Probe (Part 1) I: Basic Principle of Measurement. *Latvian Journal of Physics and Technical Sciene*, Vol 2, Hal.48 – 57.
- Wang, R., and Fan, H. 2016. The Mechanism of H₂ and H₂O Desorption from Bridging Hydroxyls of TiO₂ (110) surface. *Catalysis Science and Technology*, Vol 1, Hal. 1 – 14.
- Wei, F.G., Hara, T., and Tsuzaki, K. 2004. Precise Determination of the Activation Energy for Desorption of Hydrogen in Two Ti-Added Steels by a Single Thermal-Desorption Spectrum. *Metallurgical and Material Transaction B*, Vol. 35B, Hal. 587 – 597.

- Widanarto, R., Wahyu. 2007. *Gas Detection with Floating Gate Field Effect Transistor*. Gottingen. Cuvillier Verlag.
- Winkler, A. 1998. Interaction of Atomic Hydrogen with Metal Surface. *Applied Physics A*, Vol. 67, Hal. 637 – 644.
- Yan, X. T., and Yu, Xu. 2010. *Chemical Vapor Deposition*. Springer. Berlin.
- Yun, F., Chevtchenko, S., Moon, Y. T., dan Morkoc, H. 2005. GaN Resistive Hydrogen Gas Sensor. *Applied Physics Letter*, Vol. 87, Hal. 1 – 3.
- Yunusa, Z., Hamidon, M. N., Kaiser, A., dan Awang, Z. 2014. Gas Sensor : A Review. *Sensor and Transducer*, Vol. 168, Hal. 61 – 75.
- Yuwono. 2010. Pandemi Resistensi Antimikroba: Belajar dari MRSA. *Jurnal Kedokteran dan Kesehatan*, Vol. 1, No. 42, Hal. 2837–2850.