

**SIMULASI KOMPREHENSIF PENDETEKSIAN GAS SO₂ PADA
BAHAN ZnO BERBASIS PERUBAHAN FUNGSI KERJA ($\Delta\Phi$)**

Oleh

HADI BUHRO WIJAYA

TESIS



**PROGRAM STUDI MAGISTER FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2024**

ABSTRAK

SIMULASI KOMPREHENSIF PENDETEKSIAN GAS SO₂ PADA BAHAN ZnO BERBASIS PERUBAHAN FUNGSI KERJA ($\Delta\Phi$)

Oleh

HADI BUHRO WIJAYA

Penelitian ini berhasil membuat persamaan diferensial biasa orde satu untuk menentukan nilai *coverage*/hunian atom/molekul gas pada permukaan bahan ZnO. Selain itu, *fitting* hasil penelitian Widanarto menghasilkan persamaan polinomial orde ke-9 untuk digunakan dalam simulasi. Penelitian ini juga berhasil membuat simulasi atau pemodelan pada program MATLAB dengan menghasilkan 48 nilai parameter reaksi baru untuk pendeteksian gas SO₂ pada permukaan ZnO. Rerata *error* pada simulasi pertama, kedua dan kombinasi keduanya berturut-turut adalah 0,01143 V, 0,03169 V dan 0,04576V. Grafik simulasi yang dihasilkan memiliki tren yang sama dengan hasil penelitian Widanarto. Simulasi ini juga menghasilkan hunian atom oksigen (θ_O), molekul SO₂ (θ_{SO_2}) dan molekul H₂O (θ_{H_2O}) berturut-turut adalah $1,6502 \times 10^{-6}$ ML, $5,50791 \times 10^{-14}$ ML dan $1,08069 \times 10^{-14}$ ML.

Kata Kunci: SO₂, ZnO, perubahan fungsi kerja, *coverage*, *fitting*, sensor gas.

ABSTRACT

COMPREHENSIVE SIMULATION OF SO₂ GAS DETECTION IN ZnO MATERIAL BASED ON CHANGES IN WORK FUNCTION ($\Delta\Phi$)

By

HADI BUHRO WIJAYA

This research succeeded in creating a first order ordinary differential equation to determine the coverage/occupancy value of gas atoms/molecules on the surface of ZnO. Fitting the lab results of Widanarto produced the 9th order polynomial equation. This research also succeeded in creating simulations or modeling in the MATLAB program by producing 48 new reaction parameter values for the detection of SO₂ gas by using ZnO surface. The error average of the first, second and combination of first-second simulation are 0,01143 V, 0,03169 V and 0,04576 V respectively. The simulation graphs has the same trend as the research results of Widanarto. This research also results the coverage/occupancy of oxygen atom (θ_O) SO₂ molecules (θ_{SO_2}) and H₂O molecules (θ_{H_2O}) i.e $1,6502 \times 10^{-6}$ ML, $5,50791 \times 10^{-14}$ ML and $1,08069 \times 10^{-14}$ ML respectively.

Keywords: SO₂, ZnO, change in work function, coverage, fitting, gas sensor.

**SIMULASI KOMPREHENSIF PENDETEKSIAN GAS SO₂ PADA
BAHAN ZnO BERBASIS PERUBAHAN FUNGSI KERJA ($\Delta\Phi$)**

Oleh

Hadi Buhro Wijaya

Tesis

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Mencapai Gelar
MAGISTER SAINS

Pada

**Program Studi Magister Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Lampung**



**PROGRAM STUDI MAGISTER FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2024**

Judul Tesis : **SIMULASI KOMPREHENSIF PENDETEKSIAN GAS SO₂ PADA BAHAN ZnO BERBASIS PERUBAHAN FUNGSI KERJA ($\Delta\Phi$)**

Nama Mahasiswa : **Hadri Buhro Wijaya**

Nomor Pokok Mahasiswa : 2127041003

Program Studi : Magister Fisika

Jurusan : Fisika

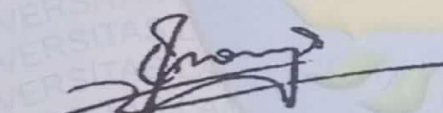
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

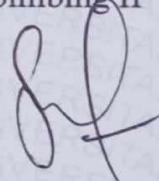
MENYETUJUI

1. Komisi Pembimbing

Pembimbing I

Pembimbing II

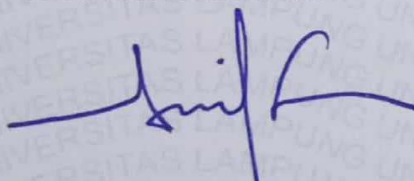

Dr. rer. Mat. Roniyus Marjunus, S.Si., M.Si.
NIP. 19770318 200012 1 003

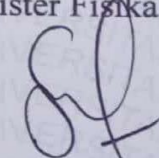

Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si.
NIP. 19751219 200012 2 003

2. Mengetahui

Ketua Jurusan Fisika

Ketua Program Studi
Magister Fisika

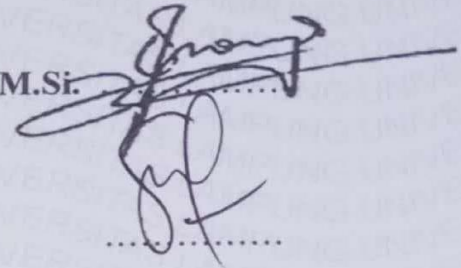

Arif Surtono, S.Si., M.Si., M.Eng.
NIP. 19710909 200012 1 001


Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si.
NIP. 19751219 200012 2 003

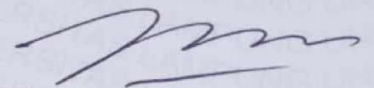
MENGESAHKAN

1. Tim penguji

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

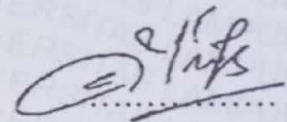


Sekretaris : **Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si.**



Penguji Anggota 1 : **Prof. Drs. Posman Manurung, M.Si., Ph.D.**

Penguji Anggota 2 : **Dra. Dwi Asmi, M.Si., Ph.D**

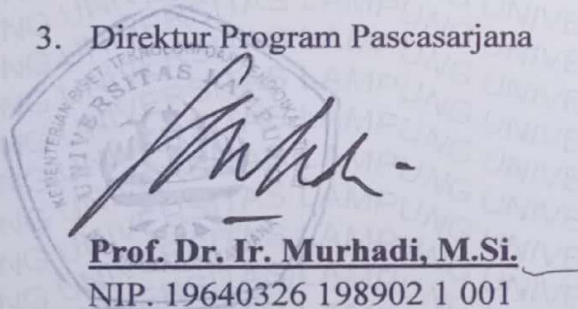


2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



Drs. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si.
NIP. 19711001 200501 1 002

3. Direktur Program Pascasarjana



Prof. Dr. Ir. Murhadi, M.Si.
NIP. 19640326 198902 1 001

Tanggal Lulus Ujian Tesis : 20 Desember 2024

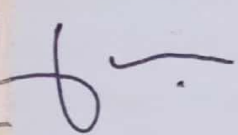
PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam tesis ini tidak terdapat karya yang pernah dilakukan orang lain dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat 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 tesis ini dibuat oleh saya sendiri.

Apabila pernyataan saya tidak benar maka saya bersedia dikenakan sanksi sesuai dengan hukum yang berlaku.

Bandar Lampung, 20 Desember 2024




Hadi Buhro Wijaya
NPM. 2127041003

RIWAYAT HIDUP



Penulis lahir di Desa Tegalsari kecamatan Belintang kabupaten OKU Timur provinsi Sumatera Selatan pada tanggal 30 September 1984, anak ketiga dari pasangan Bapak Parno, A.Ma.Pd dan Ibu Siti Chotijah (alm). Penulis memulai pendidikan sekolah dasar di SD Negeri Tegalsari tahun 1991-1997, kemudian melanjutkan pendidikan menengah pertama di SMP Negeri 3 Belintang tahun 1997-2000 dan pendidikan menengah atas di SMU Negeri 2 OKU pada tahun 2000-2003.

Selanjutnya penulis menyelesaikan pendidikan S-1 di Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu pengetahuan Alam (FMIPA) Universitas Lampung pada tahun 2008 dengan judul skripsi “**Pengaruh Kadar KCl Terhadap Pembentukan Fase Bahan Superkonduktor BSCCO-2223 dengan Doping Pb (BPSCCO-2223) Menggunakan Metode KCl-Flux**”. Pada tahun 2009 penulis mengikuti tes Calon Pegawai Negeri Sipil (CPNS) dan lulus menjadi CPNS Formasi Guru Fisika di Kementerian Agama Republik Indonesia. Saat ini penulis menjadi Guru Fisika di Madrasah Aliyah Negeri (MAN) 1 OKU Timur.

Pada tahun 2010 penulis menikah dengan Supriyati, S.Pd.Gr. dan telah dikarunia 3 orang anak yang bernama Diya Zahrina Wijaya, Aisyah Elvira Wijaya dan Putri Hafizah Vivi Wijaya. Penulis terdaftar sebagai mahasiswa pascasarjana pada program studi Magister Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA) Universitas Lampung pada tahun 2021 melalui Jalur Seleksi Penerimaan Mahasiswa Baru.

Penulis aktif di organisasi profesi guru yaitu sebagai Ketua Daerah Ikatan Guru Indonesia (IGI) Kabupaten OKU Timur (2022-2026), Ketua Musyawarah Guru Mata Pelajaran (MGMP) Guru Fisika Madrasah Aliyah Kabupaten OKU Timur (2022-2027), Fasilitator Daerah (Fasda) Mata Pelajaran Fisika (2021-2024), Instruktur Tindak Lanjut Hasil Asesmen Kompetensi Madrasah Indonesia (AKMI) tahun 2022 dan penulis modul fisika pada program Pengembangan Keprofesian Berkelanjutan (PKB) Guru yang diselenggarakan oleh Direktorat Jenderal Pendidikan Islam Kementerian Agama Republik Indonesia tahun 2023.

Selain aktif menjadi guru di madrasah, penulis juga mengajar di Bimbingan Belajar Zahira untuk anak-anak SD, SMP dan SMA, pendiri dan relawan komunitas Gerakan Cinta Sedekah (GCS) yang bergerak di bidang sosial keagamaan serta aktif sebagai konten kreator di beberapa *platform* media sosial.

Penulis pernah mendapatkan peringkat ke-2 Anugerah Inovator dari Gubernur Sumatera Selatan pada tahun 2020 dengan inovasi pembuatan aplikasi ojek online berbasis android “**omjeck**” kategori Inovator Guru SLTA. Selanjutnya pada tahun 2022, penulis terpilih menjadi Guru Favorit pada Anugerah GTK Kementerian Agama RI kategori Guru Inovatif. Penulis juga aktif sebagai Guru Pembina Olimpiade Sains dan Inovasi di MAN 1 OKU Timur. Beberapa prestasi olimpiade dan inovasi yang telah didapatkan oleh siswa bimbingan penulis antara lain : Juara Pertama Kompetisi Sains Madrasah (KSM) Fisika tingkat provinsi Sumatera Selatan tahun 2017, Juara ke-2 Festival Literasi Sumatera Selatan dengan karya literasi sains berjudul “**Mengubah sampah plastik jadi BBM**” pada tahun 2021 dan Juara Pertama Olimpiade Sains Nasional (OSN) Fisika dan Astronomi tingkat kabupaten pada tahun 2023.

Pada tahun 2023-2024, Penulis melakukan penelitian dan menyelesaikan tugas akhir (tesis) Pascasarjana pada Program Studi Magister Fisika FMIPA Universitas Lampung dengan judul “**Simulasi Komprehensif Pendeteksian Gas SO₂ Pada Bahan ZnO Berbasis Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$)**”.

MOTTO

“Sesungguhnya Allah tidak akan mengubah nasib suatu kaum kecuali mereka sendiri yang mengubah apa yang ada pada diri mereka”

(Al-Qur'an, Surah Ar-Ra'd ayat 11)

"Sebaik-baik manusia adalah yang paling bermanfaat bagi manusia".

(Al Hadist)

“Orang pesimis melihat kesulitan dalam setiap kesempatan, tetapi orang yang optimis melihat kesempatan dalam setiap kesulitan”

(Ali bin Abi Thalib R.A)

PERSEMBAHAN

Dengan Mengucap Bismillahirrahmanirrahim
Karya ini Kupersembahkan untuk Isteriku **Supriyati, S.Pd.Gr.**
dan Anak-Anakku Tersayang ; **Diya, Aisyah dan Putri.**

***Atas Doa Yang Tak Pernah Putus serta Segala Usaha
Untuk Meraih Gelar M.Si. (Magister Sains)***

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadirat Allah *Subhanahu Wa Ta'ala* yang telah memberikan karunia dan nikmat-Nya kepada Penulis sehingga dapat menyelesaikan tesis dengan judul “**Simulasi Komprehensif Pendeteksian Gas SO₂ pada Bahan ZnO Berbasis Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$)**”. Penulis menyadari dalam penulisan tesis ini masih terdapat banyak kesalahan dan kekurangan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik, saran dan masukan demi perbaikan kedepan.

Semoga tesis ini dapat bermanfaat dan menjadi literatur serta rujukan penelitian-penelitian berikutnya.

Bandar Lampung, 20 Desember 2024

Penulis,

Hadi Buhro Wijaya

SANWACANA

Puji syukur kehadirat Allah *Subhanahu Wa Ta'ala* yang telah memberikan karunia dan nikmat-Nya kepada penulis sehingga dapat menyelesaikan tesis dengan judul “**Simulasi Komprehensif Pendeteksian Gas SO₂ pada Bahan ZnO Berbasis Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$)**” sebagai syarat memperoleh gelar Magister Sains (M.Si.) pada Program Studi Magister Fisika Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA) Universitas Lampung. Selama kuliah dan menyelesaikan tesis ini, penulis menerima banyak bantuan secara langsung maupun tidak langsung. Dengan ini kami ucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada :

1. Kedua orang tua penulis, Bapak Parno, A.Ma.Pd dan Mamak Siti Chotijah (alm), atas doa dan usaha yang tak pernah lelah membimbing penulis. Semoga Mamak diberikan ampunan oleh Allah *Subhanahu wa Ta'ala* dan ditempatkan di syurga-Nya;
2. Bapak H. Wagirun dan Mamak Ine Sundari (alm), Bapak dan Ibu Mertua penulis. Semoga Mak Ine juga diberikan ampunan oleh Allah *Subhanahu wa Ta'ala* dan ditempatkan di syurga-Nya;
3. Supriyati, S.Pd.Gr., isteri penulis dan anak-anak penulis : Diya Zahrina Wijaya, Aisyah Elvira Wijaya dan Putri Hafizah Vivi Wijaya. Terimakasih atas doa dan segala upaya sehingga penulis dapat menyelesaikan program studi Magister Fisika;
4. Bapak Dr. rer.nat. Roniyus Marjunus, S.Si., M.Si. sebagai Dosen Pembimbing I yang telah memberikan bimbingan, arahan, saran dan motivasinya selama perkuliahan sampai penelitian dan penyusunan tesis;
5. Ibu Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si.(Ketua Program Studi Magister Fisika) selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan bimbingan, bantuan dan saran serta masukan selama proses penelitian dan penulisan tesis;

6. Bapak Prof. Drs. Posman Manurung, M.Si., Ph.D. sebagai Dosen Penguji I dan Dosen Pembimbing Akademik penulis yang telah memberikan saran dan masukan agar hasil penelitian dan penulisan tesis menjadi lebih baik;
7. Ibu Dra. Dwi Asmi, M.Si, Ph.D. sebagai Dosen Penguji II yang telah memberikan saran dan masukan agar hasil penelitian menjadi lebih baik;
8. Bapak Arif Surtono, S.Si., M.Si., M.Eng. (Ketua Jurusan Fisika) terimakasih atas bantuan dan arahan selama penyelesaian tesis;
9. Bapak dan Ibu Dosen Fisika ; Pak Gurum, Pak Junaidi, Bu Suprihatin dan Bu Suci. Terimakasih atas bimbingan dan motivasinya;
10. Pegawai dan Staf Jurusan Fisika ; Pak Badri, Pak Sudar dan Bu Hamnah. Terimakasih atas bantuannya selama menjadi mahasiswa;
11. Ibu Siti Muarofah, M.Pd.I. (Kepala MAN 1 OKU Timur) beserta Bapak dan Ibu Guru serta pegawai di MAN 1 OKU Timur atas dukungan dan motivasinya sehingga penulis dapat menyelesaikan studi pascasarjana;
12. Saudara Dr. Hidayatullah, M.Pd dan Umi Hidayani, M.Si. atas bantuan tempat menginap selama penulis menyelesaikan penelitian;
13. Sahabat IGI OKU Timur : Pak Suripto, Pak Muhlis, Bu Titik, Pak Abu, Pak Tahriri, Pak Musidin, Pak Lukman, Pak Okmi, Bu Pipit, Bu Lili, Bu Wuri dkk.;
14. Relawan Gerakan Cinta Sedekah (GCS) OKU Timur : Pak Dr. Didi Franzhardi, Mas Haji Tri, Pak Anwar, Pak Yanto, Pak Darto, Mas Firman, Kak Dendi, Kak Salsa, Mas Rohman, Fajero, Bella, Leni, Jihan dkk.;
15. Sahabat Angkatan 2021 Fisika S2 : Hesti, Indah, Dewi, Dwi, Bela dan Dina. Sukses selalu untuk sahabat semuanya;
16. Saudara Wawan Setiawan, M.Si. dan Zhara Nabila, S.Si, terimakasih atas bantuannya selama penelitian.

Bandar lampung, 20 Desember 2024

Penulis

Hadi Buhro Wijaya

DAFTAR ISI

	Halaman
ABSTRACT	i
ABSTRAK	ii
LEMBAR JUDUL	iii
LEMBAR PERSETUJUAN	iv
LEMBAR PENGESAHAN	v
HALAMAN PERNYATAAN	vi
RIWAYAT HIDUP	vii
MOTTO	viii
PERSEMBAHAN	ix
KATA PENGANTAR	x
SANWACANA	xi
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR GAMBAR	xviii
DAFTAR TABEL	xxi
DAFTAR SIMBOL	xxii
I. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4

II. TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$)	5
2.2 Adsorpsi	6
2.3 Desorpsi.....	8
2.4 Mekanisme Pendektesian Gas SO ₂ pada permukaan ZnO.....	8
2.5 Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$) ZnO pada Pendeteksian Gas SO ₂	11
III. PROSEDUR PENELITIAN.....	13
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian.....	13
3.2 Alat dan Bahan	13
3.3 Prosedur Penelitian	13
3.3.1 Menyusun Persamaan Diferensial Orde Satu	13
3.3.2 Grafik <i>Fitting</i>	13
3.3.3 Optimasi Parameter	14
3.3.4 Simulasi Komprehensif Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$).....	15
3.2 Diagram Alir	16
IV. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	17
4.1 Persamaan Diferensial Biasa Orde Satu.....	17
4.2 <i>Fitting</i> Persamaan Garis	19
4.3 Optimasi Parameter.....	20
4.3.1 Energi Adsorpsi SO ₂ (E_{f1}) dan Energi Desorpsi SO ₂ (E_{r1}).....	20
4.3.2 Koefisien Arrhenius Desorpsi SO ₂ (v_{r1}) dan <i>Initial sticking</i> <i>Coeffitient</i> SO ₂ (S_{x1})	21
4.3.3 Energi Adsorpsi Atom Oksigen (E_{f2}) dan Energi Desorpsi Atom Oksigen (E_{r2})	22
4.3.4 Koefisien Arrhenius Desorpsi Atom Oksigen (v_{r2}) dan <i>Initial sticking</i> <i>Coeffitient</i> Atom Oksigen (S_{x2})	24
4.3.5 <i>Initial sticking</i> <i>Coeffitient</i> H ₂ O (S_{x3}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (reverse) H ₂ O (v_{r3})	25
4.3.6 Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) (E_{f3}) H ₂ O dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) H ₂ O (E_{r3})	26
4.3.7 Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) SO (v_{f4}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) SO (v_{r4})	28

4.3.8	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) (E_{f4}) SO dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) SO (E_{r4})	29
4.3.9	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) O_2 (v_{f5}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) O_2 (v_{r5})	30
4.3.10	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) (E_{f5}) O_2 dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) O_2 (E_{r5})	31
4.3.11	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) OH (v_{f6}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) OH (v_{r6})	33
4.3.12	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) (E_{f6}) OH dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) OH (E_{r6})	34
4.3.13	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) Atom H (v_{f7}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) H (v_{r7})	35
4.3.14	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) (E_{f7}) Atom H dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) Atom H (E_{r7})	37
4.3.15	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) H_2 (v_{f8}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) H_2 (v_{r8})	38
4.3.16	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) H_2 (E_{f8}) dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) H_2 (E_{r8})	39
4.3.17	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) SO_2 (v_{f9}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) SO_2 (v_{r9})	41
4.3.18	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) SO_2 (E_{f9}) dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) SO_2 (E_{r9})	42
4.3.19	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) O (v_{f10}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) O (v_{r10})	43
4.3.20	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) O (E_{f10}) dan Energi Aktivasi Reaksi Mundur (<i>Reverse</i>) O (E_{r10})	45
4.3.21	Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) H_2O (v_{f11}) dan Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) H_2O (E_{f11})	46
4.3.22	Energi Aktivasi Reaksi Maju (<i>Forward</i>) SO (E_{f12}) dan Koefisien Arrhenius Reaksi Maju (<i>Forward</i>) O_2 (v_{f12})	47
4.4	Simulasi Final Perubahan Fungsi Kerja Gas SO_2 pada Bahan ZnO Untuk Optimasi Pertama	6
4.5	Simulasi Final Perubahan Fungsi Kerja Gas SO_2 pada Bahan ZnO Untuk Optimasi Kedua	6
4.6	Simulasi Final Perubahan Fungsi Kerja Gas SO_2 pada Bahan	

ZnO Untuk Rerata Optimasi Pertama dan Kedua	6
4.7 Coverage/Hunian Atom/Molekul di Permukaan Bahan ZnO.....	6
V. SIMPULAN DAN SARAN.....	62
5.1 Simpulan.....	62
5.2 Saran.....	64
DAFTAR PUSTAKA	65
LAMPIRAN	67

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Grafik energi perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) akibat adsorpsi gas pada permukaan bahan.....	5
Gambar 2.2 Adsorpsi gas pada permukaan, (a) Fisika, (b) Kimia	6
Gambar 2.3 Selektivitas sensor untuk 8 jenis gas berbeda pada suhu 165 °C dalam kondisi kering	12
Gambar 3.1 Diagram alir optimasi	16
Gambar 3.2 Diagram alir optimasi ulang semua parameter	17
Gambar 3.3 Diagram alir simulasi final perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) terhadap waktu (t)	18
Gambar 4.1 <i>Fitting</i> persamaan garis	21
Gambar 4.2 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f1}	22
Gambar 4.3 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r1}	23
Gambar 4.4 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r1}	23
Gambar 4.5 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter S_{x1}	24
Gambar 4.6 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f2}	25
Gambar 4.7 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r2}	25
Gambar 4.8 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r2}	26
Gambar 4.9 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter S_{x2}	27
Gambar 4.10 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter S_{x3}	27
Gambar 4.11 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r3}	28
Gambar 4.12 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f3}	29
Gambar 4.13 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r3}	29
Gambar 4.14 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r4}	30

Gambar 4.15 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r4}	30
Gambar 4.16 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f4}	31
Gambar 4.17 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r4}	32
Gambar 4.18 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f5}	32
Gambar 4.19 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r5}	33
Gambar 4.20 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f5}	34
Gambar 4.21 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r5}	34
Gambar 4.22 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f6}	35
Gambar 4.23 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r6}	36
Gambar 4.24 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f6}	36
Gambar 4.25 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r6}	37
Gambar 4.26 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f7}	38
Gambar 4.27 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r7}	38
Gambar 4.28 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f7}	39
Gambar 4.29 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r7}	40
Gambar 4.30 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f8}	40
Gambar 4.31 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r8}	41
Gambar 4.32 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f8}	42
Gambar 4.33 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r8}	42
Gambar 4.34 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f9}	43
Gambar 4.35 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r9}	44
Gambar 4.36 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f7}	44
Gambar 4.37 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r9}	45
Gambar 4.38 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f10}	46
Gambar 4.39 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{r10}	46
Gambar 4.40 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f10}	47
Gambar 4.41 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{r10}	48
Gambar 4.42 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f11}	49

Gambar 4.43 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f11}	49
Gambar 4.44 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter v_{f12}	50
Gambar 4.45 Grafik rerata <i>error</i> $\Delta\Phi$ (V) parameter E_{f12}	51
Gambar 4.46 Perbandingan simulasi fungsi kerja gas SO ₂ dengan hasil eksperimen Widanarto dkk (2011) pada bahan ZnO untuk optimasi pertama.	52
Gambar 4.47 Perbandingan simulasi fungsi kerja gas SO ₂ dengan hasil eksperimen Widanarto dkk (2011) pada bahan ZnO untuk optimasi kedua.	54
Gambar 4.48 Perbandingan simulasi fungsi kerja gas SO ₂ dengan hasil eksperimen Widanarto dkk (2011) pada bahan ZnO untuk rerata optimasi pertama dan optimasi kedua.	59
Gambar 4.49 Coverage/hunian atom oksigen pada bahan ZnO (θ_O).....	60
Gambar 4.50 Coverage/hunian molekul SO ₂ pada bahan ZnO (θ_{SO_2}).....	61
Gambar 4.52 Coverage/hunian molekul H ₂ O pada bahan ZnO (θ_{H_2O}).....	62

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Parameter Laju Reaksi Adsorpsi/desorpsi/reaksi	10
Tabel 4.1 Data hasil optimasi pertama pencarian parameter laju adsorpsi/ desorpsi/ reaksi semua parameter	51
Tabel 4.2 Data hasil optimasi kedua pencarian parameter laju adsorpsi/desorpsi/ reaksi semua parameter	53
Tabel 4.3 Nilai rerata optimasi pertama dan kedua parameter <i>initial sticking coefficient</i> (S_0) dan koefisien Arrhenius reaksi maju maju (<i>forward</i>)	55
Tabel 4.4 Nilai rerata optimasi pertama dan kedua parameter koefisien Arrhenius reaksi mundur	56
Tabel 4.5 Nilai rerata optimasi pertama dan kedua parameter energi aktivasi reaksi maju (<i>forward</i>)	57
Tabel 4.6 Nilai rerata optimasi pertama dan kedua parameter energi aktivasi reaksi mundur (<i>reverse</i>)	58

DAFTAR SIMBOL

Simbol	Keterangan	Satuan
ads	<i>Adsorption</i>	-
E_F	Energi Fermi	eV
E_{VAC}	Energi vakum	eV
E_a	Energi adsorpsi	eV
E_{diss}	Energi disosiasi	eV
E_d	Energi desorpsi	eV
E_{f1}	Energi adsorpsi SO ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{f2}	Energi adsorpsi O ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{f3}	Energi aktivasi <i>forward</i> SO ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{f4}	Energi aktivasi <i>forward</i> SO pada bahan ZnO	eV
E_{f5}	Energi aktivasi <i>forward</i> O ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{f6}	Energi aktivasi <i>forward</i> OH pada bahan ZnO	eV
E_{f7}	Energi aktivasi <i>forward</i> H pada bahan ZnO	eV
E_{f8}	Energi aktivasi <i>forward</i> H ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{f9}	Energi aktivasi <i>forward</i> SO ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{f10}	Energi aktivasi <i>forward</i> atom O pada bahan ZnO	eV
E_{f11}	Energi aktivasi <i>forward</i> H ₂ O pada bahan ZnO	eV
E_{r1}	Energi desorpsi SO ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{r2}	Energi desorpsi O ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{r3}	Energi aktivasi <i>reverse</i> H ₂ O pada bahan ZnO	eV
E_{r4}	Energi aktivasi <i>reverse</i> SO pada bahan ZnO	eV
E_{r5}	Energi aktivasi <i>reverse</i> O ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{r6}	Energi aktivasi <i>reverse</i> OH pada bahan ZnO	eV
E_{r7}	Energi aktivasi <i>reverse</i> H pada bahan ZnO	eV

E_{r8}	Energi aktivasi <i>reverse</i> H ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{r9}	Energi aktivasi <i>reverse</i> SO ₂ pada bahan ZnO	eV
E_{r10}	Energi aktivasi <i>reverse</i> atom O pada bahan ZnO	eV
E_{r11}	Energi aktivasi <i>reverse</i> H ₂ O pada bahan ZnO	eV
F	Fluks molekul	molekul.m ² s ⁻¹
K	Konstanta Boltzmann	JK ⁻¹
M	Massa molekul gas	Kg
N_{ads}	Jumlah atom/molekul pada <i>surface</i>	atom/molekul
P	Tekanan gas	Pa
S	<i>Surface area</i>	-
S	Fase adsorpsi pada permukaan material	-
S_0	<i>Initial sticking coefficient</i>	-
S_{01}	<i>Initial sticking coefficient</i> SO ₂	-
S_{02}	<i>Initial sticking coefficient</i> O ₂	-
S_{03}	<i>Initial sticking coefficient</i> H ₂ O	-
T	Suhu	K
Φ	<i>Work Function</i>	eV
$\Delta\Phi$	<i>Work Function Change</i>	eV
θ	<i>Coverage/hunian</i>	ML
θ_{SO_2}	<i>Coverage/hunian</i> molekul SO ₂	ML
θ_O	<i>Coverage/hunian</i> atom O	ML
θ_{H_2O}	<i>Coverage/hunian</i> molekul H ₂ O	ML
Σ	Rapat permukaan atom	atom/m ²
ν_d	Koefisien Arrhenius	disosiasi/s
ν_{d1}	Koefisien Arrhenius desorpsi SO ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
ν_{d2}	Koefisien Arrhenius desorpsi O ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
ν_{r3}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> SO ₂ pada material ZnO	s ⁻¹
ν_r	Koefisien Arrhenius dari reaksi AB	reaksi/s
r_a	Laju penyerapan	atom/molekul/s
Z	Konstanta gas	-

v_{f3}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> SO ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f4}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> SO pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f5}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> O ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f6}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> OH pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f7}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> H pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f8}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> H ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f9}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> SO ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f10}	Koefisien <i>forward</i> atom oksigen pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{f11}	Koefisien Arrhenius <i>forward</i> H ₂ O pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r3}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> SO ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r4}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> SO pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r5}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> O ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r6}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> OH pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r7}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> H pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r8}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> H ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r9}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> SO ₂ pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r10}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> atom oksigen pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_{r11}	Koefisien Arrhenius <i>reverse</i> H ₂ O pada bahan ZnO	s ⁻¹
v_r	Koefisien Arrhenius dari reaksi AB	reaksi/s
r_a	Laju penyerapan	atom/molekul/s

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Udara merupakan campuran gas yang terdiri dari 78% nitrogen, 21% oksigen, 0,93% argon, 0,03% karbon monoksida dan sisanya terdiri dari neon, helium, metana dan hidrogen. Udara dikatakan normal dan dapat mendukung kehidupan manusia, apabila komposisinya seperti tersebut diatas. Sedangkan apabila terjadi penambahan gas lain, apalagi yang menimbulkan gangguan serta perubahan dari komposisi, maka dikatakan udara sudah tercemar.

Menurut Syty (1973) bahwa salah satu polutan utama di atmosfer adalah sulfur dioksida (SO_2). Polutan SO_2 di atmosfer terjadi akibat pencemaran secara alami seperti letusan gunung berapi (Kawamoto dkk, 2004). Gas SO_2 merupakan gas polutan yang banyak dihasilkan dari pembakaran bahan bakar fosil yang mengandung unsur belerang seperti minyak, gas, batubara, maupun kokas (Smith dkk,2001).

Polutan gas SO_2 dapat menyebabkan efek kesehatan bagi manusia. Pada konsentrasi 5 ppm dalam waktu 24 jam gas SO_2 dapat menyebabkan peningkatan resistensi pernapasan, konsentrasi 8-12 ppm mengakibatkan iritasi tenggorokan. Konsentrasi lebih dari 20 ppm mengakibatkan iritasi mata dan batuk (Khan dan Siddiqui, 2014). Konsentrasi di atas 1000 ppm dapat menyebabkan kematian dalam waktu 10 menit. Gas ini sangat mudah terlarut dalam air, memiliki bau tajam namun tidak terbakar di udara (Lide, 2003). Oleh karena itu dibutuhkan sensor untuk mendeteksi keberadaan gas SO_2 dan memberikan peringatan tentang tingkat bahaya kepada manusia.

Sensor gas dibagi menjadi dua, yaitu sensor fisika dan sensor kimia. Sensor kimia merupakan alat yang mengubah informasi kimia menjadi sinyal yang

bermanfaat secara analitik. Informasi kimia tersebut dapat berupa reaksi kimia, komposisi dan konsentrasi pada bahan. Sensor fisika merupakan alat yang memberikan informasi fisika dari suatu system, misalnya berupa beda potensial, resistansi, konduktivitas, suhu dan perubahan fungsi kerja. Prinsip kerja sensor kimia dan fisika dapat digunakan untuk membuat sensor gas (Hulanicki dkk, 1991).

Suatu sensor gas memerlukan bahan yang memiliki selektivitas, stabilitas dan respon kerja yang baik. Bahan yang banyak digunakan sebagai sensor gas adalah semikonduktor logam oksida. Contoh logam oksida yang dapat digunakan sebagai bahan sensor gas adalah seng oksida (ZnO). ZnO dipilih sebagai sensor padatan karena mempunyai stabilitas dan sensitivitas yang baik (Chang dkk, 2002).

Salah satu bahan sensitif yang dapat digunakan untuk mengukur sensor padatan berbasis fungsi kerja adalah *Zinc oxide* (ZnO) (Lange dkk, 2014). Pada pendeteksian SO₂, Hong dkk. (2016) melaporkan bahwa bahan ZnO dapat mendeteksi Gas SO₂ di udara pada suhu 180 °C pada konsentrasi gas 20 ppm. Selain itu, Widanarto dkk. (2011) juga berhasil melakukan penelitian bahwa ZnO dapat mendeteksi keberadaan SO₂ pada suhu 165 °C dengan menghasilkan sinyal perubahan fungsi kerja sebesar -35mV.

Pendeteksian gas dengan sensor padatan ini telah banyak digunakan oleh peneliti. Keunggulan dari sensor padatan (Moseley, 1997) yaitu mempunyai ukuran kecil, sensitivitas tinggi dalam mendeteksi konsentrasi yang sangat rendah. Karakteristik sensor padatan adalah interaksi gas yang bersifat *reversible*, artinya suatu proses dimana sistem dan semua bagian dari sekelilingnya dapat kembali kepada keadaan awal setelah berlangsungnya suatu proses. Pendeteksian reaksi sensor padatan dapat dilakukan dengan mengukur perubahan fungsi kerja, konduktivitas, kapasitansi, massa dan karakteristik optik dan energi reaksi yang dilepaskan oleh gas atau interaksi padatan (Capone dkk, 2003).

Pengukuran sensor padatan berbasis perubahan fungsi kerja mempunyai beberapa keunggulan (Eisele dan Burgmair,2000), diantaranya :

1. Konsumsi daya rendah;
2. Sistem operasi mulai dari suhu di bawah 0 °C sampai dengan 200 °C;
3. Sensitivitas untuk rentang yang lebih luas pada mekanisme penyerapan;
4. Dapat mendeteksi gas hingga ke permukaan bagian dalam;
5. Dapat menggunakan berbagai bahan sensitif.

Berdasarkan studi literatur yang telah dilakukan terkait hasil penelitian yang dilakukan Widanarto dkk. (2011) bahwa simulasi komprehensif pendeteksian gas SO₂ pada bahan ZnO berbasis perubahan fungsi kerja belum dilakukan. Salah satu cara untuk memahami pendeteksian gas SO₂ pada permukaan bahan dengan melakukan simulasi komprehensif (Marjunus, 2018).

Menurut Marjunus dkk. (2022) kelebihan melakukan simulasi komprehensif berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) yaitu dapat mencari nilai *coverage*/hunian atom/molekul gas pada permukaan bahan. *Coverage*/hunian atom/molekul H₂O (θ_{H_2O}) pada permukaan bahan Pt₈₀Au₁₄Ti₆ pada awal simulasi adalah nol, kemudian *coverage*/hunian molekul air bertambah seiring dengan terpaparnya gas H₂ yang disebabkan karena atom oksigen yang diserap dan molekul H yang diserap bereaksi satu sama lain. Nilai *coverage*/hunian atom/molekul oksigen (θ_O) lebih sedikit daripada *coverage*/hunian atom/molekul H (θ_H). Tetapi *coverage*/cakupan atom/molekul oksigen (θ_O) mempunyai pengaruh lebih besar pada fungsi kerja Pt₈₀Au₁₄Ti₆ . Hal ini terjadi karena oksigen merupakan gas yang berinteraksi pertama kali dengan permukaan Pt₈₀Au₁₄Ti₆. Oksigen mengubah fungsi kerja Pt₈₀Au₁₄Ti₆ pada awal proses, kemudian *coverage*/hunian atom/molekul oksigen menurun karena reaksi dengan atom H yang terpapar sehingga menyebabkan perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$).

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Bagaimana simulasi atau pemodelan untuk mendeteksi gas SO₂ pada permukaan ZnO berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) ?
2. Bagaimana perbandingan hasil simulasi dengan hasil eksperimen ?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Simulasi komprehensif reaksi SO₂ akan dibentuk menjadi persamaan differensial orde satu;
2. Simulasi dalam penelitian ini menggunakan *software* MATLAB;
3. Penelitian ini menggunakan 12 reaksi dasar dengan menghasilkan 48 parameter yang akan digunakan untuk mengukur perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$);
4. Hasil simulasi yang diperoleh akan dibandingkan dengan hasil penelitian yang telah dilakukan oleh Widanarto dkk. (2011).

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Membuat simulasi atau pemodelan untuk mendeteksi gas SO₂ pada permukaan ZnO berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$);
2. Membandingkan hasil simulasi dengan hasil eksperimen.

1.5 Manfaat penelitian

Manfaat penelitian ini adalah berkontribusi dalam ilmu pengetahuan terkait simulasi komprehensif sensor gas SO₂ pada permukaan ZnO berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$).

II. TINJAUAN PUSTAKA

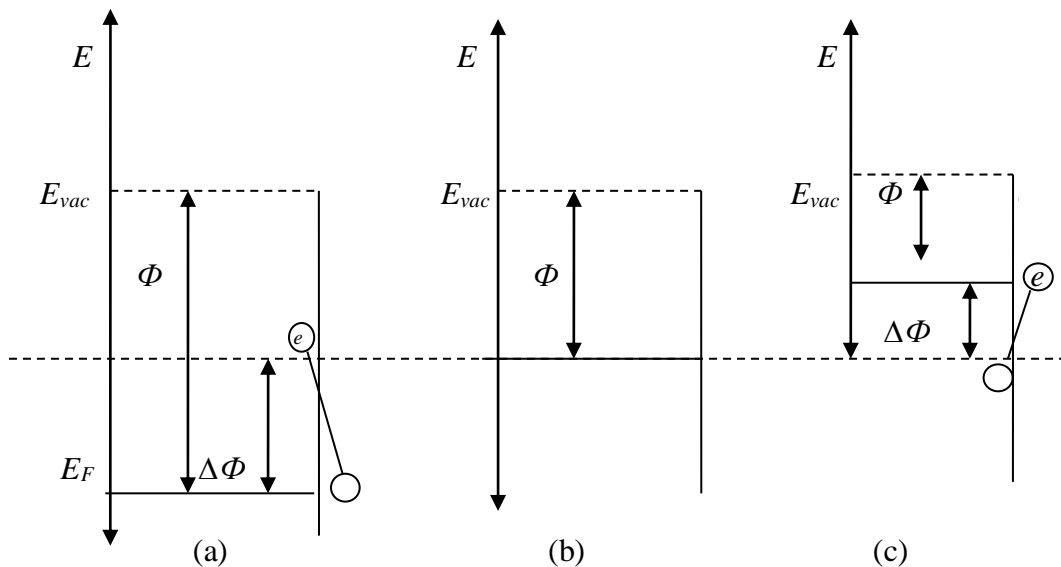
2.1 Fungsi Kerja

Fungsi kerja (Φ) merupakan energi minimum yang dibutuhkan untuk melepaskan elektron dari permukaan sebuah logam atau semikonduktor ke sebuah titik tak terhingga di luar permukaan. Fungsi kerja pada umumnya juga didefinisikan sebagai selisih antara energi elektron pada tingkat energi Fermi (E_f) dan tingkat energi vakum (E_{vac}).

Menurut Senft dkk. (2011) nilai fungsi kerja dapat dihitung dengan menggunakan Persamaan 2.1 berikut ini :

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

Mekanisme perubahan fungsi kerja bahan yang disebabkan penyerapan suatu gas ditunjukkan seperti Gambar 2.1.



Gambar 2.1 Grafik energi perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) akibat adsorpsi gas pada permukaan bahan, Gambar (a) terpapar gas pengoksidasi, Gambar (b) tidak terpapar gas dan Gambar (c) terpapar gas pereduksi (Senft dkk, 2011).

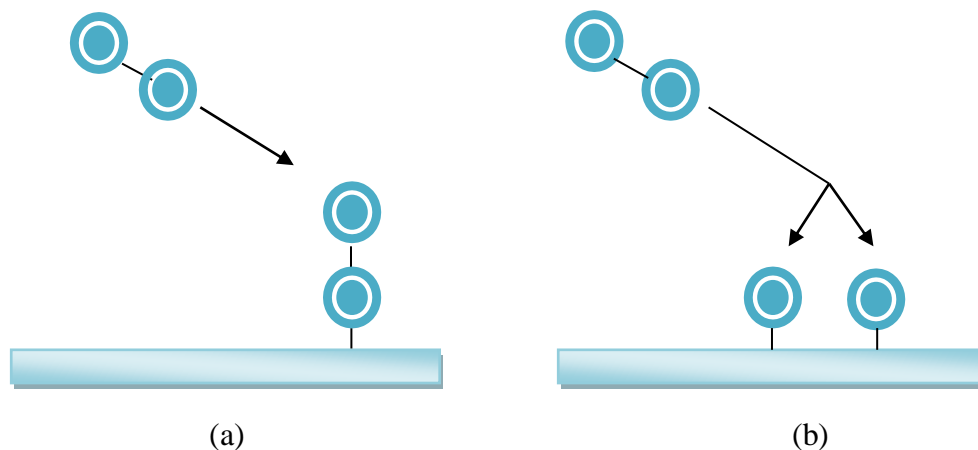
Dari Gambar 2.1 dapat dilihat bahwa jika gas pengoksidasi mengenai permukaan bahan, maka gas tersebut akan membawa sejumlah elektron yang mengurangi tingkat energi Fermi bahan sehingga fungsi kerja bahan tersebut meningkat. Jika gas pereduksi yang mengenai bahan, maka gas tersebut memberikan sejumlah elektron yang meningkatkan tingkat energi Fermi bahan sehingga fungsi kerja bahan menurun. Perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$, dalam eV) dapat dihitung menggunakan persamaan (2.2)

$$\Delta\Phi = E_F^{\text{Sebelum}} - E_F^{\text{Setelah}} \quad (2.2)$$

Fungsi kerja dari suatu bahan ternyata dapat berubah karena disebabkan oleh penyerapan molekul gas pada permukaan bahan. Jika suatu gas diberikan pada suatu bahan, fungsi kerja dari bahan tersebut akan mengalami perubahan akibat energi Fermi yang berubah (Capone, 2003).

2.2 Adsorpsi

Pada suatu permukaan padat yang terpapar oleh gas atau larutan, maka molekul dari gas atau larutan tersebut akan menumpuk dan terkonsentrasi di permukaan bahan. Fenomena ini disebut dengan adsorpsi. Adsorpsi gas pada permukaan dapat dibagi menjadi dua, yaitu adsorpsi fisika dan adsorpsi kimia. Seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2.2



Gambar 2.2. Adsorpsi gas pada permukaan, (a) Fisika, (b) Kimia (Senft dkk., 2011).

Pada Gambar 2.2 (a) proses adsorpsi fisika terjadi apabila gaya intermolekuler lebih besar dari pada gaya tarik menarik antara gas dengan permukaan bahan sehingga gas tetap berikatan. Sedangkan pada Gambar 2.2 (b) proses adsorpsi kimia terjadi karena gaya tarik menarik antara gas dengan permukaan bahan lebih besar dari pada gaya intermolekuler sehingga molekul gas akan terpecah ikatannya dan membentuk reaksi lain antar gas (Senft dkk, 2011).

Jumlah gas yang berada di permukaan bahan akan berubah persatuan waktu. Banyaknya gas yang diserap persatuan waktu ditunjukkan dengan persamaan 2.3 (Nix, 2014)

$$r_a = \frac{dN_{ads}}{dt} \quad (2.3)$$

dengan N_{ads} adalah jumlah atom atau molekul yang diserap pada permukaan yang dapat dihitung menggunakan Persamaan (2.4)

$$N_{ads} = \sigma\theta \quad (2.4)$$

dengan σ adalah rapat atom permukaan dari bahan (atom/m²) dan θ adalah hunian (*coverage*) gas pada permukaan sampel (*mono layer* atau ML). Nilai r_a tergantung fluks molekul yang datang ke permukaan bahan (F dalam molekul m⁻²s⁻¹) (Yan dan Xu, 2010). Nilai F ditunjukkan dengan persamaan 2.5

$$F = \frac{P}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad (2.5)$$

dan *sticking probability* (probabilitas lengket) (S) ditunjukkan pada Persamaan (2.6).

$$S = S_0(1 - \theta)^x \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (2.6)$$

dengan P adalah tekanan parsial dari gas (P_a), m adalah massa dari molekul gas (kg), k dalam tetapan Boltzmann = 1,38 x 10⁻²³ J/K dan T adalah suhu (K), S_0 adalah koefisien lengket awal atau koefisien lengket (*sticking coefficient*) ketika hunian/*coverage* (θ) gas masih nol atau tidak berdimensi, sedangkan z adalah factor 1 untuk gas yang tidak terdisosiasi dan 2 untuk gas yang terdisosiasi. Jika

Persamaan (2.3), Persamaan (2.4), Persamaan (2.5) dan Persamaan (2.6) digabungkan, maka akan diperoleh tingkat perubahan hunian/*coverage* (θ) gas pada suatu permukaan dalam proses adsorpsi (Marjunus, 2018), seperti yang ditunjukkan pada Persamaan (2.7)

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{s_0(1-\theta)^Z}{\sigma\sqrt{2mkT}} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (2.7)$$

2.3 Desorpsi

Molekul yang diserap oleh permukaan akan dilepaskan kembali jika diberikan energi yang disebut dengan energi desorpsi (E_d dan eV). Ketika atom atau molekul pada permukaan yang terserap akan dilepaskan maka laju perubahan hunian/*coverage* (θ) dapat dihitung dengan menggunakan Persamaan (2.8) (Senft, 2009)

$$\frac{d\theta}{dt} = v_d \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right) \theta \quad (2.8)$$

dengan v_d adalah nilai koefisien *Arrhenius* atau frekuensi desorpsi (desorpsi /detik).

2.4 Mekanisme Pendeteksian Gas SO₂

Reaksi kimia yang digunakan dalam penelitian Chalagan (2006) sangat penting digunakan dalam penelitian ini untuk menyelesaikan semua kemungkinan-kemungkinan reaksi yang terjadi. Menurut Chalagan (2006) bahwa sudah ada 60 reaksi yang dilaporkan oleh para ilmuwan. Pada penelitian ini hanya 12 reaksi yang digunakan terkait pendeteksian SO₂ pada bahan ZnO.

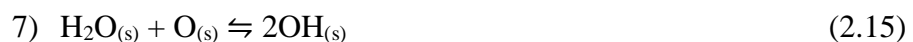
Chalagan (2006) melaporkan bahwa gas oksigen dapat mengenai permukaan bahan dan dapat menghasilkan reaksi yang ditunjukkan persamaan (2.9). Wu dkk. (2011) menyatakan gas SO₂ dapat terserap pada permukaan bahan dengan bentuk reaksi yaitu $\text{SO}_{2(g)} \rightleftharpoons \text{SO}_{2(ads)}$. Pada penelitian ini reaksi tersebut diusulkan seperti yang ditunjukkan pada Persamaan (2.10).

Uap air yang mengenai permukaan bahan akan teradsorpsi di permukaan bahan seperti yang ditunjukkan oleh Persamaan (2.11). Westley (1980) menyatakan

bahwa pada pembakaran gas SO₂ dapat bereaksi dengan oksigen, bentuk reaksi ditunjukkan pada Persamaan (2.12). Uap air pada fase adsorpsi juga dapat mengenai bahan dan menghasilkan reaksi pada Persamaan (2.13).

Pada Persamaan (2.14) menunjukkan reaksi OH pada fase adsorpsi menghasilkan O dan H pada fase adsorpsi. Pada Persamaan (2.15) menunjukkan reaksi H₂O dan O pada fase adsorpsi dan menghasilkan OH. Sedangkan pada Persamaan (2.16) H₂O dan O pada fase adsorpsi akan menghasilkan OH dan H₂ fase adsorpsi.

Reaksi OH dan H pada fase adsorpsi dapat menghasilkan O dan H fase adsorpsi seperti yang ditunjukkan Persamaan (2.17). Reaksi antara atom-atom H fase adsorpsi ditunjukkan pada persamaan 2.18. Sedangkan pada Persamaan (2.19) H₂ teradsorpsi pada permukaan bahan dapat menjadi H₂ dalam bentuk gas yang tertahan pada bahan. Atom H yang teradsorpsi pada permukaan bahan akan menjadi H₂ dalam bentuk gas seperti ditunjukkan Persamaan (2.20).



Reaksi Persamaan (2.9) – (2.20) merupakan reaksi yang akan digunakan pada penelitian ini, simbol (g) sebagai fase gas, (s) mewakili fase adsorpsi pada permukaan bahan. Selain itu, penelitian ini membutuhkan parameter- parameter sebagai pendukung dari setiap reaksi pada permukaan bahan ZnO yang akan

digunakan. Parameter laju adsorpsi/adsorpsi/reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel 2.1.

Tabel 2.1. Parameter laju adsorpsi/desorpsi/reaksi

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	$S_{01} = 10^{-3}$	$v_{d1} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f1} = 0,53$	$E_{r1} = 0,53$
2	$S_{02} = 10^{-3}$	$v_{d2} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f2} = 0,53$	$E_{r2} = 0,53$
3	$S_{03} = 10^{-3}$	$v_{r3} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f3} = 0,53$	$E_{r3} = 0,53$
4	$v_{f4} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r4} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f4} = 0,53$	$E_{r4} = 0,53$
5	$v_{f5} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r5} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f5} = 0,53$	$E_{r5} = 0,53$
6	$v_{f6} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r6} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f6} = 0,53$	$E_{r6} = 0,53$
7	$v_{f7} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r7} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f7} = 0,53$	$E_{r7} = 0,53$
8	$v_{f8} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r7} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f8} = 0,53$	$E_{r8} = 0,53$
9	$v_{f9} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r7} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f9} = 0,53$	$E_{r9} = 0,53$
10	$v_{f10} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r10} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f10} = 0,53$	$E_{r10} = 0,53$
11	$v_{f11} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r11} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f11} = 0,53$	$E_{r11} = 0,53$
12	$v_{f12} = 8,0515 \times 10^{12}$	$v_{r12} = 8,0515 \times 10^{12}$	$E_{f12} = 0,53$	$E_{r12} = 0,53$

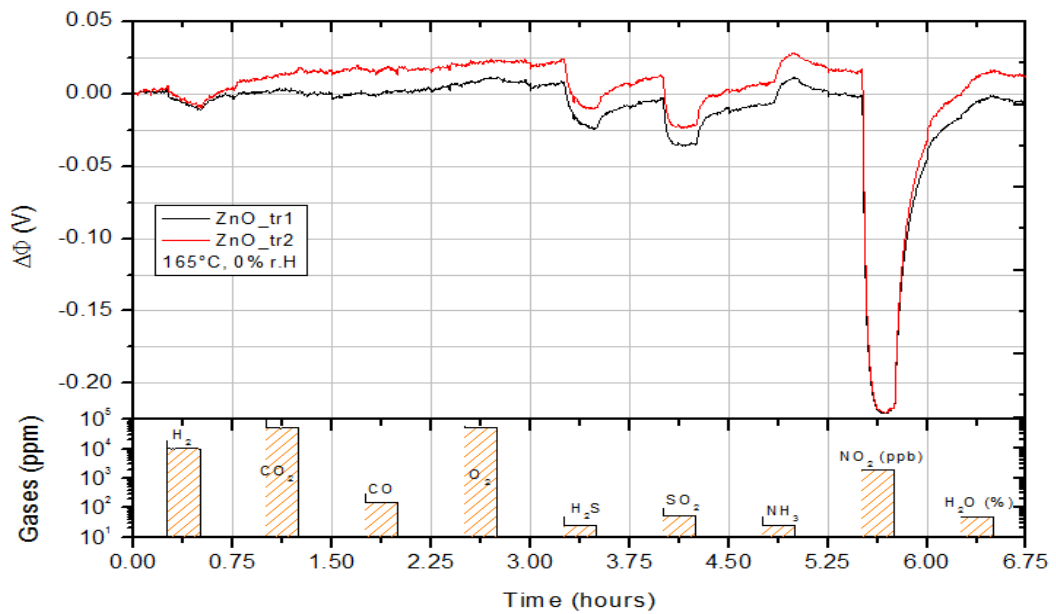
Berdasarkan Tabel 2.1 menjelaskan nilai parameter-parameter yang diperlukan adalah koefisien lengket (*sticking coefficient*) atau S_0 yang merupakan salah satu faktor pada peristiwa adsorpsi, v_f merupakan koefisien Arrhenius dari reaksi maju (*forward*), v_r merupakan koefisien Arrhenius mundur (*reverse*), v_d merupakan koefisien Arrhenius desorpsi dan E_r merupakan besarnya energi aktivasi (eV) dari reaksi mundur (*reverse*).

Toledano dan Henrich (2001) melaporkan bahwa nilai S_0 untuk kinetika adsorpsi SO_2 pada *Photoexcited* $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3^+$ sebesar 10^{-3} . Bahrendt (1999) melaporkan bahwa nilai koefisien lengket awal (*sticking coefficient*) (S_{02}) sebesar 10^{-3} , nilai koefisien Arrhenius (v_{d2}) sebesar $8,0515 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ dan energi aktivasi (E_{r2}) sebesar 0,53 eV. Matsuda (2005) melaporkan bahwa nilai energi aktivasi (E_{r2}) sebesar 0,53 eV. Wesley (1980) melaporkan bahwa nilai koefisien Arrhenius reaksi maju sama dengan reaksi mundur yaitu sebesar $1,30 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ dan energi aktivasi reaksi maju sama dengan energi aktivasi reaksi mundur yaitu sebesar 0,8646 eV. Hasil yang dilaporkan Wesley (1980) akan digunakan sebagai parameter pada penelitian ini, yaitu koefisien Arrhenius reaksi maju $v_{f3} = 1,3 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur $v_{r3} = 1,3 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju $E_{f3} = 0,8646 \text{ eV}$ dan energi aktivasi reaksi mundur $E_{r3} = 0,8646 \text{ eV}$.

Secara umum simulasi reaksi pendeteksian gas berbasis perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) seperti yang telah dilakukan Senft dkk. (2011) dan Marjunus (2018) terdapat nilai *coverage*/hunian (θ) pada permukaan bahan. Tetapi dari hasil studi literatur yang telah dilakukan tidak didapatkan data untuk *coverage*/hunian (θ) pada fungsi kerja bahan ZnO. Sehingga akan diusulkan berupa nilai fungsi kerja (Φ) ZnO yang berbanding lurus dengan nilai $\theta_{\text{SO}_2}, \theta_{\text{O}}, \theta_{\text{SO}}, \theta_{\text{O}_2}, \theta_{\text{H}_2\text{O}}, \theta_{\text{OH}}, \theta_{\text{H}}$, dan θ_{H_2} yang akan dijelaskan pada Bab 3.

2.5 Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$) ZnO pada Pendeteksian Gas SO_2

Perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) menggunakan bahan ZnO karena berinteraksi dengan gas NO_2 berhasil diukur dengan berbagai suhu dan kelembaban relatif. Widanarto dkk. (2011) berhasil membuat sensor gas NO_2 menggunakan sistem *Floating Gate Field Effect Transistor* (FG-FET) dengan ZnO sebagai bahannya. Sensitivitas dan selektivitas sensor menunjukkan 1-20 ppm NO_2 pada rentang suhu antara suhu kamar dan 165 °C, seperti yang dapat dilihat pada Gambar 2.3.



Gambar 2.3. Selektivitas sensor untuk 8 jenis gas berbeda pada suhu 165 °C dalam kondisi kering (Widanarto dkk, 2011).

Pada Gambar 2.3, selektivitas sensor ditandai dengan memaparkan ke H₂, CO₂, CO, O₂, H₂S, NH₃, H₂O dan SO₂. Bahan ZnO menampilkan sinyal gas NO₂, H₂S, NH₃ dan SO₂. Walaupun perubahan sinyal yang ditampilkan lemah, namun keberadaan gas tersebut masih terdeteksi dan menghasilkan perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$). Pendeteksian gas SO₂ membutuhkan rentang waktu 45 menit hingga mendapatkan sinyal perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂. Sebelumnya diberikan atmosfer (*synthetic air*) selama 15 menit kemudian dilanjutkan dengan pemberian gas SO₂ selama 15 menit dan diakhiri dengan pemberhentian gas SO₂ selama 15 menit, sehingga didapatkan nilai perubahan kerja ($\Delta\Phi$) sebesar -35 mV.

METODE PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Fisika Material, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung pada bulan September 2023 sampai dengan bulan September 2024.

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.

3.3 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian yang akan dilaksanakan adalah sebagai berikut :

3.3.1 Menyusun Persamaan Diferensial Biasa Orde Satu

Pada langkah ini persamaan reaksi 2.9 – 2.20 disusun menjadi persamaan diferensial orde satu terkopel untuk mendapatkan nilai *coverage*/hunian (θ) dan perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) pada permukaan ZnO.

3.3.2 Grafik *Fitting*

Pada tahap ini dilakukan pendekatan grafik penelitian yang dilakukan oleh Widanarto dkk. (2011) dengan melakukan *fitting* persamaan garis untuk memudahkan perhitungan nilai *error*. Langkah-langkah yang akan dilakukan sebagai berikut :

1. Data hasil penelitian Widanarto dkk. (2011) dimasukkan ke *software* origin;
2. Melakukan *plotting* grafik penelitian Widanarto dkk. (2011);
3. Mendapatkan grafik hasil penelitian Widanarto dkk. (2011);
4. Melakukan *fitting* persamaan garis pada *software* origin;
5. Mengambil grafik hasil *fitting* dan persamaan garis.

3.3.3 Optimasi Parameter

Pada langkah ini parameter yang dapat diukur berdasarkan nilai rerata *error* terkecil dengan lebar partisi dan *range* yang berbeda. Rerata *error* adalah nilai *error* terkecil dari banyaknya data yang digunakan. Semakin banyak data dan lebar yang digunakan maka semakin halus standar *error* yang didapatkan dan juga semakin kecil dan *representative* (mewakili). Langkah- langkah yang dilakukan adalah sebagai berikut:

1. Persamaan defferensial biasa orde satu di masukkan ke dalam program;
2. *Fitting* persamaan garis hasil penelitian Widanarto dkk. (2011) dimasukkan ke dalam program untuk didapatkan nilai rerata *error* terkecil;
3. Simulasi pendeteksian gas SO₂ menggunakan variasi waktu 45 menit. Selama 15 menit pertama pemberian atmosfer (*synthetic air*), kemudian dilanjutkan dengan pemberian gas SO₂ selama 15 menit kedua dan diakhiri dengan pemberhentian gas SO₂ selam 15 menit;
4. Nilai fungsi kerja ZnO akan terhadap nilai $\theta_{\text{SO}_2}, \theta_{\text{O}}, \theta_{\text{SO}}, \theta_{\text{O}_2}, \theta_{\text{H}_2\text{O}}, \theta_{\text{OH}}, \theta_{\text{H}}, \text{ dan } \theta_{\text{H}_2}$ diusulkan berbanding lurus dengan nilai $\theta_{\text{SO}_2}, \theta_{\text{O}}, \theta_{\text{SO}}, \theta_{\text{O}_2}, \theta_{\text{H}_2\text{O}}, \theta_{\text{OH}}, \theta_{\text{H}}, \text{ dan } \theta_{\text{H}_2}$;
5. Nilai parameter-paramater pada Tabel 2.1 akan dibuat konstan. Akan tetapi untuk ketiga nilai parameter yang belum diketahui akan diusulkan dengan memberikan nilai tebakan awal atau nilai coba dengan mengikuti nilai yang ada pada parameter oksigen. Sehingga nilainya yaitu v_d sebesar $8,0515 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$, $E_{\text{fl}} = 0,53 \text{ eV}$ dan $E_{\text{r1}} = 0,53 \text{ eV}$;
6. Seluruh parameter pada Tabel 2.1 dioptimasi satu per satu sampai memperoleh nilai rerata *error* terkecil;

7. Grafik rerata *error* perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) terhadap nilai parameter pada simulasi didapatkan;
8. Nilai terbaik dari tiap parameter yang didapatkan berdasarkan nilai rerata *error* terkecil;
9. Jika terjadi pergeseran nilai parameter pada optimasi kedua dari hasil optimasi pertama maka nilai akhir rerata didapat dari nilai optimasi pertama dengan nilai optimasi kedua.

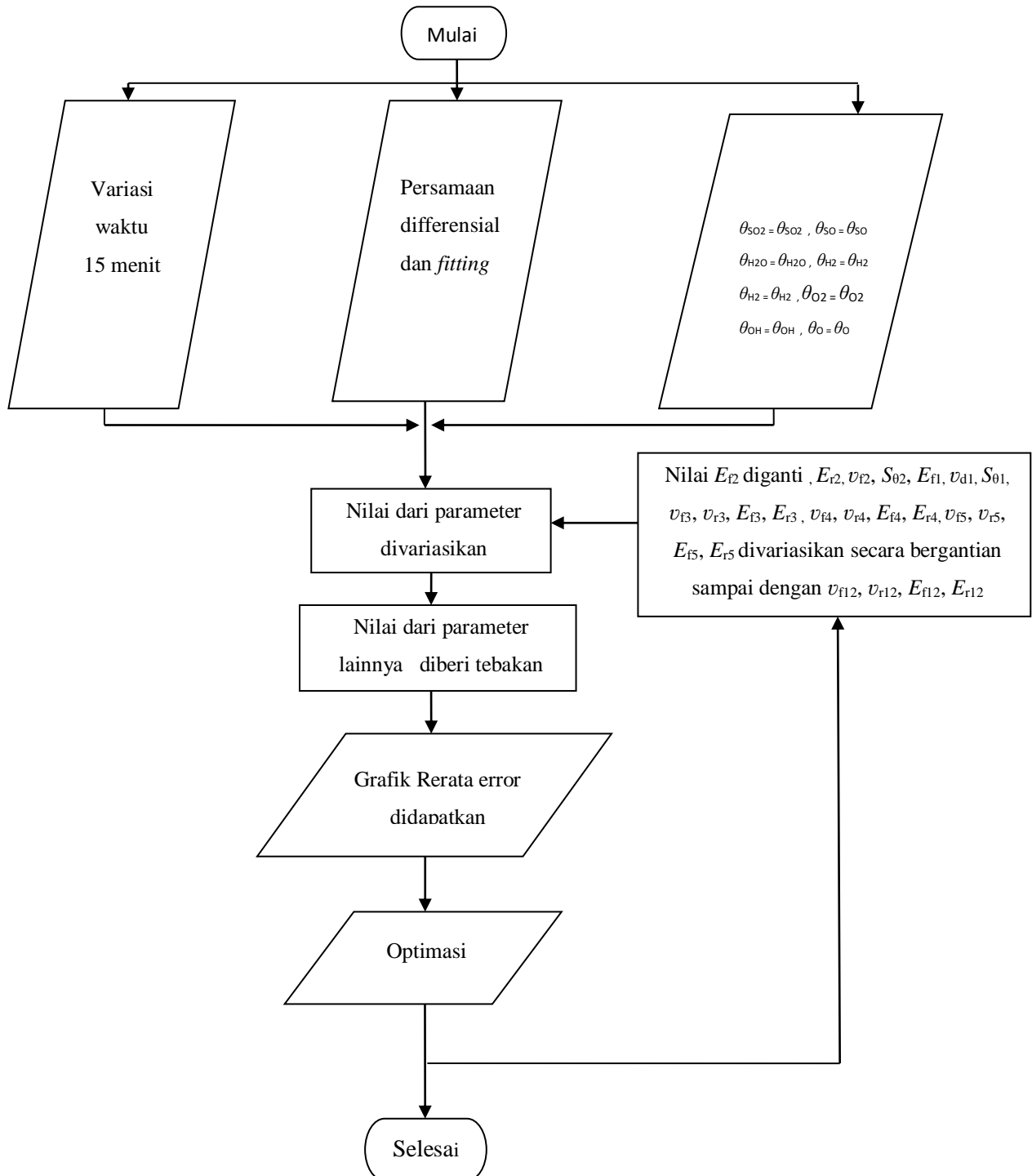
3.3.4 Simulasi Komprehensif Perubahan Fungsi Kerja ($\Delta\Phi$)

Jika semua nilai terbaik parameter yang didapatkan maka parameter-parameter tersebut diselesaikan kembali menggunakan program untuk mendapatkan nilai perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) terhadap waktu. Langkah-langkah yang dilakukan antara lain :

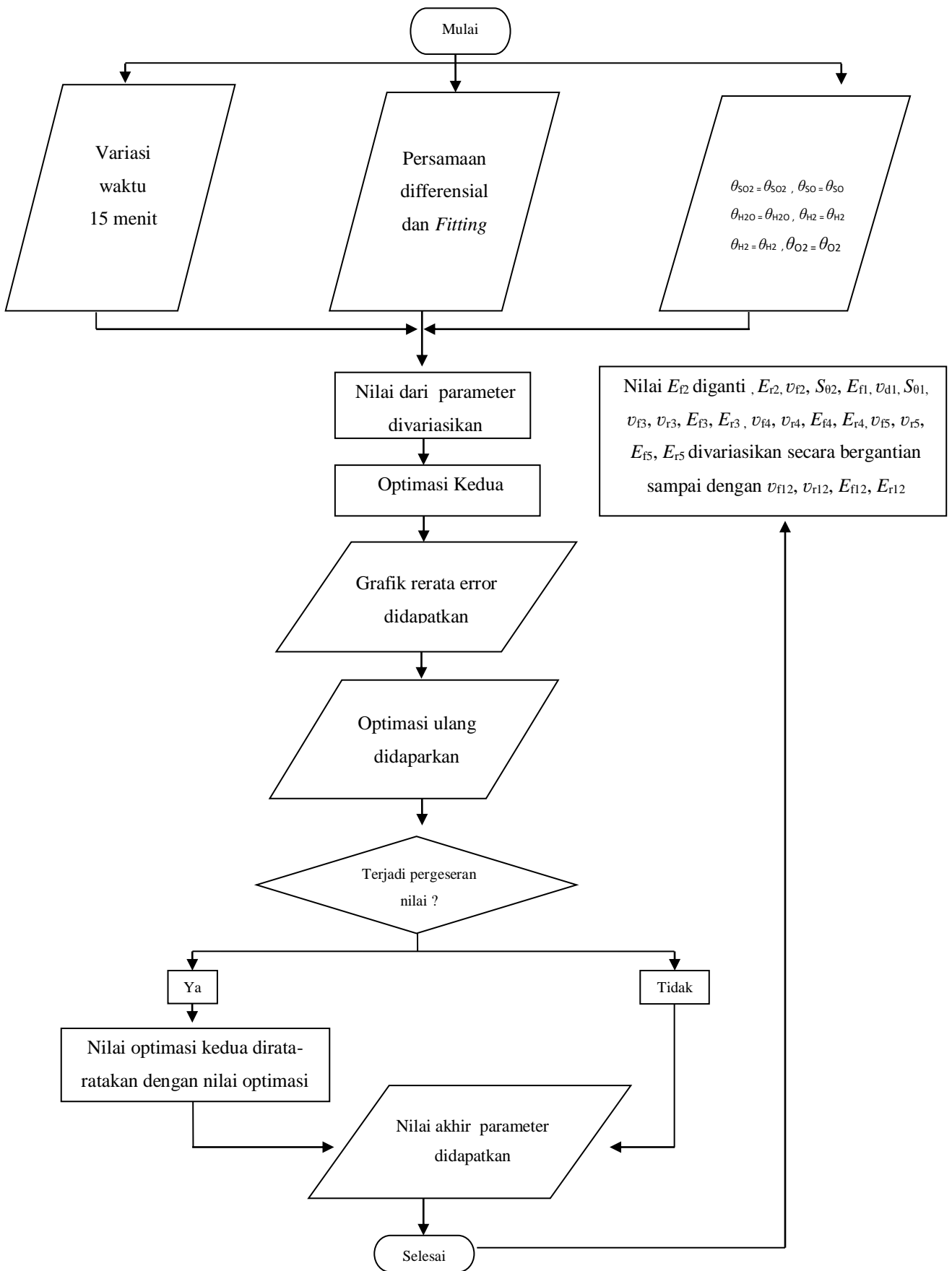
1. Memasukkan persamaan diffrensial orde satu terkopel ke dalam program MATLAB;
2. Simulasi pendeteksian gas SO₂ menggunakan variasi waktu 45 menit. Selama 15 menit pertama pemberian atmosfer (*synthetic air*), kemudian dilanjutkan dengan pemberian gas SO₂ selama 15 menit kedua dan diakhiri dengan pemberhentian gas SO₂ selam 15 menit;
3. Nilai fungsi kerja ZnO akan terhadap nilai $\theta_{SO_2}, \theta_O, \theta_{SO}, \theta_{O_2}, \theta_{H_2O}, \theta_{OH}, \theta_H$, dan θ_{H_2} diusulkan berbanding lurus dengan nilai $\theta_{SO_2}, \theta_O, \theta_{SO}, \theta_{O_2}, \theta_{H_2O}, \theta_{OH}, \theta_H$, dan θ_{H_2} ;
4. Semua paramater yang sudah didapatkan dimasukkan ke dalam penyelesaian persamaan diferensial;
5. Nilai *coverage*/hunian (θ) dan perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) didapatkan permukaan bahan ZnO secara simulasi;
6. Grafik perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) terhadap waktu dibuat menggunakan MATLAB;
7. Hasil simulasi dibandingkan dengan hasil penelitian Widanarto dkk. (2011) dan menentukan besaran-besaran.

3.4 Diagram Alir

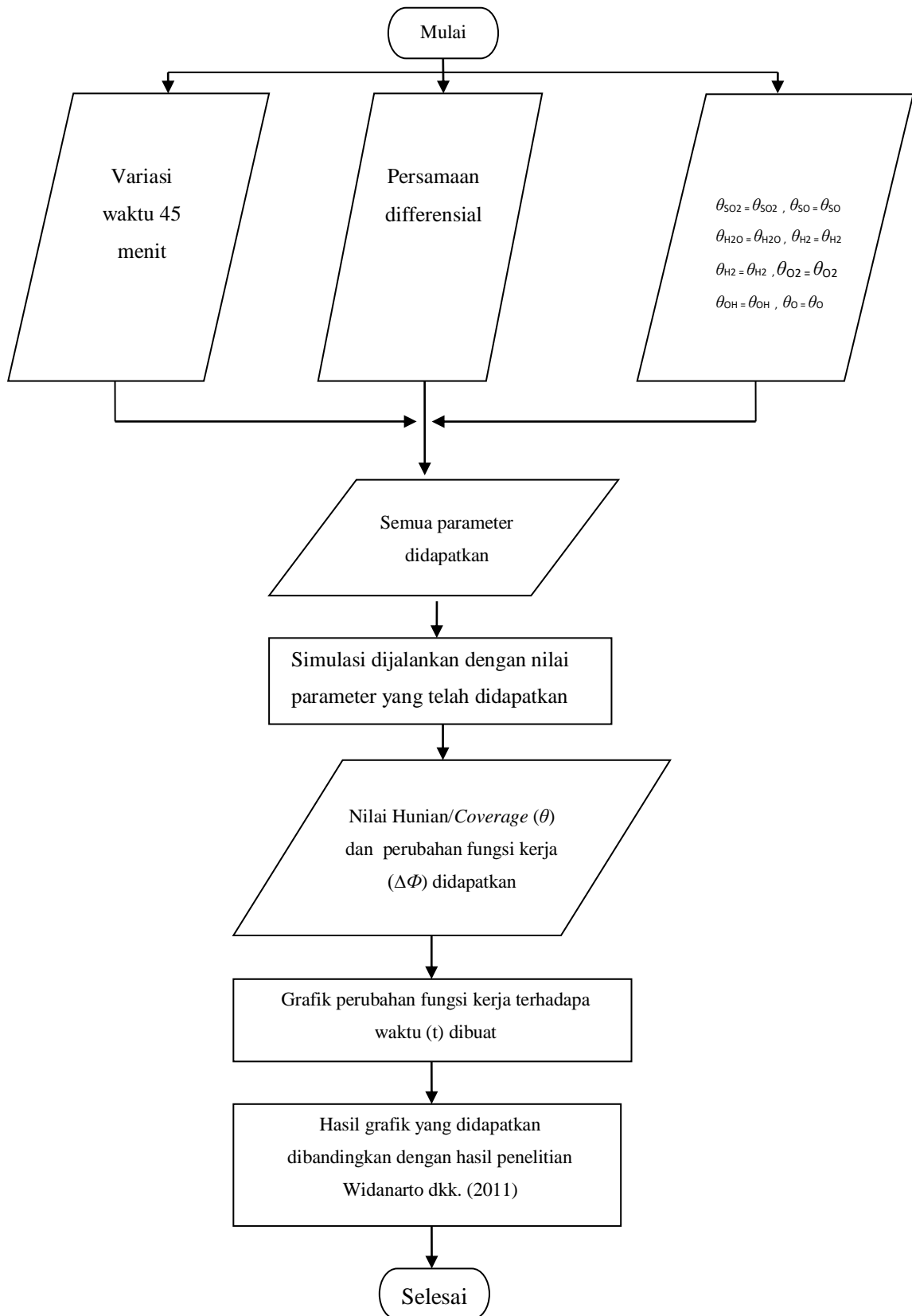
Diagram alir dalam penelitian ini dapat dilihat pada Gambar 3.1 – 3.3.



Gambar 3.1. Diagram alir optimasi



Gambar 3.2. Diagram alir optimasi ulang semua parameter.



Gambar 3.3. Diagram alir simulasi final perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) terhadap waktu (t).

V. SIMPULAN DAN SARAN

5.1 Simpulan

Adapun simpulan dari hasil penelitian yang telah dilakukan adalah :

1. Pada penelitian ini berhasil membuat persamaan diferensial biasa orde satu untuk menentukan nilai *coverage*/hunian atom/molekul/gas pada permukaan bahan ZnO.
2. *Fitting* persamaan garis perubahan fungsi kerja pada hasil penelitian Widanarto dkk. (2011) didapatkan persamaan polinomial orde ke-9 dengan nilai *Intercept* = 0.00315, $B_1 = 1,26572 \times 10^{-4} \text{ V/s}$, $B_2 = -1,109 \times 10^{-6} \text{ V/s}^2$, $B_3 = 4,18246 \times 10^{-9} \text{ V/s}^3$, $B_4 = -7,691 \times 10^{-12} \text{ V/s}^4$, $B_5 = 7.66628 \times 10^{-15} \text{ V/s}^5$, $B_6 = -4,41231 \times 10^{-18} \text{ V/s}^6$, $B_7 = 1,47543 \times 10^{-21} \text{ V/s}^7$, $B_8 = -2,67406 \times 10^{-25} \text{ V/s}^8$ dan $B_9 = 2,03817 \times 10^{-29} \text{ V/s}^9$.
3. Penelitian ini berhasil membuat simulasi atau pemodelan pada program MATLAB dengan menghasilkan 48 nilai parameter reaksi baru untuk pendeteksian gas SO₂ pada bahan ZnO.
4. Optimasi parameter dilakukan dua kali yaitu optimasi pertama dan optimasi kedua dengan hasil nilai rerata *error* simulasi final perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂ pada bahan ZnO pada optimasi pertama sebesar 0,01143 V, optimasi kedua sebesar 0,03169 V dan rerata optimasi pertama dan kedua menghasilkan nilai rerata *error* sebesar 0,04576 V.
5. Nilai rerata *error* terkecil simulasi final perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂ terjadi pada optimasi pertama sebesar 0,01143 V dengan nilai parameter masing-masing yaitu energi adsorpsi SO₂ (E_{f1}) sebesar 0,45 eV, energi desorpsi SO₂ (E_{f2}) sebesar 0,45 eV, koefisien desorpsi SO₂ (v_{d1}) sebesar $8,97 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, *initial sticking coefficient* SO₂ (S_{01}) sebesar 0,066 s⁻

¹, energi adsorpsi atom O (E_{f2}) sebesar 0,41 eV, energi desorpsi atom O (E_{r2}) sebesar 0,0935 eV, koefisien Arrhenius desorpsi atom O (v_{d2}) sebesar $1,3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, *initial sticking coefficient* (S_{02}) atom O sebesar $0,5 \text{ s}^{-1}$, energi adsorpsi H₂O (E_{f3}) sebesar 0,67 eV, energi desorpsi H₂O (E_{r3}) sebesar 0,0935 eV, koefisien Arrhenius H₂O (v_{r3}) sebesar $5,0 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$ dan *initial sticking coefficient* (S_{03}) H₂O sebesar $1,5 \times 10^{-7}$, koefisien Arrhenius reaksi maju SO (v_{f4}) sebesar 12 s^{-1} , koefisien Arrhenius reaksi mundur SO (v_{r4}) sebesar $4,9 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju SO (E_{f4}) sebesar 0,55 eV, energi aktivasi reaksi mundur atom O (E_{r4}), koefisien Arrhenius reaksi maju O₂ (v_{f5}) sebesar $1,7 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur O₂ (v_{r5}) sebesar $7,9 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju O₂ (E_{f5}) sebesar 0,84 eV, energi aktivasi reaksi mundur O₂ (E_{r5}) sebesar 0,0011 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju OH (v_{f6}) sebesar $1,0 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur OH (v_{r6}) sebesar $5,0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju OH (E_{f6}) sebesar 0,0002 eV, energi aktivasi reaksi mundur OH (E_{r6}) sebesar 0,425 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju atom H (v_{f7}) sebesar $9,9 \times 10^{20} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur atom H (v_{r7}) sebesar $7,4 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju atom H (E_{f7}) sebesar 0,0188 eV, energi aktivasi reaksi mundur atom H (E_{r7}) sebesar 0,186 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju H₂ (v_{f8}) sebesar $5,7 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur H₂ (v_{r8}) sebesar $8,88 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju H₂ (E_{f8}) sebesar 0,01 eV, energi aktivasi reaksi mundur H₂ (E_{r8}) sebesar 0,0009 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju sulfur dioksida (v_{f9}) sebesar $8,0 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur sulfur dioksida (v_{r9}) sebesar $9,65 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju sulfur dioksida (E_{f9}) sebesar 0,6 eV, energi aktivasi reaksi mundur sulfur dioksida (E_{r9}) sebesar 0,01 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju atom oksigen (v_{f10}) sebesar $9,5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, koefisien Arrhenius reaksi mundur atom oksigen (v_{r10}) sebesar 20 s^{-1} , energi aktivasi reaksi maju atom oksigen (E_{f10}) sebesar 0,003 eV, energi aktivasi reaksi mundur atom oksigen (E_{r10}) sebesar 0,71 eV, koefisien Arrhenius reaksi maju H₂O (v_{f11}) sebesar $7,2 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$, energi aktivasi reaksi maju H₂O (E_{f11}) sebesar 0,125

eV, koefisien Arrhenius reaksi maju sulfur oksida (v_{f11}) sebesar $5,26 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ dan energi aktivasi reaksi maju sulfur oksida (E_{f11}) sebesar 0,003 eV.

6. *Coverage/hunian* atom/molekul pada bahan ZnO diambil dari data simulasi final perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂ dengan nilai rerata *error* terkecil yaitu pada simulasi final perubahan fungsi kerja gas ($\Delta\Phi$) SO₂ pada bahan ZnO untuk optimasi pertama.
7. *Coverage/hunian* atom/molekul/gas yang didapatkan antara lain atom oksigen (θ_{O}) sebesar $1,6502 \times 10^{-6}$ ML, *coverage/hunian* molekul SO₂ (θ_{SO_2}) sebesar $5,50791 \times 10^{-14}$ ML dan *coverage/hunian* molekul H₂O ($\theta_{\text{H}_2\text{O}}$) sebesar $1,08069 \times 10^{-14}$ ML. *Coverage/hunian* atom/molekul/gas mempengaruhi perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂.
8. Perbandingan antara grafik simulasi perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂ pada bahan ZnO memiliki tren yang sama dengan hasil penelitian Widanarto dkk. (2011).
9. Hasil simulasi perubahan fungsi kerja gas SO₂ pada bahan ZnO dengan penelitian Widanarto dkk. (2011) berbeda karena pada simulasi ini hanya menggunakan 48 parameter dengan melibatkan 12 reaksi dasar. Oleh karena itu perlu dilakukan investigasi persamaa reaksi yang lain untuk mendapatkan hasil yang lebih optimal.

5.2 Saran

Perbedaan hasil simulasi perubahan fungsi kerja gas SO₂ pada bahan ZnO dengan penelitian Widanarto dkk. (2011) terjadi karena pada simulasi ini hanya menggunakan 48 parameter dengan melibatkan 12 reaksi dasar. Akan tetapi pada penelitian yang telah dilakukan bahwasanya grafik simulasi perubahan fungsi kerja ($\Delta\Phi$) gas SO₂ pada bahan ZnO memiliki tren yang sama dengan hasil penelitian Widanarto dkk. (2011). Untuk mendapatkan nilai parameter terbaik dan hasil yang optimal perlu dilakukan investigasi persamaa reaksi yang lain.

DAFTAR PUSTAKA

- Bahrendt, F. 1999. Exxperimentelle und numerische beschreibung katalytischer zund-und verbrennungsprozesse. Habilitationsschrift. Fakultat fur Energietechnik der Universitat Stuttgart. Germany.
- Callaghan, C.A. 2006. Kinetics and Catalysis of Water-Ga-Shift Reaction : A Microkinetic and Graph Theoretic Approach. *Dissertation*. Massachusets: Worcester Polytechnic Institute. USA
- Capone, S., Fsorleo, A., Francioso, L., Rella, R., Siciliano, ,. Spadavecchia, J., Presicce D, S., and A.M Taurino. 2003. *Solid State Gas Sensors : State Of The Art and Future Activities Journal of Optoeletronics and Advanced Materials*. Vol .5. No. 5. Hal 1335-1348.
- Chang, J.F., Kuo, H. H., Leu, I. C., dan Hon, M. H. 2002. The effect of Tickness and Operation Temperature on ZnO: Al Thin Film CO Gas Sensor. *Sensors and Actuators, B: Chemical*. Vol. 84. No. 2. Hal. 258-264.
- Hong, T., Kima, C. H., Shina, J., Kim, K.Y., Kim, J. S., Hwang, C.S., dan Lee, J. H. ,2016. Highly selective ZnO gas sensor based on MOSFET having a horizontal floating-gate. *Sensors and Actuators B: Chemical*. Vol. 232. Hal. 653-659.
- Hulanicki, A., Glab, S., dan Ingman, F. 1991. Chemical Sensors Definitions and Classifications. *Pure and Applied Chemistry*. Vol. 63. No. 9. Hal 1247-1250.
- Kawamoto, K., Hayasak, T., Nakajima, T., Streets, D., dan Woo, J. H. 2004. Examining the Aerosol Inderect Effect Over China Using an SO₂ Emission Inventory. *Atmospheric Research*. Vol. 72. Hal. 353-363.
- Khan, R. R., dan Siddiqui, M. J. A.,. 2014. Review on Effects of Particulates: sulfur dioxide and nitrogen dioxide on human health. *International Research Journal of Environment Sciences*. Vol. 3. Hal. 70-73.
- Lide. R. D. 2003. *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th edn*. CRC Pres. Florida.
- Marjunus, R. 2018. Development of Pt-based Sensitive Layer for Carbon Monoxide Work Function Change Based Sensor in Air at Room Temperature. *Disertasi*. Fakultät Fur Electrotechnik und Informationstechnik. Universität de Bundeswehr Munchen. Germany.

- Marjunus, R., Al Fath, Y., Yulianti, Y dan Widanarto, W. 2022. Simulation of $\text{Pt}_8\text{O}\text{Au}_{14}\text{Ti}_6$ Work Function Change-Based Sensor of H_2 Gas. *Journal of Physical Science*. Vol. 33(3), Hal. 45–62.
- Matsuda, K. dan Harada, S. 2005. Dynamical Desorption Process of Oxygen on Platinum by Using a Gas Controllable H_2 | H^+ Electrolyte | Pt Cell. *Materials Transactions*. Vol. 46. No. 5. Hal. 1058-1063.
- Moseley, P. T. 1997. Review Article solid State Gas Sensors. *Measurement Sciences and Technology*. Vol. 8. Hal. 223-237.
- Nix, R. M. 2014. *An Introduction to Surface Chemistry*. Queen Mary University of London. London.
- Senft, C., Iskra, P., Eisele, I., dan Hansch, W. 2011. *Work Function – Based Sensor: Schottky – and FET –Based Devices* (in *Chemical Sensors: Comprehensive Sensor Technologies*, Editor: G. Korotchenkov). Volume 4. Momentum Press. New York.
- Smith, S. J., Pitcher, H., dan Wigley, T. M. I. 2001. Global and Regional Anthropogenic Sulfur dioxide Emissions. *Global and Planetary Change*. Vol. 29. Hal. 99-119.
- Syty, A. 1973. Determination of Sulfur Dioxide by Ultraviolet Absorption Spectrometry. *Analytical Chemistry*. Vol. 45. No.9. Hal. 1744-1747.
- Toledano, D.S., Henrich, V.E. 1999. Photoexcited surfaces: Properties and chemisorption. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*. Vol. 16 Hal 1050-1054.
- Widanarto, W., Senft, C., Senftleben, O., Hansch, W., dan Eisele, I. 2011. Characterization and Sensing Properties of ZnO Film in FG-FET Sensor System for NO_2 Detection. *International Journal of Basic and Applied Sciences IJBAS-IJENS*. Vol. 11. No. 1. Hal. 104-108.
- Wu, L. Y., Tong, S. R., Wang, W. G., dan Gew, M. F. 2011. Effects of Temperature on the Heterogeneous Oxidation of sulfur by Ozone on Calcium Carbonate. *Atmospheric Chemistry and Physics*. Vol 11. Hal. 6593-6605.
- Wesley, F. 1980. *Table of Recommended rate Constants For Chemical Reactions Occurring in Combustion*. National standard Reference data System. Washington.
- Yan, X. T., Xu, Y. 2010. *Chemical Vapor Deposition*. Springer- Verlag. London.