PEMODELAN REAKSI KIMIA ANTARA GAS NO2 DENGAN Pt₈₀Au₁₄Ti₆ SEBAGAI SENSOR BERBASISKAN FUNGSI KERJA

(Skripsi)

Oleh

Lis Dwi Andini 1917041010



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

ABSTRAK

PEMODELAN REAKSI KIMIA ANTARA GAS NO2 DENGAN Pt₈₀Au₁₄Ti₆ SEBAGAI SENSOR BERBASISKAN FUNGSI KERJA

Oleh

LIS DWI ANDINI

Telah dilakukan pemodelan reaksi kimia dalam pendeteksian gas NO₂ pada permukaan sensor bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ berbasiskan perubahan fungsi kerja ($\Delta \phi$). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui adanya perbandingan nilai Contact Potential Difference (CPD) antara hasil eksperimen dengan hasil simulasi. Reaksi kimia pada penelitian ini menggunakan reaksi penyerapan gas NO₂, penyerapan oksigen dan reaksi antar kedua gas tersebut. Reaksi yang digunakan pada penelitian ini mengandung empat nilai hunian/coverage (θ), yaitu hunian/coverage ($\theta_{\rm O}$), hunian/coverage ($\theta_{\rm NO2}$), hunian/coverage ($\theta_{\rm NO}$) dan hunian/coverage (θ_{02}). Simulasi dijalankan dengan menggunakan MATLAB. Penelitian ini berhasil mendapatkan nilai parameter (23 parameter) yang belum didapatkan dari studi literatur. Penelitian ini juga mendapatkan hasil simulasi sinyal sensor gas NO₂ pada bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ dengan trend grafik yang mendekati grafik eksperimen. Nilai CPD yang dihasilkan dari simulasi masih jauh dibandingkan dengan hasil eksperimen, yaitu sebesar 10 mV dengan nilai CPD hasil eksperimen sebesar (50 ± 10) mV. Selain itu, penelitian ini juga berhasil mendapatkan perkiraan nilai hunian/coverage (θ) untuk gas NO₂, gas O₂, gas NO dan atom O secara berturut-turut sebesar 2,684 \times 10⁻¹¹ ML, 1,048 \times 10⁻¹¹ ML, $1,048 \times 10^{-11}$ ML dan $4,02 \times 10^{-9}$ ML.

Kata Kunci : CPD, sensor gas, gas NO2, simulasi, perubahan fungsi kerja

ABSTRACT

MODELING OF CHEMICAL REACTION BETWEEN NO₂ GAS AND Pt₈₀Au₁₄Ti₆ AS A SENSOR BASED ON WORK FUNCTION

By

LIS DWI ANDINI

Chemical reactions modeling has been carried out in the detection of NO₂ gas on the surface of the Pt₈₀Au₁₄Ti₆ material sensor based on the change in work function ($\Delta \phi$). This research aims to determine whether there is a comparison of the Contact Potential Difference (CPD) between the experimental results of and the simulation. The chemical reaction in this research uses the NO2 gas absorption reaction, oxygen absorption and the reaction between the two gases. The reaction used in this study contains four *coverage* (θ), that is *coverage* (θ_0), coverage (θ_{NO2}), coverage (θ_{NO}) and coverage (θ_{O2}). The simulation is run using MATLAB. This research can find parameter values (23 parameters) which had not been obtained from literature studies. This research also obtained the simulation results of the NO₂ gas sensor signal on Pt₈₀Au₁₄Ti₆ material with a trend graph close to the experimental graph. The CPD value resulting from the simulation is still far from the experimental results, which is equal to 10 mV with the CPD by experimental of (50 ± 10) mV. In addition, this research also can find an estimate of the *coverage* (θ) for NO₂ gas, O₂ gas, NO gas and O atom respectively of $2,684 \times 10^{-11}$ ML, $1,048 \times 10^{-11}$ ML, $1,048 \times 10^{-11}$ ML and 4,02 $\times 10^{-9}$ ML.

Keywords : CPD, gas sensor, NO₂ gas, simulation, work function change

PEMODELAN REAKSI KIMIA ANTARA GAS NO2 DENGAN Pt₈₀Au₁₄Ti₆ SEBAGAI SENSOR BERBASISKAN FUNGSI KERJA

Oleh

LIS DWI ANDINI

Skripsi

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Mencapai Gelar SARJANA SAINS

Pada

Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung



JURUSAN FISIKA FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM UNIVERSITAS LAMPUNG 2023

Judul	Skripsi	
-------	---------	--

: PEMODELAN REAKSI KIMIA ANTARA GAS NO2 DENGAN Pt80Au14Ti6 SEBAGAI SENSOR **BERBASISKAN FUNGSI KERJA**

Nama Mahasiswa

: Tis Dwi Andini

Fisika S

Nomor Pokok Mahasiswa : 1917041010

Program Studi

Fakultas

LAMP : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

5

MENYETUJUI

1. Komisi Pembimbing

Pembimbing I

Pembimbing II

at-Roniyus Marjunus, S.Si., M.Si. Dr. rer. 703182000121003 MP. 197

Dr. Yanti Yulianti, S.Si., 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, S.Si., M.Si. Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si. Sekretaris PUNL : Dra. Dwi Asmi, M.Si., Ph.D Penguji Bukan Pembimbing 9 2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Dr. Eng. Heri Satria, S.Si, M.Si. NIP:197110012005011002 Tanggal Lulus Ujian Skripsi : 26 September 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 pula bahwa skripsi ini dibuat oleh saya sendiri.

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

Bandar Lampung, 26 September 2023

7AKX695749560

Lis Dwi Andini NPM. 1917041010

RIWAYAT HIDUP



Penulis bernama Lis Dwi Andini dilahirkan pada 14 Januari 2001 di Banjar Rejo, Lampung Timur sebagai anak kedua dari tiga bersaudara pasangan Bapak Sugeng Triyono dan Ibu Salimah. Penulis memulai pendidikan pada tahun 2006-2007 di Taman Kanak-Kanak PKK Banjarrejo, Lampung Timur.

Penulis melanjutkan pendidikan tingkat dasar di SD Negeri 1 Banjarrejo kecamatan Batanghari Kabupaten Lampung Timur pada tahun 2007-2013, kemudian melanjutkan pendidikan tingkat menengah di SMP Negeri 4 Metro pada tahun 2013-2016. Kemudian penulis menempuh pendidikan tingkat menengah atas di SMA Muhammadiyah 1 Metro dan tamat pada tahun 2016-2019.

Pada tahun 2019, penulis terdaftar dan lolos jalur Seleksi Nasional Masuk Perguruan Tinggi Negeri (SNMPTN) di Jurusan FMIPA Universitas Lampung. Selain menempuh studi, selama kuliah penulis juga aktif dalam kegiatan mahasiswa sebagai pengurus Himunan Mahasiswa Fisika (Himafi) pada tahun 2020, Sekretaris Biro Kemuslimahan dan Bendahara Umum Rohani Islam (Rois) FMIPA Universitas Lampung pada tahun 2020 dan 2021 serta sebagai Sekretaris Eksekutif Badan Eksekutif Mahasiswa (BEM) FMIPA Universitas Lampung pada tahun 2022. Selama menempuh jenjang pendidikan S1 di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung, penulis memilih konsentrasi pada bidang Fisika Material, kemudian melakukan Praktik Kerja Lapangan (PKL) di PTPN VII Unit Bekri, Lampung Tengah. Penulis juga mengikuti program pengabdian masyarakat dengan mengikuti Kuliah Kerja Nyata (KKN) di Desa Negara Saka, Kecamatan Jabung, Kabupaten Lampung Timur pada tahun 2022.

Penulis memilih penelitian di bidang simulasi sebagai topik skripsi dengan judul "Pemodelan Reaksi Kimia Antara Gas NO₂ dengan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ sebagai Sensor Berbasiskan Fungsi Kerja" dan melakukan penelitian di Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung.

ΜΟΤΤΟ

"Maka sesungguhnya bersama kesulitan itu ada kemudahan, maka apabila kamu telah selesai (dari suatu urusan), tetaplah bekerja keras (untuk urusan yang lain)". (QS. Al-Insyirah ayat 5-6)

"Khairunnas Anfa'uhum Linnas. Sebaik-baik manusia adalah yang paling bermanfaat bagi manusia". (HR. Ahmad)

"Hatiku tenang karena mengetahui bahwa apa yang melewatkanku tidak akan pernah mejadi takdirku, dan apa yang ditakdirkan untukku tidak akan pernah melewatkanku".

(Umar bin Khattab)

Hidup yang tidak dipertaruhkan tidak akan pernah dimenangkan. Dan untuk memulai sesuatu yang baru terkadang kita harus berani mempertaruhkan apa yang kita punya.

PERSEMBAHAN

Dengan penuh rasa syukur dan mengharapkan ridho Allah SWT dan Syafaat Rasulullah Muhammad SAW

Karya ini kupersembahkan kepada Bapak dan Ibuku Tercinta Sugeng Triyono & Salimah

atas segala doa, dukungan, serta usaha yang tidak pernah terputus yang diberikan

kepadaku.

Tak lupa untuk Kakak, Kakak Ipar, Adik, dan Keponakan Tersayang

Lulus Setianingsih Wisnu Aji Yoga Firlian Ahmad Latifa Humaira

semoga Allah selalu memberikan kesejahteraan bagi kita.

Untuk keluarga besar dan terkhusus rekan-rekan Angkatan 2019

Jurusan Fisika FMIPA UNILA

Serta Almamater Tercinta

Universitas Lampung

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim. Puji syukur penulis haturkan kepada Allah SWT, yang telah memberikan limpahan rahmat, hidayah, dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan proposal penelitian dengan judul "**Pemodelan Reaksi Kimia Antara Gas NO₂ dengan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ sebagai Sensor Berbasiskan Fungsi Kerja". Proposal ini merupakan mata kuliah wajib yang disusun sebagai salah satu persyaratan dalam menyelesaikan tugas akhir perkuliahan di Universitas Lampung.**

Penulis menyadari dalam penulisan proposal ini masih terdapat banyak kesalahan dan kekurangan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran demi perbaikan kekurangan tersebut.

> Bandar Lampung, 26 September 2023 Penulis,

Lis Dwi Andini NPM. 1917041010

SANWACANA

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT, yang telah memberi kesehatan, nikmat, karunia serta rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "Pemodelan Reaksi Kimia Antara Gas NO₂ dengan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ sebagai Sensor Berbasiskan Fungsi Kerja". Terwujudnya skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Dengan segala kerendahan hati dan rasa hormat, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

- Kedua orang tua penulis, Bapak Sugeng Triyono dan Ibu Salimah, yang telah memberikan doa dan dukungan penuh, baik moral maupun material kepada penulis untuk menyelesaikan studi.
- Bapak Dr. rer. nat. Roniyus Marjunus, S.Si., M.Si. selaku Pembimbing Utama yang telah banyak memberi bimbingan, motivasi, nasihat serta ilmunya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.
- 3. Ibu Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si. selaku Pembimbing Kedua yang telah memberikan saran, masukan dan arahan dalam penulisan skripsi ini.
- 4. Ibu Dra. Dwi Asmi, M.Si., Ph.D selaku Penguji yang telah memberikan koreksi dan masukan selama penulisan skripsi agar lebih baik lagi.
- Bapak Dr. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si., selaku Dekan FMIPA Universitas Lampung.
- Bapak Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T., selaku Ketua Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung.

- Bapak Agus Riyanto, S.Si., M.Sc. dan Bapak Arif Sartono, S.Si., M.Si., M.Eng. selaku Pembimbing Akademik yang memberikan masukan-masukan serta nasehat selama masa studi di Jurusan Fisika.
- Saudara kandung, ipar, dan keponakan penulis, Mbak Lulu, Mas Aji, Firli dan Rara, yang telah mengisi hari-hari penulis selama di rumah dan memberikan semangat untuk menyelesaikan skripsi.
- 9. M. Lathoif Romadhon selaku partner penulis yang telah menemani, membantu, dan memberikan semangat selama menjalani masa kuliah.
- 10. Sahabat-sahabat penulis Ida Nur K, Amapel Odenia, Hania Fahrani, Fidhea Pinaring, Fegi Liani, Astin Vidyasani, Lousanja Dira, dan Rani Nur Isnaini yang telah menemani perjuangan selama menempuh kuliah baik dari segi akademik maupun organisasi serta telah menjadi tempat untuk mencurahkan keluh kesah penulis. Semoga Allah SWT menjaga kami dari keburukan.
- 11. Sahabat-sahabat pimpinan Rois FMIPA Unila 2021, pimpinan BEM FMIPA Unila 2022, serta seluruh rekan-rekan organisasi yang pernah penulis ikuti, yang tidak dapat disebutkan satu per satu. Semoga Allah SWT memberikan keridhoan untuk seluruh kegiatan kami.
- 12. Kiyay, Atu, serta adik-adik seperjuangan di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung, terkhusus rekan-rekan Angkatan 2019. Terus semangat untuk apapun itu dan semoga kita semua sukses di masa depan, aamiin.

Bandar Lampung, 26 September 2023

Lis Dwi Andini

DAFTAR ISI

	Halaman
ABSTRAK	ii
ABSTRACT	ii
HALAMAN JUDUL	iii
LEMBAR PERSETUJUAN	iv
LEMBAR PENGESAHAN	v
LEMBAR PERNYATAAN	vi
RIWAYAT HIDUP	vii
МОТТО	ix
PERSEMBAHAN	x
KATA PENGANTAR	xi
SANWACANA	xii
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR GAMBAR	xvi
DAFTAR TABEL	xxiii
DAFTAR SIMBOL	xxvi
I. PENDAHULUAN	

1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Gas Nitrogen Dioksida (NO2) dan Gas Berbahaya Lainnya	6
2.2 Fungsi Kerja dan Nilai CPD	7
2.3 Interaksi Antara Gas dengan Permukaan Bahan	9
2.3.1 Proses Adsorpsi	9
2.3.2 Proses Reaksi	11
2.3.3 Proses Disosiasi	11
2.3.4 Proses Desorpsi	11

2.4 Reaksi Pendeteksian Gas NO ₂	12
2.5 Parameter Pendeteksian Gas NO ₂	12
2.6 Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆ sebagai Bahan Sensor Gas	15

III. METODE PENELITIAN

3.1 Tempat Penelitian	. 18
3.2 Alat dan Bahan	. 18
3.3 Prosedur Penelitian	. 18
3.3.1 Penyusunan Persamaan Diferensial Biasa (PDB)	. 18
3.3.2 Pengembangan Model Matematik	. 18
3.3.3 Optimasi Parameter	. 19
3.3.4 Optimasi Ulang Parameter	. 21
3.3.5 Simulasi Akhir	. 22
3.3.6 Diagram Alir	. 22

IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Penyusunan Persamaan Diferensial	27
4.2 Pendekatan Grafik Eksperimen	27
4.3 Optimasi Nilai Parameter	31
4.3.1 Optimasi Nilai Parameter pada Koefisien Arrhenius	31
4.3.2 Optimasi Nilai Parameter pada Energi Aktivasi	61
4.3.3 Optimasi Nilai Parameter pada Koefisien Lengket (Sticking Coeffic	cient)
	97
4.4 Optimasi Ulang Nilai Parameter	101
4.4.1 Optimasi Ulang Nilai Parameter pada Koefisien Arrhenius	102
4.4.2 Optimasi Ulang Nilai Parameter pada Energi Aktivasi	112
4.4.3 Optimasi Ulang Nilai Parameter pada Koefisien Lengket (Sticking	
Coefficient)	124
4.5 Simulasi Akhir	127

V. SIMPULAN DAN SARAN

5.1 \$	Simpulan	133
5.2 \$	Saran	133

DAFTAR PUSTAKA

LAMPIRAN

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 (Senft dkk., 2011)
Gambar 2.2 Grafik nilai rata-rata CPD gas NO ₂ dari data Marjunus (2018) 16
Gambar 3.1 Diagram alir optimasi parameter
Gambar 3.2 Diagram alir optimasi ulang parameter
Gambar 3.3 Diagram alir simulasi akhir penelitian
Gambar 4.1 Hasil <i>fitting</i> terhadap grafik eksperimen Marjunus (2018) 28
Gambar 4.2 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Pt} dengan lebar partisi 1×10^{12} s ⁻¹
Gambar 4.3 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Pt} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.4 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Pt} dengan lebar partisi 5×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.5 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Pt} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.6 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Pt} dengan lebar partisi 1×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.7 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Pt} dengan lebar partisi 5×10^9 s ⁻¹
Gambar 4.8 Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Pt} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹

Gambar 4.9	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Pt} dengan lebar partisi 1×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.10	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Pt} dengan lebar partisi $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$
Gambar 4.11	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Au} dengan lebar partisi 1×10^{12} s ⁻¹
Gambar 4.12	² Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Au} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.13	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Au} dengan lebar partisi 5×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.14	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Au} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.15	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Au} dengan lebar partisi 1×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.16	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Au} dengan lebar partisi 5×10^9 s ⁻¹
Gambar 4.17	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Au} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.18	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Au} dengan lebar partisi 1×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.19	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Au} dengan lebar partisi 5×10^9 s ⁻¹
Gambar 4.20	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d1Ti} dengan lebar partisi 1×10^{12} s ⁻¹
Gambar 4.21	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d1Ti} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.22	2 Hasil perbesaran grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d1Ti} dengan lebar partisi 5×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.23	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Ti} dengan lebar partisi 1×10^{12} s ⁻¹
Gambar 4.24	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Ti} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹

Gambar 4.25	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{d2Ti} dengan lebar partisi 5×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.26	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Ti} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.27	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Ti} dengan lebar partisi 1×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.28	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{f3Ti} dengan lebar partisi $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$
Gambar 4.29	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Ti} dengan lebar partisi 1×10^{11} s ⁻¹
Gambar 4.30	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Ti} dengan lebar partisi 1×10^{10} s ⁻¹
Gambar 4.31	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter v_{r3Ti} dengan lebar partisi 5×10^9 s ⁻¹
Gambar 4.32	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Pt} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.33	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Pt} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.34	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Pt} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV
Gambar 4.35	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Pt} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.36	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Pt} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.37	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Pt} dengan lebar partisi $5 \times 10-3$ eV
Gambar 4.38	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Pt} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.39	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Pt} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.40	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Pt} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV

Gambar 4.41	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Pt} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.42	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Pt} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.43	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Pt} dengan lebar partisi $5 \times 10-3$ eV
Gambar 4.44	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter <i>E</i> _{f2Au} dengan lebar partisi 1 eV
Gambar 4.45	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Au} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.46	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Au} dengan lebar partisi 5×10^{-2} eV
Gambar 4.47	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Au} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.48	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Au} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.49	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Au} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV
Gambar 4.50	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Au} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.51	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Au} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.52	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Au} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV
Gambar 4.53	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Au} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.54	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Au} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.55	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Au} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV
Gambar 4.56	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Ti} dengan lebar partisi 10^{-1} eV

Gambar 4.57	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Ti} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.58	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f2Ti} dengan lebar partisi 5 × 10 ⁻³ eV
Gambar 4.59	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Ti} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.60	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Ti} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.61	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r2Ti} dengan lebar partisi 5 × 10 ⁻³ eV
Gambar 4.62	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Ti} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.63	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Ti} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.64	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Ti} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV
Gambar 4.65	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{r3Ti} dengan lebar partisi 10^{-1} eV
Gambar 4.66	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Ti} dengan lebar partisi 10^{-2} eV
Gambar 4.67	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter E_{f3Ti} dengan lebar partisi 5×10^{-3} eV
Gambar 4.68	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter S_{02Au} dengan lebar partisi 10^{-3} eV
Gambar 4.69	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter S_{02Au} dengan lebar partisi 10^{-4} eV
Gambar 4.70	Grafik rata-rata <i>error CPD</i> (V) pada parameter S_{02Au} dengan lebar partisi 5×10^{-5} eV
Gambar 4.71	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang v_{d2Pt} .
Gambar 4.72	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang v_{f3Pt} .

Gambar 4	.73	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang v _{r3Pt} . 103
Gambar 4	.74	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	ılang v _{d2Au} . 104
Gambar 4	.75	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ι	ılang v _{f3Au} . 105
Gambar 4	.76	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	ılang v _{r3Au} . 106
Gambar 4	.77	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	ulang v _{d1Ti} . 107
Gambar 4	.78	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	ulang v _{d2Ti} . 108
Gambar 4	.79	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang v _{f3Ti} . 109
Gambar 4	.80	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang <i>v</i> _{r3Ti} . 110
Gambar 4	.81	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang <i>E</i> _{f2Pt} . 111
Gambar 4	.82	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang <i>E</i> _{r2Pt} . 112
Gambar 4	.83	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang <i>E</i> _{f3Pt} . 113
Gambar 4	.84	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi	ulang <i>E</i> _{r3Pt} . 114
Gambar 4	.85	Brafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	lang <i>E</i> _{f2Au} . 115
Gambar 4	.86	Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	lang E_{r2Au} .
Gambar 4	.87	brafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	lang E_{f3Au} .
Gambar 4	.88	Brafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi u	lang E_{r3Au} .

Gambar 4.89 Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang E_{f2Ti}
Gambar 4.90 Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang E_{r2Ti} .
Gambar 4.91 Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang E_{f3Ti} .
Gambar 4.92 Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang E_{r3Ti} .
Gambar 4.93 Grafik perbandingan hasil optimasi awal dan optimasi ulang S_{02Au} .
Gambar 4.94 Grafik perbandingan <i>CPD</i> (V) antara Eksperimen Marjunus, <i>fitting</i> kurva Marjunus (2018) dan hasil simulasi pada bahan Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆ .
Gambar 4.95 Grafik hunian/coverage (θ) gas NO ₂ pada permukaan bahan Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆
Gambar 4.96 Grafik hunian/ <i>coverage</i> (θ) gas O ₂ pada permukaan bahan Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆
Gambar 4.97 Grafik hunian/coverage (θ) gas NO pada permukaan bahan Pt ₈₀ Au ₁₄ Ti ₆
Cambar 4.08 Grafik hunian/covergae (A) atom O nada permukaan hahan

DAFTAR TABEL

Halaman

Tabel 2.1 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Platinum (Pt)
Tabel 2.2 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Aurum (Au). 14
Tabel 2.3 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Titanium (Ti). 15
Tabel 3.1 Parameter yang belum diketahui dan nilai tebakan awalnya. 20
Tabel 4.1 Nilai t, m, c, dan R-Square (COD) dari setiap trend fitting grafik
Marjunus (2018) 13
Tabel 4.2 Rekapitulasi nilai parameter hasil optimasi awal
Tabel 4.3 Rekapitulasi nilai akhir parameter hasil optimasi
Tabel 4.4 Rekapitulasi nilai akhir semua parameter pada simulasi akhir

DAFTAR SIMBOL

Simbol	Keterangan	Satuan
$E_{ m F}$	Energi Fermi elektron	eV
$E_{ m fl}$	Energi aktivasi penyerapan O ₂	eV
E_{r1}	Energi aktivasi pelepasan O2	eV
E_{f2}	Energi aktivasi penyerapan NO ₂	eV
$E_{\rm r2}$	Energi aktivasi pelepasan NO2	eV
E_{f3}	Energi aktivasi reaksi maju interaksi O dengan NO2	eV
E _{r3}	Energi aktivasi reaksi mundur interaksi O dengan NO ₂	eV
$E_{ m vac}$	Energi vakum	eV
$F_{\rm NO2}$	Fluks molekul NO ₂	$m^{-2}s^{-1}$
F_{O2}	Fluks molekul O ₂	$m^{-2}s^{-1}$
K	Konstanta Boltzman (1,38×10 ⁻²³)	JK ⁻¹
М	Massa molekul gas	Kg
$v_{ m d1Pt}$	Koefisien Arrhenius pelepasan O2 pada bahan Pt	s ⁻¹
$v_{ m d2Pt}$	Koefisien Arrhenius pelepasan NO2 pada bahan Pt	s ⁻¹
Uf3Pt	Koefisien Arrhenius reaksi maju interaksi O dengan NO2 pada bahan Pt	s ⁻¹

Simbol	Keterangan	Satuan
$v_{ m r3Pt}$	Koefisien Arrhenius reaksi mundur interaksi O dengan NO ₂ pada bahan Pt	s ⁻¹
v_{d1Au}	Koefisien Arrhenius pelepasan O2 pada bahan Au	s ⁻¹
$\boldsymbol{v}_{ ext{d2Au}}$	Koefisien Arrhenius pelepasan NO2 pada bahan	s ⁻¹
	Au	
$\boldsymbol{v}_{\mathrm{f3Au}}$	Koefisien Arrhenius reaksi maju interaksi O	s ⁻¹
	dengan NO ₂ pada bahan Au	
$\boldsymbol{v}_{\mathrm{r}3\mathrm{Au}}$	Koefisien Arrhenius reaksi mundur interaksi O	s ⁻¹
	dengan NO ₂ pada bahan Au	
$oldsymbol{v}_{ m d1Ti}$	Koefisien Arrhenius pelepasan O2 pada bahan	s ⁻¹
	Ti	
$oldsymbol{v}_{ m d2Ti}$	Koefisien Arrhenius pelepasan NO2 pada bahan	s ⁻¹
	Ti	
$oldsymbol{v}_{ m f3Ti}$	Koefisien Arrhenius reaksi maju interaksi O	s ⁻¹
	dengan NO2 pada bahan Ti	
$\boldsymbol{v}_{ m r3Ti}$	Koefisien Arrhenius reaksi mundur interaksi O	s ⁻¹
	dengan NO ₂ pada bahan Ti	
r _{f1Pt}	Laju reaksi penyerapan O2 pada bahan Pt	Atom/s
<i>r</i> f2Pt	Laju reaksi penyerapan NO2 pada bahan Pt	Atom/s
<i>r</i> f3Pt	Laju reaksi maju interaksi O dan NO2 pada	Atom/s
	bahan Pt	
<i>r</i> _{r1Pt}	Laju reaksi pelepasan O2 pada bahan Pt	Atom/s
r _{r2Pt}	Laju reaksi pelepasan NO2 pada bahan Pt	Atom/s
<i>r</i> r3Pt	Laju reaksi mundur interaksi O dan NO2 pada	Atom/s
	bahan Pt	
r _{r2Pt}	Laju reaksi pelepasan NO2 pada bahan Pt	Atom/s
r _{r3Pt}	Laju reaksi mundur interaksi O dan NO2 pada	Atom/s
	bahan Pt	
S_{01Pt}	Koefisien lengket penyerapan O2 pada bahan Pt	-

Simbol	Keterangan	Satuan	
S _{02Pt}	Koefisien lengket penyerapan NO2 pada bahan	-	
	Pt		
r _{f1Au}	Laju reaksi penyerapan O2 pada bahan Au	Atom/s	
r _{f2Au}	Laju reaksi penyerapan NO2 pada bahan Au	Atom/s	
rf3Au	Laju reaksi maju interaksi O dan NO2 pada	Atom/s	
	bahan Au		
<i>r</i> _{r1Au}	Laju reaksi pelepasan O2 pada bahan Au	Atom/s	
r _{r2Au}	Laju reaksi pelepasan NO2 pada bahan Au	Atom/s	
r _{r3Au}	Laju reaksi mundur interaksi O dan NO2 pada	Atom/s	
	bahan Au		
r _{r2Au}	Laju reaksi pelepasan NO2 pada bahan Au	Atom/s	
r _{r3Au}	Laju reaksi mundur interaksi O dan NO2 pada	Atom/s	
	bahan Au		
$S_{01\mathrm{Au}}$	Koefisien lengket penyerapan O2 pada bahan	-	
	Au		
S_{02Au}	Koefisien lengket penyerapan NO ₂ pada bahan	-	
	Au		
r _{f1Ti}	Laju reaksi penyerapan O ₂ pada bahan Ti	Atom/s	
r _{f2Ti}	Laju reaksi penyerapan NO2 pada bahan Ti	Atom/s	
<i>r</i> f3Ti	Laju reaksi maju interaksi O dan NO2 pada	Atom/s	
	bahan Ti		
<i>r</i> _{r1Ti}	Laju reaksi pelepasan O2 pada bahan Ti	Atom/s	
r _{r2Ti}	Laju reaksi pelepasan NO2 pada bahan Ti	Atom/s	
r _{r3Ti}	Laju reaksi mundur interaksi O dan NO2 pada	Atom/s	
	bahan Ti		
r _{r2Ti}	Laju reaksi pelepasan NO2 pada bahan Ti	Atom/s	
r _{r3Ti}	Laju reaksi mundur interaksi O dan NO2 pada	Atom/s	
	bahan Ti		
$S_{01\mathrm{Ti}}$	Koefisien lengket penyerapan O2 pada bahan Ti	-	
$S_{02\text{Ti}}$	Koefisien lengket penyerapan NO ₂ bahan Ti	-	

Simbol	Keterangan	Satuan
Т	Suhu	Kelvin
σ	Kerapatan atom	Atom/m ²
θ	Hunian/coverage	ML (Mono Layer)
$ heta_{ m O}$	Hunian/coverage O	ML (Mono Layer)
$ heta_{ m O2}$	Hunian/coverage O ₂	ML (Mono Layer)
$ heta_{ m NO}$	Hunian/coverage NO	ML (Mono Layer)
$ heta_{ m NO2}$	Hunian/coverage NO ₂	ML (Mono Layer)

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Kepadatan penduduk di Indonesia terutama di kota-kota besar lebih tinggi dibandingkan dengan di pedesaan. Hal ini dikarenakan adanya berbagai macam kegiatan masyarakat. Banyaknya aktivitas dalam memenuhi kebutuhan sehari-hari mendorong masyarakat melakukan berbagai upaya untuk keberlangsungan hidupnya. Salah satunya dengan memanfaatkan teknologi dan peralatan yang menunjang mobilitas atau untuk berpindah dari satu tempat ke tempat yang lain. Dewasa ini, masyarakat hampir keseluruhan memiliki kendaraan pribadi, baik kendaraan roda empat maupun kendaraan roda dua yang semakin hari semakin bertambah banyak jumlahnya. Bahkan bisa dilihat di lingkungan sekitar, satu orang tidak hanya memiliki satu kendaraan melainkan bisa memiliki dua, tiga atau lebih kendaraan pribadi. Banyaknya penggunaan kendaraan yang menggunakan bahan bakar gas alam, mendorong adanya pencemaran udara yang akan berdampak pada menurunnya kualitas udara serta kesehatan manusia.

Pada pencemaran yang diakibatkan oleh gas buangan hasil pembakaran bahan bakar, terdapat gas Natrium Oksida (NOx) yang bertebaran bebas di jalan lalu lintas. Persentase pencemaran udara oleh gas NOx maupun gas NO₂ berasal dari hasil buangan bahan bakar kendaraan dengan sumbangan 40%, dari proses pembakaran di pabrik sebesar 50%, dari pembakaran sampah padat dan pembakaran hutan sebanyak 10% (Yuliasari dkk, 2004). Nitrogen Oksida (NOx) merupakan gas di atmosfer yang sebagian besarnya terdiri dari nitrit oksida (NO), nitrogen dioksida (NO₂) dan jenis oksida lainnya dalam jumlah yang lebih sedikit (Dwirahmawati dkk., 2018). Gas NOx dapat bereaksi dengan senyawa lain yang

ada di atmosfer untuk membentuk partikel kecil yang dapat membahayakan kesehatan manusia (Indrawati dkk., 2019). Baik gas NO maupun gas NO₂ keduanya merupakan gas yang beracun bagi manusia. Gas NO saat mencemari udara secara kasat mata sulit diamati karena gas tersebut tidak berwarna dan tidak berbau. Sedangkan gas NO₂ merupakan gas yang berwarna coklat kemerahmerahan dan berbau tajam (Farikah dkk., 2018). Dalam hal ini, gas NO₂ lebih berbahaya dari gas NO. Adapun gas NO₂ dalam konsentrasi tinggi terhadap lingkungan terlihat ketika udara di lingkungan berwarna kecoklatan. Sehingga menurut Riviwanto dan Fajar dalam penelitiannya (2017), udara tersebut dapat merusak saluran pernapasan, kerusakan jantung, iritasi pada paru-paru dan mata, serta kerusakan pada hati dan ginjal. Pencemaran udara semacam ini jika tidak ditangani secara serius akan membahayakan kesehatan bahkan sampai kematian manusia maupun makhluk hidup lainnya yang menjadi taruhannya.

Dalam menyikapi hal tersebut, telah banyak peneliti yang mencari solusi terkait dengan pencegahan pencemaran udara yang disebabkan oleh gas-gas yang masuk ke atmosfer, gas-gas tersebut diantaranya karbon monoksida (CO), sulfur dioksida (SO₂), nitrogen dioksida (NO₂), serta gas klor dan flour (Puspitarini dan Riva, 2022). Para peneliti menggunakan sensor gas sebagai salah satu upaya untuk mengurangi pencemaran udara yang terjadi dengan mendeteksi adanya gas atau konsentrasi gas pada suatu tempat. Sensor gas yang digunakan dapat dikatakan sensor yang baik apabila memiliki nilai sensitivitas yang tinggi, selektivitas tinggi, stabilitas tinggi, rasio signal/noise tinggi, energi konsumsinya rendah, masanya yang ringan, dan harga yang murah (Marjunus, 2019). Penelitian terkait sensor gas natrium dioksida (NO2) telah banyak dilakukan dengan berbagai macam metode baik dengan simulasi maupun pendekatan terhadap senyawa lain sebagai reaktor adanya gas pencemar seperti gas NO2. Salah satunya berdasarkan penelitian Widodo (2014) bahwa sensor gas dengan menggunakan lapisan aktif nanopartikel In₂O₃ (Indium Oksida) sebagai bahan material sensor mampu mendeteksi adanya gas NO₂. Gas NO₂ berhasil dideteksi pada konsentrasi 500 ppb - 10 ppm yang ditunjukan dengan naik turunnya kurva pada grafik pengukuran resistansi pada suhu 150°C karena adanya reaksi dengan lapisan sensitif (In₂O₃).

Banyaknya penelitian mengenai sensor gas ini juga mendorong penulis untuk mempelajari lebih lanjut terkait hasil penelitian sebelumnya dengan cara melakukan simulasi atau pemodelan untuk mendapatkan data atau informasi baru. Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan oleh Marjunus (2018), telah didapatkan data nilai *CPD* (*Contact Potential Difference*) pada gas NO₂ (5 ppm) dengan sensor berbahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ senilai (50±10) mV. Hal ini dapat didekati dengan pemodelan reaksi kimia yang bertujuan untuk mempelajari mekanisme reaksi yang mungkin terjadi dari desain yang dibuat pada penelitian sebelumnya, melakukan simulasi reaksi dalam komputer serta memungkinkan untuk mendapatkan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan. Namun dengan telah dilakukannya studi literatur, belum ditemukan adanya pemodelan reaksi kimia antara gas NO₂ dengan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ sebagai sensor gas yang berbasiskan fungsi kerja.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan dalam penelitian ini adalah :

- Bagaimana simulasi reaksi kimia gas dalam proses pendeteksian gas NO₂ pada permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆?
- Bagaimana proses optimasi untuk mendapatkan parameter-parameter yang belum diketahui pada reaksi pendeteksian gas NO₂ pada permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆?
- 3. Apakah terdapat perbandingan nilai *Contact Potential Difference (CPD)* antara hasil eksperimen dengan simulasi?
- Bagaimana hasil prediksi hunian atom atau molekul gas di permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah :

- Penelitian ini hanya akan mendeteksi gas NO₂ dengan menggunakan sensor gas berbahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆.
- 2. Hasil nilai *Contact Potential Difference (CPD)* sebagai pembanding antara eksperimen dan simulasi.
- 3. Menggunakan komputer yang telah memiliki *software Matrix Laboratory* (MatLab).

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan diadakannya penelitian ini adalah :

- Mengetahui simulasi reaksi kimia gas dalam proses pendeteksian gas NO₂ pada permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆.
- Mengetahui proses optimasi untuk mendapatkan parameter-parameter yang belum diketahui pada reaksi pendeteksian gas NO₂ pada permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆.
- 3. Mengetahui adanya perbandingan nilai *Contact Potential Difference (CPD)* antara hasil eksperimen dengan simulasi.
- Mengetahui hasil hunian atom atau molekul gas di permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat dilakukannya penelitian ini adalah sebagai media untuk mendapatkan informasi dan pengetahuan bagi penulis maupun pembaca terkait dengan pemodelan reaksi kimia terhadap pendeteksian gas NO₂ di lingkungan dengan menggunakan sensor gas berbahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆. Hasil dari penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi dan berkontribusi bagi pengembangan penelitian lain sehingga menghasilkan suatu karya atau produk yang dapat

bermanfaat untuk mengurangi pencemaran udara yang diakibatkan adanya gas nitrogen dioksida (NO_2).

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Gas Nitrogen Dioksida (NO2) dan Gas Berbahaya Lainnya

Gas nitrogen oksida (NOx) adalah senyawa gas yang terdapat di udara bebas atau di atmosfer yang sebagian besar terdiri atas nitrit oksida (NO) dan nitrogen dioksida (NO₂) serta berbagai jenis oksida dalam jumlah yang lebih sedikit. Gas NO dan gas NO₂ mempunyai sifat yang berbeda serta keduanya sangat berbahaya bagi kesehatan. Gas NO yang mencemari udara, secara kasat mata sulit diamati karena gas tersebut tidak berwarna dan tidak berbau. Sedangkan gas NO₂ bila mencemari udara mudah diamati karena baunya yang sangat menyengat dan warnanya merah kecoklatan. Sifat racun (toksisitas) gas NO₂ lebih kuat atau lebih besar dari pada toksisitas gas NO. Adanya cemaran gas NO₂ dapat menyebabkan terjadinya hujan asam. Hal ini karena gas NO₂ di lapisan troposfer bertemu dengan uap air akan membentuk kesetimbangan yang menghasilkan hujan asam (Darmawan, 2018). Pencemaran gas NO₂ di atmosfer akan mengalami reaksi yang menghasilkan gas dinitrogen pentaoksida (N_2O_5) dengan adanya cahaya matahari. Gas N₂O₅ yang berada di kawasan dengan kelembaban udara tinggi akan menyebabkan terjadinya pembentukan HNO_3 atau gas amonia (Male dkk., 2021). Adanya reaksi tersebut akan semakin memicu terjadinya hujan asam. Selain itu, gas NO₂ juga berperan terhadap polusi partikel dan deposit asam serta prekursor ozon yang merupakan unsur pokok dari kabut fotokimia.

Selain gas NO₂, sumber polusi udara yang dominan di lingkungan perkotaan berupa sulfur dioksida (SO₂), nitrogen oksida (NO), karbon monoksida (CO), gas ozon (O₃), *SPM (Suspended Particulate Matter)* dan Pb (timbal). Peningkatan konsentrasi zat SO₂, *SPM*, NO₂ dan O₃ sangat beresiko terhadap kesehatan masyarakat bahkan berhubungan dengan tingginya angka kematian di negara-

negara padat penduduk dan negara-negara berkembang (Male dkk., 2021). Gas NO₂ sebagai polutan udara sangat berbahaya bagi lingkungan. Menurut Nofrianti (2017), pencemaran yang diakibatkan oleh gas NO₂ dapat mengakibatkan infeksi pada saluran pernapasan seperti pada paru-paru (sangat peka terhadap gas NO₂), menyebabkan gangguan sistem saraf, dan apabila keracunan gas NO₂ secara terus-menerus dapat mengakibatkan kelumpuhan.

2.2 Fungsi Kerja dan Nilai CPD

Fungsi kerja (ϕ) menurut Garg dkk. (2014) merupakan energi yang diperlukan untuk menghilangkan elektron dari tingkat yang tertinggi pengisian elektron dalam distribusi Fermi dari suatu padatan ke ruang hampa. Fungsi kerja (ϕ) juga dapat diartikan sebagai selisih antara energi Fermi elektron (E_F, dalam eV) dengan energi vakum (E_{vac}, dalam eV), seperti ditunjukkan pada Persamaan 2.1 dan Gambar 2.1 (Senft dkk., 2011).

$$\phi = E_{\rm F} - E_{\rm vac} \tag{2.1}$$



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).

Pada kondisi ketika gas pengoksidasi mendekati bahan, gas tersebut akan mengambil beberapa elektron yang mengakibatkan berkurangnya energi Fermi. Hal ini terlihat pada gambar 2.1(a) di atas, tingkat energi Fermi berkurang sehingga fungsi kerja dari suatu bahan akan meningkat. Namun pada kondisi seperti pada gambar 2.1(c), kondisi berbalik menjadi apabila gas pereduksi mendekati permukaan dari bahan, maka fungsi kerja bahan (ϕ dalam eV) akan berubah seperti ditunjukkan pada Persamaan 2.2.

$$\Delta \phi = E_{\rm F}^{\rm selesai} - E_{\rm F}^{\rm sebelum} \tag{2.2}$$

Nilai fungsi kerja (ϕ) yang berubah ini dapat dikonversi menjadi sinyal sensor yang berupa *CPD* (*Contact Potential Difference*). Pengukuran *CPD* sering digunakan karena menjadi salah satu metode paling sederhana dalam penentuan fungsi kerja bahan (Novikov dan Timoshenkov, 2003). Prinsip *CPD* didasarkan pada prinsip mengukur potensi listrik pada permukaan sampel yang dipelajari. Pada *CPD* gelombang merambat ke permukaan dan menyebabkan peningkatan jumlah titik kontak dan bidang kontak nyata antara permukaan bahan dan sensor, akibat dari adanya kontak tersebut menyebabkan perubahan perbedaan potensial kontak antara sensor dan bahan. Maka dalam hal ini hubungan fungsi kerja dengan *CPD* dapat dituliskan pada Persamaan 2.3 (Vilitis dkk., 2016) berikut.

$$CPD = \frac{\Delta\Phi}{|e|} \tag{2.3}$$

Persamaan 2.3 di atas menunjukkan *CPD* dihasilkan dari perbandingan perubahan fungsi kerja bahan $\Delta \phi$ terhadap gas yang datang dengan muatan elektron *e*.

2.3 Interaksi Antara Gas dengan Permukaan Bahan

Pada interaksi antara gas dengan permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ terdapat beberapa proses yang terjadi. Proses-proses tersebut berupa adsorpsi, reaksi, disosiasi, dan desorpsi.

2.3.1 Proses Adsorpsi

Ketika suatu bahan atau material dipapari oleh suatu gas, akan terjadi beberapa proses kimia, salah satunya adalah proses penyerapan. Proses penyerapan atau adsorpsi dapat mempengaruhi fungsi kerja bahan. Proses adsorpsi ini terjadi secara fisis dan kimia. Secara fisis biasanya terjadi pada posisi yang jauh dari permukaan bahan pada suhu yang rendah. Molekul terserap akan terperangkap bersama energi ikat adsorpsi fisis (ΔE_p , dalam eV) dalam dinding kuantum. Adsorpsi fisis terbentuk dari gaya elektrostatik van der Waals lemah dengan ΔE_p sekitar 0,0021 eV sampai dengan 0,031 eV. Sedangkan adsorpsi secara kimia biasanya terjadi pada posisi yang dekat dari permukaan bahan pada suhu yang tinggi. Energi ikat adsorpsi kimia (ΔE_c , dalam eV) biasanya lebih tinggi dari energi ikat adsorpsi fisis. Dalam membentuk ikatan kimia diperlukan sejumlah energi (E_a , dalam eV) yang disebut energi absorpsi. Molekul terserap akan berubah saat proses adsorpsi kimia, misalnya molekul X₂ dapat terpisah dengan adanya energi disosiasi (E_{diss} , dalam eV) dan terserap sebagai dua atom X (Roberts, 1978).

Ketika suatu gas mendatangi suatu permukaan bahan, gas selanjutnya akan menghuni permukaan bahan tersebut, sehingga menghasilkan nilai hunian/*coverage* (θ dalam satuan *Mono Layer* atau ML). Laju perubahan nilai hunian/*coverage* (θ) ini dapat dihitung dengan mencari laju penyerapan seperti yang ditunjukkan pada persamaan 2.4 (Nix, 2014) berikut.

$$r_a = \frac{dN_{ads}}{dt} \tag{2.4}$$

dengan N_{ads} merupakan atom atau molekul yang terserap di permukaan bahan, yang dapat dituliskan kembali pada persamaan 2.5 (Nix, 2014).

$$N_{\rm ads} = \sigma \theta \tag{2.5}$$

dengan σ adalah kerapatan atom di permukaan bahan (atom/m²) dan θ adalah hunian/*coverage* dari gas pada permukaan bahan. Sehingga pada persamaan 2.4 dapat dituliskan kembali menjadi persamaan 2.6 (Nix, 2014) berikut.

$$r_a = \frac{d\sigma\theta}{dt} \tag{2.6}$$

Fluks gas yang datang ke permukaan bahan (F, dalam molekul m⁻² s⁻¹) yang didapatkan dari Hukum Hertz-Knudsen mempengaruhi r_a . Fluks F dapat dituliskan_pada persamaan_2.7 (Yan dan Xu, 2010).

$$F = \frac{P}{\sqrt{2\pi m kT}} \tag{2.7}$$

dengan *P* adalah tekanan parsial gas (dalam Pa), *m* adalah massa molekul gas (dalam kg), *k* adalah konstanta Boltzmann ($1,38 \times 10^{-23}$ JK⁻¹), *T* adalah suhu (dalam K). Koefisien lengket juga terdapat pada permukaan bahan (*S*, tanpa satuan) terhadap suatu ditunjukkan pada persamaan 2.8 (Yan dan Xu, 2010) berikut.

$$S=S_0 (1-\theta)^Z \exp(-\frac{E_a}{kT})$$
(2.8)

S₀ merupakan koefisien lengket awal atau koefisien lengket ketika cakupan masih kosong atau belum ada hunian/*coverage* (θ), *z* adalah faktor 1 untuk gas yang tidak terdisosiasi dan 2 untuk gas yang terdisosiasi. Sehingga jika pada persamaan 2.7 dan 2.8 digabungkan, maka menjadi persamaan 2.9 sebagai laju perubahan hunian/*coverage* (θ) untuk gas pada permukaan ketika proses penyerapan.

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{S_0(1-\theta)^Z P}{\sigma \sqrt{2\pi m k T}} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right)$$
(2.9)

2.3.2 Proses Reaksi

Ketika suatu atom atau molekul gas A terserap bereaksi dengan atom atau molekul gas B sehingga menjadi molekul AB pada suatu permukaan bahan, berdasarkan mekanisme Langmuir-Hinshelwood, maka laju hunian/*coverage* (θ) dapat dihitung dengan persamaan 2.10 (Somorjai dan Li, 2010).

$$\frac{d\theta_{AB}}{dt} = v_r \exp(-\frac{E_r}{kT})\theta_A \theta_B$$
(2.10)

dengan v_r adalah koefisien Arrhenius yang menentukan frekuensi reaksi A dan B (dalam satuan reaksi/s), E_r adalah energi aktivasi dari reaksi antara atom molekul gas A dan gas B (dalam Ev), θ_A dan θ_B adalah hunian/*coverage* dari gas A dan gas B (dalam ML).

2.3.3 Proses Disosiasi

Dalam interaksi antara gas dengan permukaan terdapat kemungkinan terjadinya proses disosiasi. Apabila molekul gas terserap (misal AB) terdisosiasi menjadi A dan B, maka perubahan laju hunian/*coverage* (θ) gas A dapat dihitung dengan persamaan 2.11 (Hahn, 2002).

$$\frac{d\theta_{\rm A}}{dt} = v_{\rm diss} \exp(-\frac{E_{\rm diss}}{kT})\theta_{\rm AB}$$
(2.11)

dengan v_{diss} adalah koefisien Arrhenius yang menentukan frekuensi AB (dalam disosiasi/s), E_{diss} adalah energi aktivasi dari atom atau molekul gas AB (dalam eV), dan θ_{AB} adalah hunian/*coverage* dari gas AB (dalam ML).

2.3.4 Proses Desorpsi

Ketika molekul gas terserap akan terdesorpsi atau dilepaskan kembali karena adanya energi desorpsi (E_d dalam eV), maka laju perubahan hunian/*coverage* (θ) dari atom atau molekul dapat dihitung menggunakan persamaan 2.12 (Senft, 2009).

$$\frac{d\theta}{dt} = v_{\rm d} \exp(-\frac{E_{\rm d}}{kT})\theta \tag{2.12}$$

dengan v_d adalah koefisien Arrhenius yang menentukan frekuensi dari proses desorpsi AB (desorpsi/s).

2.4 Reaksi Pendeteksian Gas NO₂

Dalam penelitian ini proses pendeteksian gas NO_2 menggunakan reaksi penyerapan oksigen, reaksi penyerapan NO_2 dan reaksi antara kedua gas tersebut. Ketika permukaan bahan terkena udara, molekul oksigen akan terserap dan membentuk anion oksigen (O_2 (s)) dengan menangkap elektron dari pita konduksi. Selanjutnya ketika bahan terkena gas NO_2 , gas tersebut akan terserap langsung pada permukaan bahan. Pada proses ini konsentrasi elektron di permukaan bahan menjadi berkurang. Setelah kedua gas terserap, anion oksigen (O_2 (s)) akan terurai menjadi O yang selanjutnya berinteraksi dengan gas NO_2 di permukaan bahan. Reaksi-reaksi tersebut dapat dituliskan pada persamaan 2.13 (Senft dkk., 2012), persamaan 2.14 (Prayudi, 2003) dan persamaan 2.15 (Sonker, 2016) berikut.

Penyerapan O₂ :
$$O_{2(g)} + 2S \rightleftharpoons 2O_{(s)}$$
 (2.13)

Penyerapan NO ₂	: $NO_{2(g)}+S \rightleftharpoons NO_{2(s)}$	(2.14)

Reaksi O dan NO₂ : $O_{(s)}+NO_{2(s)} \rightleftharpoons O_{2(s)}+NO_{(s)}$ (2.15)

Reaksi antara gas O_2 dan NO_2 menghasilkan pengurangan konsentrasi elektron pada permukaan bahan dan menyebabkan peningkatan tahanan material.

2.5 Parameter Pendeteksian Gas NO₂

Terdapat tiga parameter dalam pendeteksian gas NO_2 dalam penelitian ini, yaitu koefisien lengket (*sticking coefficient*), koefisien Arrhenius dan energi aktivasi. Koefisien lengket (S_0) diartikan sebagai perbandingan antara partikel yang terikat

dengan permukaan yang mengenai permukaan bahan. Koefisien Arrhenius (v) merupakan pengaruh perubahan suhu yang menunjukkan laju reaksi yang terjadi, sedangkan energi aktivasi merupakan energi minimum yang digunakan untuk menjalankan suatu reaksi yang biasanya berasal dari energi termal. Ketiga parameter tersebut dibutuhkan pada setiap reaksi maju (*forward*) dan reaksi mundur (*reverse*).

Dalam penelitian ini menggunakan reaksi yang telah dituliskan pada persamaan (2.13), (2.14) dan (2.15). Ketiga reaksi tersebut memiliki nilai parameterparameter reaksi maju (*forward*) dan mundur (*reverse*) seperti yang telah dijelaskan. Dari studi literatur yang telah dilakukan, nilai parameter untuk reaksi gas dengan permukaan Platinum (Pt) dapat dilihat pada Tabel 2.1. Dari reaksi persamaan 2.13 dengan permukaan Pt, nilai koefisien lengketnya adalah 0,07 × $\frac{300}{T}$ dan nilai koefisien Arrhenius 8,0515×10¹² (Behrendt, 1999). Energi aktivasi pada reaksi ini adalah 0,53 eV untuk reaksi maju (Matsuda dan Harada, 2005) dan 2,20966-0,622 θ_0 eV untuk reaksi mundur (Behrendt, 1999). Reaksi antara persamaan 2.14 dengan permukaan Pt memiliki nilai koefisien lengket sebesar 0.97 (Rankovic dkk., 2010). Sedangkan nilai koefisien Arrhenius (v_{d2Pt}) dan energi aktivasinya (E_{f2Pt} dan E_{r2Pt}) belum diketahui. Reaksi antara persamaan 2.15 dengan permukaan Pt nilai koefisien Arrhenius (v_{r3Pt} dan v_{r3P}) dan energi aktivasinya (E_{f3Pt} dan E_{r3Pt}) belum diketahui.

Reaksi	S ₀ dan Koefisien Arrhenius (s ⁻¹)		us (s ⁻¹) Energi Aktivasi (eV)	
	Reaksi Maju	Reaksi Mundur	Reaksi Maju	Reaksi Mundur
	(Forward)	(Reverse)	(Forward)	(Reverse)
(2.13)	$S_{01Pt} =$	$v_{d1Pt} =$	<i>E</i> _{f1Pt} =0,53	$E_{r1Pt}=2,20966-$
	$0,07 \times \frac{300}{T}$	8,0515×10 ¹²		0,622θ ₀
(2.14)	$S_{02Pt}=0,97$	$v_{ ext{d2Pt}}$ = -	$E_{\rm f2Pt}$ = -	$E_{r2Pt}=$ -
(2.15)	v_{f3Pt} = -	$v_{r3Pt} = -$	$E_{\rm f3Pt}$ = -	$E_{r3Pt}=$ -

Tabel 2.1 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Platinum (Pt).

Table 2.2 menunjukkan reaksi antara gas dengan permukaan bahan Aurum (Au). Reaksi persamaan 2.13 dengan permukaan Au nilai koefisien lengketnya adalah 0,005 (Linsmeier dan Wanner, 2000) dan nilai koefisien Arrhenius 1×10^{11} (Gottfried dkk., 2002). Energi aktivasi pada reaksi ini adalah 2,17 eV untuk reaksi maju (Chester dan Somorjai, 1975) dan 1,6 Ev untuk reaksi mundur (Canning dkk., 1984). Reaksi antara persamaan 2.14 dengan permukaan Au nilai koefisien lengket (S_{02Au}), koefisien Arrhenius (v_{d2Au}), dan energi aktivasinya (E_{f2Au} dan E_{r2Au}) belum diketahui. Reaksi antara persamaan 2.15 dengan permukaan Au nilai koefisien Arrhenius (v_{f3Au} dan v_{f2Au}) dan energi aktivasinya (E_{f3Au} dan E_{r3Au}) belum diketahui.

Reaksi	S ₀ dan Koefisien Arrhenius (s ⁻¹)		Energi Al	ktivasi (eV)
	Reaksi Maju	Reaksi Mundur	Reaksi Maju	Reaksi
	(Forward)	(Reverse)	(Forward)	Mundur
				(Reverse)
(2.13)	$S_{01Au}=0,005$	$v_{d1Au}=1\times 10^{11}$	$E_{f1Au}=2,17$	$E_{r1Au}=1,6$
(2.14)	$S_{02Au} = -$	$v_{ m d2Au}$ = -	$E_{\rm f2Au}$ = -	$E_{r2Au} = -$
(2.15)	$v_{\rm f3Au}$ = -	$v_{r3Au} = -$	$E_{\rm f3Au}$ = -	$E_{r3Au} = -$

Tabel 2.2 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Aurum (Au).

Table 2.3 menunjukkan reaksi antara gas dengan permukaan bahan Titanium (Ti). Reaksi persamaan 2.13 dengan permukaan Ti nilai koefisien lengketnya adalah 0,62 (Koval dkk., 2016) dan nilai koefisien Arrhenius belum diketahui. Energi aktivasi pada reaksi ini adalah 1,15 eV untuk reaksi maju (Niemeyer dkk., 2002) dan 0,152 eV untuk reaksi mundur (He dkk., 2014). Reaksi antara persamaan 2.14 dengan permukaan Ti nilai koefisien lengket 0,001 (Heikes dkk., 1983). Sedangkan koefisien Arrhenius (v_{d1Ti} dan v_{d2Ti}) dan energi aktivasinya (E_{f2Ti} dan E_{r2Ti}) belum diketahui. Reaksi antara persamaan 2.15 dengan permukaan Au nilai koefisien Arrhenius (v_{f3Ti} dan v_{r3Ti}) dan energi aktivasinya (E_{f3Ti} dan E_{r3Ti}) belum diketahui.

Reaksi	S ₀ dan Koefisien Arrhenius (s ⁻¹)		Energi Al	ctivasi (eV)
	Reaksi Maju	Reaksi Mundur	Reaksi Maju	Reaksi Mundur
	(Forward)	(Reverse)	(Forward)	(Reverse)
(2.13)	$S_{01Ti}=0,62$	$v_{\rm d1Ti}$ = -	$E_{\rm f1Ti} = 1,15$	$E_{r1Ti}=0,152$
(2.14)	$S_{02\text{Ti}}=0,001$	$v_{d2Ti} = -$	$E_{\rm f2Ti}$ = -	$E_{\rm r2Ti}$ = -
(2.15)	$v_{\rm f3Ti}$ = -	v_{r3Ti} = -	$E_{\rm f3Ti}$ = -	$E_{\rm r3Ti}$ = -

Tabel 2.3 Parameter reaksi gas dengan permukaan bahan Titanium (Ti).

Dari data yang ditunjukkan pada Tabel 2.1 - 2.3, terdapat beberapa parameter yang belum diketahui nilainya. Untuk mendapatkan nilai dari parameter tersebut maka diperlukan proses optimasi.

2.6 Pt₈₀Au₁₄Ti₆ sebagai Bahan Sensor Gas

Dalam laporannya, Marjunus (2018) telah berhasil mendeteksi adanya gas-gas berbahaya, salah satunya adalah gas nitrogen dioksida (NO₂). Gas ini terdeteksi pada konsentrasi 5 ppm menggunakan sensor gas berbahan $Pt_{80}Au_{14}Ti_6$ dan menghasilkan nilai *CPD* sebesar (50±10) mV. Grafik data hubungan antara *CPD* terhadap waktu pada pendeteksian gas NO₂ telah dirata-ratakan dari hasil laporan Marjunus (2018) menggunakan bantuan aplikasi Origin ditunjukkan pada Gambar 2.2.



Gambar 2. 2 Grafik nilai rata-rata CPD gas NO2 dari data Marjunus (2018).

Nilai hunian/*coverage* (θ) dari gas mempengaruhi nilai fungsi kerja (ϕ) pada suatu bahan. Simulasi dalam pendeteksian gas NO₂ ini membutuhkan bentuk fungsi kerja (ϕ) dari bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ sebagai fungsi hunian/*coverage* (θ) dari gas. Fungsi kerja (ϕ) gas O pada bahan Pt ditunjukkan pada Persamaan 2.16 dan Persamaan 2.17 (Derry dan Ross, 1985).

$$\Phi_{\text{O-Pt}} = 2,663\theta_{\text{O}} \text{ V}, \text{ jika } \theta_{\text{O}} < 0,0086 \text{ ML}$$
 (2.16)

$$\Phi_{\text{O-Pt}} = (0.577\theta_{\text{O}} + 0.184) \text{ V}, \text{ jika } \theta_{\text{O}} \ge 0.0086 \text{ ML}$$
 (2.17)

Fungsi kerja (ϕ) bahan Au terhadap oksigen ditunjukkan pada Persamaan 2.18 (Gottfried, 2003) berikut.

$$\Phi_{\rm 0-Au} = \left(\frac{1.7 \times 10^{19} \times 3.3 \times 10^{-30} \theta_{\rm 0}}{8.85 \times 10^{12} (1+9 \times 1.5 \times 10^{-24} (1.7 \times 10^{19} \theta_{\rm 0})^{1.5})}\right) \rm{ML}$$
(2.18)

Pada bahan Ti, fungsi kerja (ϕ) bahan tersebut terhadap gas O ditunjukkan pada persamaan 2.19 (Jonker dkk., 1981) berikut.

$$\Phi_{0-\mathrm{Ti}} = 0.586\theta_0 - 0.0415 \,\mathrm{eV} \tag{2.19}$$

Karena fungsi kerja (ϕ) dari $\Phi_{\text{NO2-Pt}}$, $\Phi_{\text{O2-Pt}}$, $\Phi_{\text{NO-Pt}}$, $\Phi_{\text{NO-Pt}}$, $\Phi_{\text{O2-Au}}$, $\Phi_{\text{NO-Au}}$, $\Phi_{\text{NO2-Ti}}$, $\Phi_{\text{O2-Ti}}$, $\Phi_{\text{O2-Ti}}$, dan $\Phi_{\text{NO-Ti}}$ tidak didapatkan, maka nilai fungsi kerja (ϕ) tersebut diformulasikan dengan membuatnya berbanding lurus atau sama dengan nilai hunian/*coverage* (θ) seperti yang ditunjukkan pada Persamaan 2.20 – Persamaan 2.28 berikut.

$$\Phi_{\rm NO2-Pt} = \theta_{\rm NO2-Pt} \tag{2.20}$$

$$\Phi_{O_2-Pt} = \theta_{O_2-Pt} \tag{2.21}$$

$$\Phi_{\rm NO-Pt} = \theta_{\rm NO-Pt} \tag{2.22}$$

$$\Phi_{\rm NO-Pt} = \theta_{\rm NO2-Au} \tag{2.23}$$

$$\Phi_{O_2 - Au} = \theta_{O_2 - Au} \tag{2.24}$$

$$\Phi_{\rm NO-Au} = \theta_{\rm NO-Au} \tag{2.25}$$

$$\Phi_{\rm NO2-Ti} = \theta_{\rm NO2-Ti} \tag{2.26}$$

$$\Phi_{O_2-Ti} = \theta_{O_2-Ti} \tag{2.27}$$

$$\Phi_{\rm NO-Ti} = \theta_{\rm NO-Ti} \tag{2.28}$$

III. METODE PENELITIAN

3.1 Tempat Penelitian

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

3.2 Alat dan Bahan

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah komputer dengan RAM minimal 8 GB yang sudah terinstal *software Matrix Laboratory* (MatLab) sebagai media untuk melakukan simulasi dan aplikasi Origin sebagai media pembuatan grafik.

3.3 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian yang dilakukan pada penelitian ini dilakukan dalam beberapa tahapan sebagai berikut.

3.3.1 Penyusunan Persamaan Diferensial Biasa (PDB)

Pada awal penelitian ini, reaksi-reaksi pada persamaan (2.13), (2.14) dan (2.15) akan dibuat menjadi PDB Orde 1. Pada PDB Orde 1 ini kemudian akan diselesaikan dengan metode komputasi untuk mendapatkan nilai hunian/*coverage* (θ), perubahan fungsi kerja ($\Delta \phi$), dan nilai *CPD*.

3.3.2 Pengembangan Model Matematik

Pada bagian ini melakukan proses pendekatan grafik dari eksperimen yang dilakukan oleh Marjunus (2018) untuk memudahkan dalam perhitungan nilai *error*. Oleh karena itu, akan dilakukan formulasi persamaan hasil eksperimen dengan cara *fitting* untuk mendapatkan persamaan garisnya.

3.3.3 Optimasi Parameter

Metode optimasi ini menggunakan 3 parameter pada setiap reaksi maju dan reaksi mundur berupa koefisien lengket (*sticking coefficient*), koefisien Arrhenius, dan energi aktivasi seperti yang telah dijelaskan pada BAB II. Optimasi parameter yangdilakukan sebagai berikut:

- Penyelesaian PDB Orde 1 yang dibuat program dalam *software* MATLAB dengan parameter fungsi kerja (φ) Pt₈₀Au₁₄Ti₆ diperoleh dari Persamaan (2.16) (2.28) dan variasi waktu serta suhu masing-masing menjadi 90 menit dan 30 °C.
- Nilai parameter yang diketahui pada Tabel 2.1 Tabel 2.3 akan dibuat konstan. Tetapi untuk parameter yang belum diketahui nilainya, akan diberi nilai tebakan awal atau nilai coba. Nilai parameter yang belum diketahui dengan diberi nilai tebakan awal ditunjukkan pada Tabel 3.1 berikut.

	Nilai Parameter yang	Nilai Tebakan	Referensi
No.	Belum Diketahui	Awal	
1.	$v_{ m d2Pt}$	8,0515×10 ¹²	(Behrendt, 1999)
2.	$E_{ m f2Pt}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
3.	E_{r2Pt}	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
4.	$v_{ m f3Pt}$	1×10^{11}	(Gottfried dkk., 2002)
5.	$v_{ m r3Pt}$	1×10^{11}	(Gottfried dkk., 2002)
6.	$E_{ m f3Pt}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
7.	$E_{ m r3Pt}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
8.	$S_{02\mathrm{Au}}$	0,005	(Linsmeier dan Wanner, 2000)
9.	$v_{ m d2Au}$	8,0515×10 ¹²	(Behrendt, 1999)
10.	$E_{ m f2Au}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
11.	$E_{ m r2Au}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
12.	$v_{ m f3Au}$	1×10^{11}	(Gottfried dkk., 2002)
13.	$v_{ m r3Au}$	1×10^{11}	(Gottfried dkk., 2002)
14.	$E_{ m f3Au}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
15.	$E_{ m r3Au}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
16.	$v_{ m d1Ti}$	1×10^{11}	(Gottfried dkk., 2002)
17.	$v_{ m d2Ti}$	8,0515×10 ¹²	(Behrendt, 1999)
18.	$E_{ m f2Ti}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
19.	E_{r2Ti}	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
20.	$v_{ m f3Ti}$	1×10^{11}	(Gottfried dkk., 2002)
21.	$v_{ m r3Ti}$	1×10 ¹¹	(Gottfried dkk., 2002)
22.	$E_{ m f3Ti}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)
23.	$E_{ m r3Ti}$	0,53	(Matsuda dan Harada, 2005)

Tabel 3.1 Parameter yang belum diketahui dan nilai tebakan awalnya.

3. Program PDB Orde 1 dijalankan berulang untuk mendapatkan nilai hunian/coverage (θ), perubahan fungsi kerja ($\Delta \phi$), dan CPD dengan memvariasikan satu persatu parameter yang belum diketahui nilainya. Nilai yang belum diketahui dibuat konstan pada nilai coba yang lain. Nilai fungsi kerja pada masing-masing bahan dituliskan pada persamaan (3.1) – (3.3) dan

nilai fungsi kerja total (ϕ_{Total}) dihitung dari hasil penjumlahan persentase fungsi kerja (ϕ) setiap bahan, seperti yang dituliskan pada Persamaan 3.4.

$$\phi_{\rm Pt} = \phi_{\rm O-Pt} + \phi_{\rm NO2-Pt} + + \phi_{\rm O2+NO2-Pt} \tag{3.1}$$

$$\Phi_{Au} = \Phi_{O-Au} + \Phi_{NO2-Au} + \Phi_{O2+NO2-Au}$$
(3.2)

$$\Phi_{\rm Ti} = \Phi_{\rm O-Ti} + \Phi_{\rm NO2-Ti} + \Phi_{\rm O2+NO2-Ti} \tag{3.3}$$

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

Sedangkan untuk nilai CPD diperoleh dari Persamaan (2.3).

- 4. Grafik CPD terhadap waktu tiap parameter didapatkan.
- Grafik CPD diselisihkan dengan grafik eksperimen yang dilakukan oleh Marjunus (2018) untuk mencari nilai *error*.
- 6. Nilai error rata-rata ($\Delta \overline{E}$) didapatkan.
- 7. Nilai terbaik dari tiap parameter berdasarkan nilai error rata-rata ($\Delta \overline{E}$) terkecil didapatkan.

3.3.4 Optimasi Ulang Parameter

Setelah nilai dari parameter-parameter pada Tabel 3.1 didapatkan, selanjutnya yaitu proses optimasi ulang. Optimasi ulang parameter-parameter ini bertujuan untuk memeriksa potensi terjadinya pergeseran nilai dari setiap parameter. Proses optimasi ulang yang dilakukan sebagai berikut:

- 1. PDB orde 1 dibuat program dalam *software* MATLAB dengan parameter fungsi kerja (ϕ) Pt₈₀Au₁₄Ti₆ diperoleh dari Persamaan (2.16) – (2.28) dan variasi waktu serta suhu masing-masing menjadi 90 menit dan 30°C.
- 2. Program PDB Orde 1 diselesaikan dengan memvariasikan satu persatu dari parameter-parameter yang telah dioptimasi sebelumnya untuk mendapatkan nilai hunian/*coverage* (θ), perubahan fungsi kerja ($\Delta \phi$), dan nilai *CPD*.
- 3. Grafik *CPD* terhadap waktu tiap parameter didapatkan.
- 4. Grafik *CPD* diselisihkan dengan grafik eksperimen yang dilakukan oleh Marjunus (2018) untuk mencari nilai *error*.
- 5. Nilai *error* rata-rata ($\Delta \overline{E}$) didapatkan.
- 6. Nilai terbaik dari tiap parameter berdasarkan nilai *error* rata-rata $(\Delta \overline{E})$

terkecil didapatkan.

7. Jika pada proses optimasi ulang terjadi pergeseran nilai parameter, maka nilai akhir parameter merupakan rata-rata dari nilai awal dengan nilai optimasi ulangnya.

3.3.5 Simulasi Akhir

Pada proses terakhir melakukan simulasi semua nilai parameter yang telah dioptimasi. Proses simulasi yang digunakan sebagai berikut.

- 1. Nilai akhir semua parameter dimasukkan ke dalam program untuk disimulasikan kembali pada *software* MATLAB agar didapatkan nilai hunian/*coverage* (θ), fungsi kerja total (ϕ _{Total}) dan *CPD*.
- 2. Selanjutnya *CPD* dibuat grafik dan diplot terhadap waktu (*t*).
- 3. Grafik *CPD* kemudian dibandingkan dengan hasil penelitian Marjunus (2018).

3.3.6 Diagram Alir

Diagram alir 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 dilakukan, maka didapatkan kesimpulan sebagai berikut :

- Proses optimasi parameter pada penelitian ini berhasil mendapatkan nilai dari 23 (10 koefisien Arrhenius, 12 energi aktivasi dan 1 koefisien lengket/*sticking coefficient*) parameter yang belum diketahui atau belum didapatkan dari literatur, nilai-nilai tersebut ditunjukkan pada kolom nilai akhir Tabel 4.3.
- Penelitian ini telah mendapatkan hasil dari simulasi sinyal sensor gas NO₂ pada bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ dengan *trend* grafik yang mendekati grafik eksperimen Marjunus (2018).
- Simulasi pada penelitian ini menghasilkan nilai CPD sebesar 10 mV dengan nilai CPD eksperimen Marjunus (2018) sebesar (50±10) mV, maka dalam hal ini masih terdapat perbedaan yang cukup signifikan antara nilai CPD simulasi dengan eksperimen.
- 4. Perkiraan nilai hunian/coverage (θ) berhasil didapatkan untuk gas NO₂, gas O₂, gas NO dan atom O secara berturut-turut sebesar 2,684 × 10⁻¹¹ ML, 1,048 × 10⁻¹¹ ML dan 4,02 × 10⁻⁹ ML.

5.2 Saran

Saran untuk penelitian serupa yang akan dilakukan yaitu mencari literatur sebanyak mungkin untuk mendapatkan nilai parameter yang belum diketahui sebelum melakukan penelitian agar dapat lebih efisien waktu pada saat proses optimasi. Selain itu, memperbanyak atom atau molekul gas seperti C, CO, CO₂,

OH dan H₂O untuk berinteraksi dengan permukaan bahan. Penambahan jumlah reaksi juga kemungkinan akan berpengaruh terhadap hasil simulasi, serta untuk memastikan adanya hunian/*coverage* (θ) dari suatu atom atau gas pada permukaan bahan sebuah eksperimen.

DAFTAR PUSTAKA

- Behrendt, F. 1999. Experimentelle und Numerische Beschreibung Katalytischer Zund und Verbrennungsprozesse. *Habilitationsschrift*. Fakultät Für Energietechnik der Universität Stuttgart.
- Canning, N. D.S., Outka, D. dan Madix, R. J. 1984. The Adsorption of Oxygen on Gold. *Surface Science*. Vol. 141, No. 1, Hal. 240-254.
- Chester, M. A. dan Samorjai, 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.
- Darmawan, R. (2018). Analisis Risiko Kesehatan Lingkungan Kadar NO₂ serta keluhan kesehatan petugas Pemungut Karcis Tol. Jurnal Kesehatan Lingkungan, Vol. 10, No. 1, Hal. 116.
- Derry, G. N. dan Ross, P. N. 1985. A Work Function Change Study of Oxygen Adsorption on Pt(111) and Pt(100). *Journal of Chemical Physics*. Vol. 82, No. 6, Hal. 2772-2778.
- Dwirahmawati, F., Nizar N., dan Bambang S. 2018. Analisis Perubahan Konsentrasi Nitrogen Dioksida (NO₂) pada Area Bervegetasi dan Tidak Bervegetasi di Jalan Simpang Susun. *Jurnal Lanskap Indonesia*. Vol. 10, No. 1, Hal. 13-18.
- Farikah, T., Sri Seprianto M., dan Oksfriani J.S. 2018. Analisis Kadar Nitrogen Dioksida (NO2) di Area Parkir *Basement* Jumbo Swalayan Kota Manado Tahun 2018. *Jurnal Kesmas*. Vol. 7, No. 5, Hal. 1-9.
- Garg, R., Dutta, NK dan Choudhury, NR. 2014. Work Function Engineering of Graphene. *Jurnal Nanomaterials*. Vol. 4, No. 1, Hal. 265-300.
- 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 Thesis*. Universitat 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.
- Hahn, N. 2002. SnO₂ Thick Film Sensor Ultimate Limits : Performance at Low O₂ and H₂O concentration : Size Reduction by CMOS Technology. Eberhard-Karls-Universitat Germany.
- He, J., Jing, Dapeng dan Vidali, G. 2014. Atomic Oxygen Diffusion on and Desorption from Amorphous Silicate Surface. *Physical Chemistry*. Vol. 16, Hal. 3493-3500.
- Indrawati, A., Dyah A.T., Tuti B., dan Sumaryati. 2019. Perhitungan Konsentrasi Nitrogen Oksida (NO, NOx) Ambien dengan Menggunakan Konsentrasi NO₂, dan O₃ dari *Passive Sampler* (Studi Kasus: Cipedes, Bandung). *Jurnal Sains Dirgantara*. Vol. 16, No. 12, Hal. 91-104.
- Jonker, B. T., Morar, J. F. dan Park, R. L. 1981. Surface State and Oxygen Chemisorption on Ti (0001). *Physics Review B*. Vol. 24, Hal. 2951-2957.
- Koval, I. P., Len, Y. A., Nakhodkin, M. G., Svishevskyi, M. O., dan Yakovenko, M. Y. 2015 Interaction of Molecular Oxygen with Si(001) Surface Covered with a Chromium or Titanium Monolayer. *Ukranian Journal Physics*. Vol. 60, Hal. 45-51.
- Linsmeimer, C. dan Wanner, J. 2000. Reaction of Oxygen Atoms and Molecules with Au, Be, and W Surface. *Surface Science*. Vol. 454, Hal. 305-309.
- Male, Y.T., Bandjar, A., Gaspersz, N., Fretes, Y., dan Wattimury, J.J. 2021. Analisis Tingkat Pencemaran Gas CO, NO₂, dan SO₂ pada Desa Batumerah Kota Ambon. *Jurnal Akta Kimia Indonesia*. Vol. 6, No. 1, Hal. 58-68.
- Marjunus, R. 2018. Development of Pt-Based Sensitive Layer for Carbon Monoxide Work Function Change Based Sensor in Air Temperature. *Dissertation*. Universität der Bundeswehr München.
- Marjunus, R. 2019. Initial Sticking Coefficient Attenuation of Gases in Carbon Monoxide Sensing on Pt₈₀Au₁₄Ti₆. *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 1338, No. 1, Hal. 1-14.
- Matsuda, K. dan Harada, S. 2005. Dynamical Desorption Process of Oxygen on Platinum by Using A Gas Controllable H₂ H⁺ Electrolyte Pt Cell. *Materials Transaction*. Vol. 46, No. 5, Hal. 1058-1063.

- Niemeyer, T. C., Gimenez, J. M. A., Almeida, L. H., Grandini, C. R., dan Florencio, O. 2022. Activation Energy Measurement of Oxygen Ordering in a Nb-Ti Alloy by Anelastic Relaxation. *Material Research*. Vol. 5, Hal. 143-147.
- Nix, R.M. 2014. An Introduction of Surface Chemistry. Queen Mary University of London. London.
- Nofrianti, D.A. 2017. Pajanan Gas NO₂ Pengelasan dengan Kadar Saturasi Oksigen pada Pegawai Divisi Niaga PT. PAL. *Jurnal Kesehatan Lingkungan*. Vol. 9, No. 1, Hal. 92-99.
- Novikov, S. N. dan Timoshenkov, S. P. 2003. Measurement of Contact Potential Difference (Work Function Change Based on TiO₂: A review. *International Journal of Hydrogen Energy XXX*, Vol. 19, Hal. 1-19.
- Prayudi, T. 2003. Dampak Industri Pengecoran Logam Terhadap Kualitas Gas NO₂ dalam Udara Ambien di Daerah Ceper. *Jurnal Teknik Lingkungan*. Vol. 4, No. 1, Hal. 27-33.
- Puspitarini, R. dan Riva Ismawati. 2022. Analisis Kimia Udara PT Papertech Indonesia Unit II Magelang. Jurnal Sains dan Teknologi Lingkungan. Vol. 14, No. 1, Hal. 22-30.
- Riviwanto, M. dan Fajar Mavira S. 2017. Analisis Risiko Kesehatan Paparan Gas Nitrogen Dioksida (NO₂) pada Petugas Parkir di Basement Plaza Andalas. *Jurnal Kesehatan*. Vol. VIII, No. 3, Hal. 441-448.
- Roberts, B.W. 1978. Chemistry of the Metal-Gas Interface. Oxford.
- Somorjai, G. A and Li, Y. 2010. *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis, Second Ed.* John Wiley & Son. New York.
- Senft, C., Iskra, P., dan Eisele, I. 2009. Austrittsarbeitsbasierte Wassetofdetektion fur Farzeuge mit Brenstoffzellenantrieb. *PhD Thesis*. Universitat der Bundeswehr.
- 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. Korotrchenkov), Vol. 4. Momentum Press. New York.
- Sonker, R., Yadav, B. C., Sharma, A., Tomar, M., and Gupta. 2016. Experimental Investigation on NO₂ Sensing of Pure ZnO and PANI-ZnO Composite Thin Film. *The Royal Society of Chemistry*. Vol. 6, Hal. 56149-56148.

- Triyatno, Joko. 2018. Perbandingan Penggunaan Gas Alam Terhadap LPG dalam Memenuhi Kebutuhan Rumah Tangga di Bontang. Jurnal Al Ulum Sains dan Teknologi. Vol. 4, No. 1, Hal. 14-20.
- Widodo, S. 2014. Teknologi Proses Pembuatan Divais Sensor Gas NO₂ dengan Lapisan Aktif In₂O₃. *Jurnal Penelitian Kimia*. Vol. 10, No. 1, Hal. 69-86.
- 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 Science*. Vol 2, Hal. 48 – 57.
- Yan, X. T and Xu, Y. 2010. *Chemical Vapour Deposition*. Springer-Verlag. London.
- Yuliasari, N., Miksusanti dan Tridayona. 2004. Studi Kandungan Nitrogen Dioksida (NOx) pada Udara di Sepanjang Jalan Palembang-Inderalaya. Jurnal Penelitian Sains. Vol. 1, No. 16, Hal. 81-87.