

**SIMULASI MEKANISME REAKSI PENDETEKSIAN GAS NO<sub>2</sub>  
PADA BAHAN ZnO BERBASISKAN FUNGSI KERJA**

**(Tesis)**

**Oleh**

**DIAH PURWARINI**

**2027042001**



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

## **ABSTRAK**

### **SIMULASI MEKANISME REAKSI PENDETEKSIAN GAS NO<sub>2</sub> PADA BAHAN ZnO BERBASISKAN FUNGSI KERJA**

**Oleh**

**DIAH PURWARINI**

Telah dilakukan penelitian yang bertujuan mengetahui bentuk simulasi komputasi dari pendeteksian gas NO<sub>2</sub> pada sensor ZnO yang berbasiskan perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ). Hasil simulasi kemudian dibandingkan dengan hasil eksperimen Widanarto (2011). Simulasi pada penelitian ini dijalankan menggunakan MATLAB dengan Persamaan Differensial Biasa Orde Satu Terkopel didasarkan pada lima persamaan reaksi yang digunakan. Dari penelitian ini, diketahui bahwa O merupakan cakupan yang mendominasi dipermukaan ZnO, dan diperoleh hasil bahwa nilai setiap parameter tidak saling bergantung dan mempengaruhi satu sama lain ketika dilakukan optimasi. Simulasi ini menghasilkan grafik perubahan fungsi kerja terhadap waktu kurang sesuai dengan hasil eksperimen yang didapatkan Widanarto seiring dengan waktu berjalannya simulasi ini.

**Kata kunci:** Gas NO<sub>2</sub>, Fungsi Kerja, Material ZnO

## **ABSTRACT**

### **SIMULATION OF NO<sub>2</sub> GAS DETECTION REACTION MECHANISM IN ZnO MATERIAL BASED ON WORK FUNCTION**

**By**

**DIAH PURWARINI**

Research has been carried out which aims to determine the form of computational simulation of NO<sub>2</sub> gas detection on ZnO sensors based on changes in work function ( $\Delta\phi$ ). The simulation results were then compared with the experimental results of Widanarto (2011). The simulations in this research were run using MATLAB with Coupled First Order Ordinary Differential Equations based on the five reaction equations used. From this research, it is known that O is the coverage that dominates the surface of ZnO, and the results obtained are that the values of each parameter are independent and influence each other when optimization is carried out. This simulation produces a graph of changes in the work function over time that is less in line with the experimental results obtained by Widanarto as the simulation progresses.

**Keywords:** NO Gases, Work Function, ZnO Materials.

**SIMULASI MEKANISME REAKSI PENDETEKSIAN GAS NO<sub>2</sub> PADA  
BAHAN ZnO BERBASISKAN FUNGSI KERJA**

**Oleh**

**Diah Purwarini  
2027042001**

**Tesis**

**Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Mencapai Gelar  
MAGISTER SAINS  
Pada  
Program Studi Magister Fisika  
Jurusan Fisika  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**



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

Judul Tesis : **Simulasi Mekanisme Reaksi Pendeteksian Gas NO<sub>2</sub> pada Bahan ZnO Berbasis Fungsi Kerja**

Nama Mahasiswa : **Diah Purwarini**

Nomor Pokok Mahasiswa : 2027042001

Jurusan : Fisika

Program Studi : Magister Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



Pembimbing I

*an*

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

Pembimbing II

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

## 2. Mengetahui

Ketua Jurusan Fisika

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

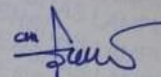
Ketua Program Studi  
Magister Fisika

Dr. Junaidi, S.Si, M.Sc.  
NIP. 198206182008121001

MENGESAHKAN

1. Tim Penguji

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

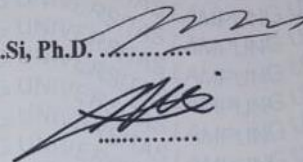


Sekretaris : Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si.



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

2. Dr. Junaidi, S.Si, M.Sc.




2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



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

3. Direktur Program Pascasarjana



  
Prof. Dr. Ir. Murhadi, M.Si.  
NIP. 196403261989021001

Tanggal Lulus Ujian Tesis: 19 Juni 2024

## PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam tesis ini yang berjudul “**Simulasi Mekanisme Reaksi Pendeteksian Gas NO<sub>2</sub> Pada Bahan ZnO Berbasis Fungsi Kerja**” tidak terdapat karya orang lain yang sama persis. Sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang ditulis, kecuali yang diacu dalam naskah ini disebutkan dalam daftar pustaka. Saya menyatakan pula bahwa tesis ini dibuat oleh saya sendiri.

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

Bandar Lampung, Juni 2024



Diah Purwarini  
NPM 2027042001

## RIWAYAT HIDUP



Penulis bernama lengkap Diah Purwarini dilahirkan di Gunung Tiga Kecamatan Batanghari Nuban Kabupaten Lampung Timur, Provinsi Lampung pada 10 Agustus 1997. Penulis merupakan putri kedua dari dua bersaudara yang lahir dari pasangan Bapak Sunarto dan Ibu Warsilah. Penulis telah menyelesaikan pendidikan Sekolah Dasar di SDN 2 Gunung Tiga Tahun 2009, Sekolah Menengah Pertama di SMPN 2 Pekalongan tahun 2012, serta Sekolah Menengah Atas di SMAN 1 Pekalongan pada tahun 2015.

Selanjutnya pada tahun 2019 penulis menyelesaikan pendidikan Strata-1 di Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pegetahuan Alam, Universitas Lampung. Pada tahun 2020 penulis melanjutkan Program Magister Fisika dengan Penelitian Simulasi Mekanisme Reaksi Pendeteksian Gas  $\text{NO}_2$  Pada Bahan ZnO Berbasis Fungsi Kerja di Program Studi Magister Fisika, Universitas Lampung.



## MOTTO

“Dekati dulu Allahnya, lalu berjuang”

*“God will raise people who are faithful among you and people who are given some level of knowledge”(Al-Mujadalah :4)*

“Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai dengan kesanggupannya”.-  
QS. Al Baqarah: 286

*“Jadikan kegagalan sebagai pembelajaran untuk mencapai masa depan yang sukses”*

## PERSEMBAHAN

Dengan mengucapkan syukur Alhamdulillahrabbi'l'alamin kepada ALLAH  
SWT.

Kupersembahkan karya ini kepada Bapak dan Mamaku tersayang

*Sunarto dan Warsilah*

yang selalu memberikan do'a, kasih sayang, dan menjadi penyemangatku  
disetiap langkah, serta keluarga besar yang selalu memberikan  
bantuan, dukungan dan semangat.

Sahabat dan rekan terbaik yang telah memberikan warnadan  
kebahagiaan, serta menemani dan berjuang bersamaku.

Dan

**“Almamater tercinta Universitas Lampung”**

## KATA PENGANTAR

Alhamdulillah rabbi'l'amin, segala puji hanya milik Allah SWT atas limpahan rahmat, kesehatan dan pertolongan-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan tesis yang berjudul **“Simulasi Mekanisme Reaksi Pendeteksian Gas NO<sub>2</sub> Pada Bahan ZnO Berbasis Fungsi Kerja”** Adapun tujuan utama penulisan tesis ini adalah sebagai salah satu persyaratan untuk mendapatkan gelar Magister Sains dari Universitas Lampung.

Penulis menyadari dalam penulisan tesis ini masih banyak kekurangan dalam penulisan dan penyusunan, oleh karena itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang bersifat membangun. Akhir kata, semoga tesis ini dapat bermanfaat bagi semua. Aamiin.

Bandar Lampung, Juni 2024  
Penulis,

**Diah Purwarini**

## SANWACANA

Puji syukur kepada Allah SWT, semesta alam yang menciptakan langit dan bumi serta penguasa atas semua makhluk. Alhamdulillah penulis masih diberikan kesempatan untuk mengucapkan terimakasih kepada pihak yang telah banyak membantu dalam penyelesaian penelitian dan penulisan tesis ini, maka penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Orangtua penulis, Ayah dan Ibu tercinta (Bapak Sunarto dan Ibu Warsilah) yang selalu mendo'akan kebaikan bagi penulis.
2. Bapak Dr. rer. nat. Roniyus Marjunus, S.Si., M.Si., sebagai Pembimbing I yang telah memberikan bimbingan selama penelitian, dan memberikan arahan dalam penyelesaian tesis penulis.
3. Ibu Dr. Yanti Yulianti, S.Si., M.Si., sebagai Pembimbing II sekaligus Pembimbing Akademik yang memberikan masukan serta nasehat dalam menyelesaikan tugas akhir.
4. Bapak Prof. Posman Manurung, Ph.D., sebagai Penguji I yang telah memberi kritik dan saran kepada penulis selama penulisan tesis.
5. Bapak Dr. Junaidi, S.Si., M.Sc., sebagai Penguji II yang telah memberi kritik dan saran kepada penulis selama penulisan tesis.
6. Rektor Universitas Lampung Prof. Dr. Ir. Lusmeilia Afriani, D.E.A.IPM, ASEAN Eng.
7. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung Drs. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si.
8. Direktur Program Pascasarjana Prof. Dr. Ir. Murhadi, M.Si.
9. Bapak Dr. Gurum Ahmad Pauzi, M.T., selaku Ketua Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung.

10. Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung, terima kasih atas segala pelajaran, ilmu, pengalaman, dan motivasi yang telah diberikan selama di kampus.
11. Mamasku Supatno, Mbak ku Lisa dan Keluarga Besar Kakung Wadi yang telah mendo'akan dan memberi semangat.
12. Teman seperjuangan Angkatan 2020 Program Pascasarjana Fisika: Mia Abi Nisa, Putri Vidia Citra, Ira Sudarsono Putri dan Intan Wandira yang membantu dan memberikan semangat penulis.

Semoga Allah SWT senantiasa memberi rahmat dan karunia-Nya kepada kita semua. Aamiin.

Bandar Lampung, Juni 2024  
Penulis,

Diah Purwarini

## DAFTAR ISI

	Halaman
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>i</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>ii</b>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	<b>iv</b>
<b>PERNYATAAN</b> .....	<b>vi</b>
<b>RIWAYAT HIDUP</b> .....	<b>vii</b>
<b>MOTTO</b> .....	<b>viii</b>
<b>PERSEMBAHAN</b> .....	<b>ix</b>
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	<b>x</b>
<b>SANWACANA</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xvi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xxi</b>
<b>I. PENDAHULUAN</b>	
A. Latar Belakang .....	1
B. Rumusan Masalah .....	5
C. Tujuan Penelitian .....	5
D. Batasan Masalah .....	5
<b>II. TINJAUAN PUSTAKA</b>	
A. Pengertian Natrium Dioksida (NO <sub>2</sub> ) .....	6
B. Dampak Gas NO <sub>2</sub> terhadap Kesehatan .....	7
C. Material Semikonduktor ZnO .....	8
D. Fungsi Kerja ( $\phi$ ) .....	8
E. Interaksi Gas dengan Permukaan Material	
1. Adsorpsi (Penyerapan) .....	10
2. Reaksi .....	12
3. Disosiasi .....	13
4. Desorpsi .....	13
F. Sensor Gas NO <sub>2</sub> .....	13
G. Sensor Gas NO <sub>2</sub> berbasis ZnO .....	14
H. Efek Kelembaban pada Sensor ZnO .....	17
I. Mekanisme Reaksi Pendeteksian Nitrogen Dioksida .....	18

### III. METODOLOGI PENELITIAN

A. Waktu dan Tempat Penelitian .....	21
B. Alat dan Bahan .....	21
C. Prosedur Penelitian	
1. Menyusun Persamaan Diferensial Biasa (PDB) Orde Satu untuk Hunian Molekul/Atom .....	21
2. <i>Fitting</i> Persamaan Garis Hasil Penelitian Widanarto (2011).....	22
3. Optimasi Parameter .....	22
4. Simulasi Akhir .....	23
D. Diagram Alir Penelitian .....	25

### IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

A. Penyusunan Persamaan Diferensial .....	27
B. Persamaan Garis Penelitian Widanarto (2011) .....	28
C. Optimasi Parameter	
1. Energi Adsorpsi O <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{f1}$ ) .....	33
2. Energi Adsorpsi NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{f2}$ ) .....	35
3. Energi Reaksi Maju O <sub>2</sub> dan NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{f3}$ ) .....	37
4. Energi Adsorpsi H <sub>2</sub> O pada Bahan ZnO ( $E_{f4}$ ) .....	39
5. Energi Reaksi Maju NO dan HNO <sub>3</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{f5}$ ) .....	41
6. Energi Desorpsi O <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{r1}$ ) .....	44
7. Energi Desorpsi NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{r2}$ ) .....	46
8. Energi Reaksi Balik O <sub>2</sub> dan NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{r3}$ ) .....	48
9. Energi Desorpsi H <sub>2</sub> O pada Bahan ZnO ( $E_{r4}$ ) .....	50
10. Energi Reaksi Balik NO dan HNO <sub>3</sub> pada Bahan ZnO ( $E_{r5}$ ) .....	52
11. Koefisien Lengket O pada Bahan ZnO ( $S_{O-O}$ ) .....	54
12. Koefisien Lengket NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $S_{O-NO_2}$ ) .....	56
13. Koefisien Arrhenius Reaksi Maju O <sub>2</sub> dan NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $v_{f3}$ ) .....	58
14. Koefisien Arrhenius H <sub>2</sub> O pada Bahan ZnO ( $v_{f4}$ ) .....	60
15. Koefisien Arrhenius Reaksi Maju NO dan HNO <sub>3</sub> pada Bahan ZnO ( $v_{f5}$ ) .....	62
16. Koefisien Arrhenius Desorpsi O <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $v_{r1}$ ) .....	64
17. Koefisien Arrhenius Desorpsi NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $v_{r2}$ ) .....	66
18. Koefisien Arrhenius Reaksi Balik O <sub>2</sub> dan NO <sub>2</sub> pada Bahan ZnO ( $v_{r3}$ ) .....	68
19. Koefisien Arrhenius Desorpsi H <sub>2</sub> O pada Bahan ZnO ( $v_{r4}$ ) .....	70
20. Koefisien Arrhenius Reaksi Balik NO dan HNO <sub>3</sub> pada Bahan ZnO ( $v_{r5}$ ) .....	72
D. Simulasi Akhir .....	74
E. Cakupan Atom dan Molekul Gas di Permukaan ZnO	
1. Cakupan O .....	76
2. Cakupan NO <sub>2</sub> .....	77
3. Cakupan O <sub>2</sub> .....	78
4. Cakupan NO .....	79
5. Cakupan H <sub>2</sub> O .....	80

6. Cakupan HONO .....	81
7. Cakupan HNO <sub>3</sub> .....	82

**V. KESIMPULAN DAN SARAN**

A. Kesimpulan.....	83
B. Saran.....	84

**DAFTAR PUSTAKA**

**LAMPIRAN**



## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Diagram energi penyerapan dan perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ) pada permukaan material ketika (a) terpapar oleh gas pengoksidasi, (b) tidak terpapar gas, dan (c) terpapar oleh gas pereduksi .....	9
2.2 Penyerapan (a) Fisika, (b) Kimia gas pada permukaan .....	10
2.3 Selektivitas sensor untuk 8 jenis gas berbeda pada suhu 165 °C dalam keadaan kering .....	16
2.4. Respon sensor terhadap paparan NO <sub>2</sub> 3 ppm pada suhu 165°C di bawah berbagai kelembaban relatif .....	17
3.1 Optimasi Parameter .....	25
3.2 Diagram alir simulasi akhir penelitian .....	26
4.1 <i>Fitting</i> kurva terhadap penelitian Widanarto (2011).....	29
4.2 Grafik optimasi parameter $E_{f1}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1 .....	33
4.3 Grafik optimasi parameter $E_{f1}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1 .....	34
4.4 Grafik optimasi parameter $E_{f1}$ pada kisaran energi 0-2 eV dengan Partisi 0,02 .....	34
4.5 Grafik optimasi parameter $E_{f2}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1 .....	35
4.6 Grafik optimasi parameter $E_{f2}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1 .....	36
4.7 Grafik optimasi parameter $E_{f2}$ pada kisaran energi 1-2 eV dengan Partisi 0,02 .....	36
4.8 Grafik optimasi parameter $E_{f3}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1 .....	37

4.9	Grafik optimasi parameter $E_{f3}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1. ....	38
4.10	Grafik optimasi parameter $E_{f3}$ pada kisaran energi 0-3 eV dengan Partisi 0,03. ....	38
4.11	Grafik optimasi parameter $E_{f4}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1. ....	39
4.12	Grafik optimasi parameter $E_{f4}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1. ....	40
4.13	Grafik optimasi parameter $E_{f4}$ pada kisaran energi 0-1 eV dengan Partisi 0,01. ....	41
4.14	Grafik optimasi parameter $E_{f5}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1. ....	42
4.15	Grafik optimasi parameter $E_{f5}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1. ....	42
4.16.	Grafik optimasi parameter $E_{f5}$ pada kisaran energi 0-1 eV dengan Partisi 0,01. ....	43
4.17	Grafik optimasi parameter $E_{r1}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1. ....	44
4.18	Grafik optimasi parameter $E_{r1}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1. ....	44
4.19	Grafik optimasi parameter $E_{r1}$ pada kisaran energi 0-1 eV dengan Partisi 0,01. ....	45
4.20	Grafik optimasi parameter $E_{r2}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1. ....	46
4.21	Grafik optimasi parameter $E_{r2}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1. ....	46
4.22	Grafik optimasi parameter $E_{r2}$ pada kisaran energi 0-1 eV dengan Partisi 0,01. ....	47
4.23	Grafik optimasi parameter $E_{r3}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1. ....	48
4.24	Grafik optimasi parameter $E_{r3}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1. ....	48

4.25 Grafik optimasi parameter $E_{r3}$ pada kisaran energi 9 eV hingga 10 eV dengan Partisi 0,01.....	49
4.26 Grafik optimasi parameter $E_{r4}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1 .....	50
4.27 Grafik optimasi parameter $E_{r4}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1.....	50
4.28 Grafik optimasi parameter $E_{r4}$ pada kisaran energi 0-1 eV dengan Partisi 0,01.....	51
4.29 Grafik optimasi parameter $E_{r5}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 1.....	52
4.30 Grafik optimasi parameter $E_{r5}$ pada kisaran energi 0-10 eV dengan Partisi 0,1.....	53
4.31 Grafik optimasi parameter $E_{r5}$ pada kisaran energi 0-1 eV dengan Partisi 0,01.....	53
4.32 Grafik optimasi parameter ( $S_{O-O}$ ) pada kisaran 0 hingga 10 dengan Partisi 1.....	54
4.33 Grafik optimasi parameter ( $S_{O-O}$ ) pada kisaran energi 0 hingga 10 dengan Partisi 0,1.....	55
4.34 Grafik optimasi parameter ( $S_{O-O}$ ) pada kisaran energi 0 hingga 2 dengan Partisi 0,02.....	55
4.35 Grafik optimasi parameter ( $S_{O-NO_2}$ ) pada kisaran 0 hingga 10 dengan Partisi 1.....	56
4.36 Grafik optimasi parameter ( $S_{O-NO_2}$ ) pada kisaran energi 0 hingga 10 dengan Partisi 0,1.....	57
4.37 Grafik optimasi parameter ( $S_{O-NO_2}$ ) pada kisaran energi 0 hingga 2 dengan Partisi 0,02.....	57
4.38 Grafik optimasi parameter ( $v_{f3}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} s^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	58
4.39 Grafik optimasi parameter ( $v_{f3}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} s$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	59
4.40 Grafik optimasi parameter ( $v_{f3}$ ) pada kisaran energi $5 \times 10^{12} s^{-1}$ hingga $6 \times 10^{12} s^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	59

4.41	Grafik optimasi parameter ( $v_{f3}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	60
4.42	Grafik optimasi parameter ( $v_{f4}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	61
4.43.	Grafik optimasi parameter ( $v_{f4}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	61
4.44	Grafik optimasi parameter ( $v_{f5}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	62
4.45	Grafik optimasi parameter ( $v_{f5}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	63
4.46	Grafik optimasi parameter ( $v_{f5}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	63
4.47	Grafik optimasi parameter ( $v_{r1}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	64
4.48	Grafik optimasi parameter ( $v_{r1}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	65
4.49	Grafik optimasi parameter ( $v_{r1}$ ) pada kisaran energi $6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ hingga $7 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	65
4.50	Grafik optimasi parameter ( $v_{r2}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	66
4.51	Grafik optimasi parameter ( $v_{r2}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	67
4.52	Grafik optimasi parameter ( $v_{r2}$ ) pada kisaran energi $2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ hingga $3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	67
4.53	Grafik optimasi parameter ( $v_{r3}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	68
4.54	Grafik optimasi parameter ( $v_{r3}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	69
4.55	Grafik optimasi parameter ( $v_{r3}$ ) pada kisaran energi $5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ hingga $6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	69
4.56	Grafik optimasi parameter ( $v_{r4}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	70

4.57 Grafik optimasi parameter ( $v_{r4}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	71
4.58 Grafik optimasi parameter ( $v_{r4}$ ) pada kisaran energi $9 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	71
4.59 Grafik optimasi parameter ( $v_{r4}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ Partisi $1 \times 10^{12}$ .....	72
4.60 Grafik optimasi parameter ( $v_{r5}$ ) pada kisaran energi 0 hingga $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	73
4.61 Grafik optimasi parameter ( $v_{r5}$ ) pada kisaran energi $1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ hingga $2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ dengan partisi $1 \times 10^{11}$ .....	73
4.62 Grafik perbandingan CPD (V) antara eksperimen Widanarto, <i>et al</i> (2011) dan hasil simulasi pada bahan ZnO pada suhu $135^\circ\text{C}$ .....	75
4.63 Pergerakan cakupan O dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	77
4.64 Pergerakan cakupan $\text{NO}_2$ dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	78
4.65 Pergerakan cakupan $\text{O}_2$ dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	79
4.66 Pergerakan cakupan NO dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	80
4.67 Pergerakan cakupan $\text{H}_2\text{O}$ dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	80
4.68 Pergerakan cakupan HONO dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	81
4.69 Pergerakan cakupan $\text{HNO}_3$ dalam pendeteksian gas $\text{NO}_2$ .....	82

## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1 Koefisien Arrhenius dan energi aktivasi dalam reaksi pendeteksian gas NO <sub>2</sub> .....	19
3.1 Nilai tebakan awal untuk optimasi parameter.....	23
4.1 Persamaan garis hasil <i>fitting</i> penelitian Widanarto, <i>et al</i> (2011).....	30
4.2 Lanjutan Persamaan garis hasil <i>fitting</i> penelitian Widanarto, <i>et al</i> (2011)..	31
4.3 Lanjutan Persamaan garis hasil <i>fitting</i> penelitian Widanarto, <i>et al</i> (2011)..	32
4.4 Rekapitulasi nilai optimasi parameter .....	74

## I. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Udara adalah campuran beberapa macam gas yang perbandingannya tidak tetap, tergantung pada keadaan suhu udara, tekanan udara dan lingkungan sekitarnya. Udara di bumi tidak pernah ditemukan tanpa polutan sama sekali (Mukono, 2008). Udara sangat dibutuhkan oleh manusia dan hewan. Udara digunakan untuk pernapasan, menghirup gas oksigen ke paru-paru yang kemudian diserap oleh darah, lalu diangkut ke seluruh tubuh sebagai pemasok oksigen bagi sel-sel tubuh (Sunu, 2001). Menurut Wardhana (2004), dalam udara terdapat unsur oksigen ( $O_2$ ) untuk bernafas, karbon dioksida ( $CO_2$ ) untuk proses fotosintesis oleh klorofil pada daun dan ozon ( $O_3$ ) untuk menahan sinar ultra violet. Udara bersih dan kering tersusun oleh nitrogen ( $N_2$ ) 78,09%, oksigen ( $O_2$ ) 21,94%, argon (Ar) 0,93%, karbon dioksida 0,032% dan gas-gas lain dalam udara antara lain gas-gas mulia, nitrogen dioksida ( $NO_2$ ), hidrogen (H), metana, belerang dioksida, ammonia.

Gas nitrogen dioksida ( $NO_2$ ) merupakan polutan udara bersama unsur nitrogen monoksida (NO) yang biasanya dihasilkan dari kegiatan manusia seperti pembakaran bahan bakar mesin kendaraan, pembakaran sampah, pembakaran batubara dan industri. (Suyono, 2014). Selain itu, nitrogen dioksida ( $NO_2$ ) adalah salah satu pencemar yang timbul akibat proses pembakaran. Kapanpun NO muncul,  $NO_2$  juga selalu ditemukan, karena NO yang diemisikan pada proses pembakaran, akan segera bereaksi dengan oksigen di udara untuk

membentuk Nitrogen Dioksida ( $\text{NO}_2$ ) sebagai senyawa oksidasi nitrogen yang lebih stabil. Gas  $\text{NO}_2$  dapat merusak tubuh manusia dan lingkungannya. Jika  $\text{NO}_2$  bertemu dengan uap air di udara atau dalam tubuh manusia akan terbentuk segera  $\text{HNO}_3$  yang amat merusak tubuh (Sandra, 2008). Konsentrasi  $\text{NO}_2$  yang tinggi dapat bereaksi dengan Hb dan mempunyai sifat yang sama dengan CO, yaitu menghalangi fungsi normal Hb dalam darah, dapat menyebabkan iritasi mata dan gangguan pernafasan. Pengaruh gas  $\text{NO}_2$  dalam konsentrasi tinggi terhadap lingkungan akan menyebabkan udara di luar terlihat kecoklatan (*brown air cities*), hal ini akan memicu terbentuknya senyawa *photochemical smog* ketika  $\text{NO}_2$  bereaksi dengan panas matahari dan hidrokarbon di udara. Senyawa itu antara lain ozon, aldehid, dan PAN (*Peroкси asil nitrat*). Senyawa ini dapat merusak saluran pernafasan, iritasi paru-paru dan mata, juga berkontribusi terhadap kerusakan jantung, paru-paru, hati dan ginjal. (Handayani dkk., 2003).

Selain pada manusia, gas  $\text{NO}_2$  juga memberikan dampak yang buruk pada hewan dan tumbuhan, karena dapat menyebabkan kematian hewan yang lebih cepat, timbulnya bintik-bintik pada permukaan daun saat berada pada konsentrasi 1 ppm. Hal ini dapat menyebabkan kerusakan pada jaringan daun (nekrosis) ketika berada pada konsentrasi yang lebih tinggi (3,5 ppm atau lebih) karena daun tidak dapat berfungsi sempurna sebagai tempat terbentuknya karbohidrat melalui proses fotosintesis disebabkan oleh kerusakan tenunan daun yang mengakibatkan menurunnya kemampuan fotosintesis hingga 60-70% jika konsentrasinya sudah mencapai 10 ppm (Rofienda, 2004). Gas  $\text{NO}_2$  juga dapat menjadi penyumbang sifat hujan asam yang dapat mengakibatkan pelapukan bebatuan dan pengoratan logam. Pada lingkungan, gas  $\text{NO}_2$  juga dapat mengakibatkan timbulnya asap tebal sehingga menyebabkan terhentinya alat-alat transportasi (Firdausia, 2017).



Dampak negatif dari gas NO<sub>2</sub> sangat banyak, maka para ilmuwan melakukan penelitian untuk mendeteksi adanya gas NO<sub>2</sub> agar dapat dilakukan tindakan pencegahan terhadap dampak-dampak negatifnya. Berbagai eksperimen dilakukan untuk mengamati perilaku bahan semikonduktor sebagai sensor dari gas NO<sub>2</sub>, salah satunya material seng oksida (ZnO). Penelitian mengenai bahan sensor ini menghasilkan fakta bahwa ZnO merupakan semikonduktor tipe-n yang memiliki cacat bawaan, seperti kekosongan oksigen, sehingga memiliki sensitivitas yang tinggi terhadap NO<sub>2</sub> (Kumar *et al.*, 2015). Selain itu, ZnO memiliki stabilitas kimia dan termal yang sangat tinggi, dengan energi celah pita yang besar yaitu 3,37 eV (Vaseem *et al.*, 2010). ZnO memperlihatkan sifat-sifat optik akustik, dan kelistrikan yang menarik dan memiliki sejumlah potensi aplikasi dalam bidang elektronik, optoelektronik, dan sensor. ZnO juga sangat berpotensi sebagai elektroda transparan dalam teknologi fotovoltaik, piranti elektroluminisens, dan material piranti untuk pemancar sinar ultraviolet (Abdullah, 2009). Sementara itu, penelitian lain diketahui juga bahwa kecacatan kristal akan mempengaruhi kinerja dari pendeteksian gas, dimana semakin besar tingkat kekosongan oksigennya, maka akan memiliki respon yang tinggi dari ZnO (Han *et al.*, 2010).

Jenis sensor yang sering digunakan untuk mendeteksi gas adalah sensor kimia. Sensor kimia merupakan alat yang mampu menangkap fenomena berupa zat kimia (baik gas maupun cairan). Secara umum model sensor kimia meliputi bagian penerima yang memiliki sensitivitas terhadap zat yang akan dideteksi yang dikenal dengan hidungnya sensor (*sensitive layer/ nose parts/chemical interface*). Karakteristik sensor ditentukan dari sejauh mana sensor tersebut memiliki kemampuan yang baik dalam mengenali zat yang ingin dideteksinya (Wolfbeis, 2000). Menurut Hulanicki, (1991) semakin cepat waktu respon sensor maka semakin baik sensor tersebut.

Eksperimen pendeteksian gas dengan hasil yang diperoleh dengan meningkatnya suhu dapat meningkatkan sensitivitas sensor, kemudian waktu respon sensor terhadap  $\text{NO}_2$  akan meningkat dan tinggi sinyalnya menurun seiring dengan peningkatan konsentrasi. Selain itu, meskipun suhu operasi telah ditingkatkan dengan tujuan untuk meningkatkan sensitivitasnya, namun faktanya tingkat sensitivitas sensor masih rendah terhadap paparan  $\text{NO}_2$ . Ini menunjukkan bahwa sensor ZnO tidak cocok untuk pendeteksian  $\text{NO}_2$  pada konsentrasi rendah. Sensitivitas sensor juga berkurang seiring dengan peningkatan kelembaban relatif (Widanarto *et al.*, 2011).

Meskipun berbagai eksperimen telah dilakukan dalam mengembangkan sensor gas  $\text{NO}_2$ , namun belum banyak simulasi yang dilakukan terhadap eksperimen tersebut. Simulasi komputasi merupakan suatu cara untuk memahami peristiwa fisik dan kimia yang terjadi antara gas  $\text{NO}_2$  dengan  $\text{O}_2$  menggunakan ZnO sebagai material sensor. Simulasi yang pernah dilakukan dalam pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  adalah dengan menggunakan sensor optik berbasis kristal fotonik yang termasuk dalam sistem instrumentasi pengukuran gas  $\text{NO}_2$  yang ditujukan untuk mengetahui karakteristik komponen yang digunakan (Rustami, 2012).

Simulasi komputasi yang pernah dilakukan oleh Marjunus, (2021) adalah pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  dengan menggunakan sensor gas ZnO berbasis fungsi kerja. Simulasi ini dilakukan dengan menggunakan persamaan reaksi kimia dari  $\text{NO}_2$  sebanyak tiga reaksi, serta fitting pada saat pencocokan data hasil eksperimen dengan simulasi dilakukan secara langsung menggunakan MATLAB sehingga hasil yang diperoleh dari simulasi ini kurang sesuai dengan eksperimen. Namun tidak menutup kemungkinan jika, dalam simulasi ini ditambah dengan persamaan reaksi-reaksi kimia yang mungkin terjadi dalam pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  serta dalam melakukan fitting dilakukan dengan cara dipotong per bagian hasil simulasi yang diperoleh akan sesuai dengan hasil eksperimen, hal ini yang menjadi latar belakang dilakukan penelitian ini.

## 1.2 Rumusan Masalah

Adapun rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana bentuk simulasi komputasi dari pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  pada sensor ZnO yang berbasis perubahan fungsi kerja?
2. Bagaimana perbedaan hasil yang diperoleh dari simulasi komputasi dengan eksperimen?
3. Reaksi-reaksi apa saja yang terjadi dalam pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  selain reaksi yang digunakan pada penelitian sebelumnya?

## 1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Mengetahui bentuk simulasi komputasi dari pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  pada sensor ZnO yang berbasis perubahan fungsi kerja.
2. Mengetahui perbedaan hasil yang diperoleh dari simulasi komputasi dengan eksperimen.
3. Mengetahui reaksi-reaksi yang terjadi dalam pendeteksian gas  $\text{NO}_2$  selain reaksi yang digunakan pada penelitian sebelumnya?

## 1.4 Batasan Masalah

Adapun batasan masalah yang terdapat pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Reaksi yang terlibat dalam simulasi ini berjumlah 5 reaksi.
2. Simulasi ini menggunakan gas  $\text{NO}_2$  yang berbasis fungsi kerja dari ZnO.

## II. TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1 Pengertian Natrium Dioksida (NO<sub>2</sub>)

Nitrogen dioksida adalah gas toksik, kelarutannya dalam air rendah, tetapi mudah larut dalam larutan alkali, karbon disulfida dan kloroform. Gas ini berwarna coklat kemerahan dan pada suhu di bawah 21,2°C akan berubah menjadi kuning. Baunya khas dan mengganggu bahkan dapat mengiritasi saluran napas pada konsentrasi 1 – 3 ppm. Pada saat di atmosfer, gas ini akan mengalami siklus fotolitik NO<sub>2</sub> bersama dengan gas NO dan oksigen dengan bantuan sinar matahari. Siklus fotolitik ini dapat terganggu jika di dalam udara terdapat hidrokarbon (HC), karena hidrokarbon akan bereaksi dengan O maupun O<sub>2</sub>. Reaksi HC dengan O akan menghasilkan radikal bebas HC yang sangat reaktif. Radikal bebas HC akan menyerang NO dan NO<sub>2</sub> sehingga jumlah NO akan berkurang (Zhou *et al.*, 2019). Radikal bebas HC dapat juga bereaksi dengan HC lainnya dan menghasilkan senyawa-senyawa organik. Di samping itu radikal bebas HC yang bereaksi dengan O<sub>2</sub> dan NO<sub>2</sub> akan menghasilkan *Peroxyl Acetyl Nitrates* atau yang disingkat PAN (Nagirnyak, 2017). Sumber nitrogen dioksida mayoritas berasal dari pembakaran bahan bakar fosil seperti batu bara, minyak, dan gas. Di daerah perkotaan, nitrogen dioksida 80% diproduksi dari kendaraan bermotor. Sumber lainnya adalah penyulingan bensin dan logam, pembangkit listrik yang mengandung bahan bakar batu bara, proses industri, dan pemasakan makanan pada rumah tangga (Gusti, 2019).

## 2.2 Dampak Gas NO<sub>2</sub> terhadap Kesehatan

Pengaruh NO<sub>2</sub> ditentukan oleh konsentrasi saat paparan, proses akut atau kronik serta lama paparan. Gejala yang dapat terjadi akibat paparan NO<sub>2</sub> meliputi asfiksi, edema paru, batuk, sesak, sianosis dan bronkiolitis obliterans. Selain itu, paparan NO<sub>2</sub> juga mempunyai efek toksik langsung terhadap makrofag alveolar sehingga mengurangi daya fagosit dan aktivitas bakterisidal. Hal ini meningkatkan kemungkinan terjadinya infeksi bakteri pada saluran pernapasan. Paparan NO<sub>2</sub> juga dapat menimbulkan gangguan sekresi mukus, kerusakan silia dan gangguan imunitas humoral dan paparan nitrogen dioksida sangat berpengaruh pada saluran pernapasan. Bukti ilmiah menunjukkan bahwa paparan NO<sub>2</sub> selama 30 menit hingga 24 jam akan menimbulkan efek yang dapat merugikan bagi pernapasan yaitu peradangan saluran napas pada orang sehat dan peningkatan gejala pada penderita asma (Zhao *et al*, 2020).

Konsentrasi NO<sub>2</sub> lebih tinggi dari 100 ppm bersifat letal terhadap kebanyakan hewan, dan 90% dari kematian tersebut disebabkan oleh gejala edema pulmonari. Konsentrasi NO<sub>2</sub> sebesar 800 ppm atau lebih mengakibatkan 100% kematian pada hewan-hewan yang diuji dalam waktu 29 menit atau kurang. Pemberian sebanyak 5 ppm NO<sub>2</sub> selama 10 menit terhadap manusia mengakibatkan sedikit kesukaran dalam bernapas. Inhalasi NO<sub>2</sub> dapat menyebabkan gangguan paru dan saluran pernapasan, kemudian dapat masuk ke dalam peredaran darah dan menimbulkan akibat di organ tubuh lain. Kelarutan NO<sub>2</sub> dalam air rendah sehingga dapat mudah melewati trakea, bronkus, dan sampai ke alveoli. Di dalam saluran pernapasan NO<sub>2</sub> akan terhidrolisis membentuk asam nitrit (HNO<sub>2</sub>) dan asam nitrat (HNO<sub>3</sub>) yang bersifat korosif terhadap mukosa permukaan saluran napas (Zhu, 2019).

### 2.3 Material Semikonduktor ZnO

Material semikonduktor menjadi komponen yang sangat penting dalam termoelektrik sebagai pengubah energi panas menjadi energi listrik. Material semikonduktor adalah material dengan konduktivitas listrik yang berada diantara isolator dan konduktor. Terdapat dua jenis material semikonduktor yaitu tipe-p dan tipe-n. Material semikonduktor tipe-p jika memiliki pembawa muatan yang bernilai positif sedangkan material semikonduktor tipe-n jika memiliki pembawa muatan yang bernilai negatif (Zeng *et al.*, 2007). Seng Oksida (ZnO) merupakan senyawa anorganik dengan rumus ZnO, berbentuk bubuk putih jika dingin, dan berwarna kuning jika panas, pahit dan tidak berbau. ZnO sulit atau hampir tidak larut dalam air atau alkohol, tetapi larut dalam garam-garam ammonium, asam atau basa dan tidak mengandung racun (Adi dkk., 2007). Pada struktur kristal, ZnO mempunyai sifat *piezoelectric* dan *thermocromic*. ZnO merupakan salah satu bahan kandidat yang telah menarik perhatian karena memiliki lebar celah pita energi sebesar 3.37 eV dan energi ikat eksitasi 60 meV pada suhu kamar (Khan *et al.*, 2011). Oleh karena itu, ZnO merupakan bahan yang penting untuk laser UV dan *devais optoelektronik*, dan ZnO juga memiliki sifat listrik dan optik sehingga banyak digunakan sebagai foto konduktor, sensor gas (Suwanboon *et al.*, 2008).

### 2.4 Fungsi Kerja ( $\phi$ )

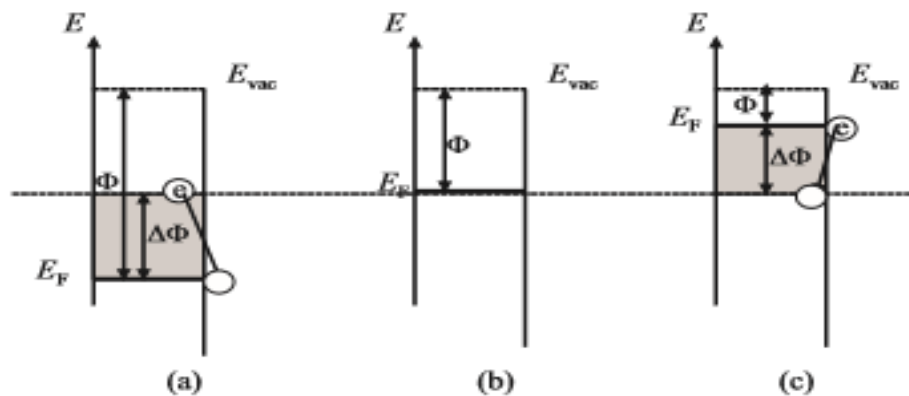
Dalam fisika zat padat, fungsi kerja ( $\phi$ , dalam eV) merupakan energi minimum yang diperlukan untuk memindahkan elektron dari tingkat energi Fermi dalam sebuah logam atau semikonduktor ke sebuah titik tak berhingga di luar permukaan. Fungsi kerja juga ( $\phi$ ) didefinisikan sebagai selisih antara energi dari elektron pada tingkat energi Fermi ( $E_F$ , dalam eV) dan tingkat energi vakum ( $E_{vac}$  dalam eV). Persamaan dari fungsi kerja ditunjukkan dalam persamaan (2.1) sebagai berikut (Senft, 2011).

$$\phi = E_F - E_{\text{vac}} \quad (2.1)$$

Pada sebuah permukaan material, jika diberikan sebuah gas fungsi kerja dari sebuah material akan mengalami perubahan ( $\Delta\phi$ , dalam eV) seperti yang ditunjukkan dalam persamaan (2.2) sebagai berikut (Senft, 2011).

$$\Delta\phi = E_F^{\text{awal}} - E_F^{\text{akhir}} \quad (2.2)$$

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



**Gambar 2.1** Diagram energi penyerapan dan perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ) pada permukaan material ketika (a) terpapar oleh gas pengoksidasi, (b) tidak terpapar gas, dan (c) terpapar oleh gas pereduksi (Senft *et al*, 2011).

## 1.5 Interaksi Gas dengan Permukaan Material

### 1.5.1 Adsorpsi (Penyerapan)

Fungsi kerja pada material berubah karena adsorpsi gas pada permukaan material. Ada dua jenis penyerapan, yaitu penyerapan fisika dan penyerapan kimia.



**Gambar 2.2** Penyerapan (a) Fisika, (b) Kimia gas pada permukaan

(Senft *at al*, 2011).

Penyerapan fisika biasanya terjadi ketika gas yang datang pada permukaan tidak bereaksi dengan permukaan tersebut sehingga gas tetap sama seperti yang datang. Penyerapan fisika terjadi pada suhu rendah. Energi ikat penyerapan fisika ( $\Delta E_p$ , dengan satuan eV) akan mengurung molekul yang terserap pada bahan. Penyerapan ini terbentuk oleh gaya elektrostatis Van Der Waals dan bercirikan dengan nilai  $\Delta E_p$  untuk penyerapan fisika diantara 0,0021 eV sampai 0,301 eV (Widanarto, 2007).

Selain itu, penyerapan kimia terjadi pada jarak dekat dengan permukaan bahan dan suhunya yang tinggi. Energi ikat penyerapan kimia ( $\Delta E_c$ , dengan satuan eV) umumnya lebih besar dibanding  $\Delta E_p$ . Secara umum, molekul terserap dapat berubah dalam proses penyerapan kimia, contohnya jika terdapat molekul



$X_2$  yang mengenai bahan, maka molekul itu dapat terpisah menjadi dua molekul X. Perubahan molekul ini memerlukan energi yang disebut dengan energi disosiasi ( $E_{\text{diss}}$ , dengan satuan eV). Pada penyerapan kimia, nilai energi disosiasi ini lebih besar dari 0,311 eV (Gottfried, 2003). Untuk menghitung laju perubahan Cakupan Permukaan yang ditimbulkan akibat paparan dari gas di mana permukaan yang awalnya bersih dan kemudian terkena tekanan gas maka laju penyerapannya sangat lambat, laju penyerapan diberikan oleh Persamaan (2.3) sebagai berikut (Nik, 2014):

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

dimana  $N_{\text{ads}}$  adalah jumlah atom/molekul yang terserap pada permukaan bahan dan dapat dituliskan dalam persamaan (2.4) sebagai berikut:

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

dengan  $\sigma$  merupakan kerapatan atom pada permukaan dengan satuan atom/m<sup>2</sup> dan  $\theta$  adalah cakupan gas pada permukaan sampel. Disamping itu, laju penyerapan bergantung pada fluks molekul yang datang ke permukaan bahan. Secara matematis, fluks molekul dapat ditulis seperti pada Persamaan (2.5) sebagai berikut:

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

dengan P (dalam Pa) adalah tekanan parsial dari gas,  $m$  (dalam kg) adalah massa dari molekul gas,  $k$  adalah konstanta Boltzmann yang bernilai  $1,38 \times 10^{-23} JK^{-1}$ ,  $T$  (dalam K) adalah suhu. Selain fluks molekul, permukaan bahan juga memiliki nilai koefisien lengket ( $S$ ) terhadap suatu gas yang ditunjukkan menggunakan Persamaan (2.6) sebagai berikut:

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

$S_0$  adalah koefisien lengket awal atau koefisien lengket ketika cakupan masih kosong, dan  $z$  bernilai 1 untuk gas yang tak terdisosiasi dan 2 untuk gas yang terdisosiasi. Jika persamaan (2.3) sampai (2.6) dikombinasikan, maka dihasilkan laju perubahan cakupan/hunian pada permukaan selama proses penyerapan seperti yang ditunjukkan pada Persamaan (2.7) sebagai berikut:

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{S_0 (1-\theta)^z P}{\sigma \sqrt{2\pi m k T}} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right). \quad (2.7)$$

### 1.5.2 Reaksi

Ketika suatu bahan menyerap dua molekul atau lebih, maka molekul tersebut akan bereaksi di permukaan bahan tersebut. Misalnya, terdapat molekul A dan molekul B bertemu dipermukaan, maka molekul itu akan membentuk molekul AB. Berdasarkan mekanisme Langmuir-Hinshelwood menjelaskan nilai perubahan hunian AB dapat dihitung dengan Persamaan (2.8) (Somorjai, 2010) sebagai berikut:

$$\frac{d\theta_{AB}}{dt} = v_r \exp\left(-\frac{E_r}{kT}\right) \theta_A \theta_B, \quad (2.8)$$

dengan  $v_r$  adalah koefisien Arrhenius yang merepresentasikan jumlah reaksi antara A dan B setiap detiknya,  $E_r$  adalah energi aktivasi antara reaksi atom atau molekul gas A dan gas B (eV),  $\theta_A$  dan  $\theta_B$  adalah nilai hunian/cakupan dari gas A dan gas B.

### 1.5.3 Disosiasi

Disosiasi dalam kimia merupakan proses yang terjadi ketika suatu molekul terpisah menjadi bagian yang lebih kecil. Misalnya gas AB mengalami disosiasi, maka gas AB akan terpisah menjadi A dan B. Perubahan laju hunian dari proses disosiasi dapat dihitung menggunakan Persamaan (2.9) (Senft, 2009) sebagai berikut:

$$\frac{d\theta_A}{dt} = v_{\text{diss}} \exp\left(-\frac{E_{\text{diss}}}{kT}\right) \theta_{AB}, \quad (2.9)$$

dengan  $v_{\text{diss}}$  adalah koefisien Arrhenius dari proses disosiasi AB setiap detik,  $E_{\text{diss}}$  adalah energi minimum yang dibutuhkan agar disosiasi gas AB dapat terjadi (dalam eV), dan  $\theta_{AB}$  adalah cakupan dari gas AB.

### 1.5.4 Desorpsi

Desorpsi merupakan pelepasan suatu zat dari permukaan bahan. Pelepasan ini tidak dapat terjadi begitu saja, namun harus disertai dengan pengambilan sebuah energi yang disebut energi desorpsi ( $E_d$ , dengan satuan eV). Ketika atom atau molekul dilepaskan dari permukaan bahan, laju cakupan dapat dihitung menggunakan Persamaan (2.10) (Senft, 2009), sebagai berikut:

$$\frac{d\theta}{dt} = v_d \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right) \theta, \quad (2.10)$$

dimana  $v_d$  adalah koefisien Arrhenius dari proses desorpsi setiap detik.

## 1.6 Sensor Gas NO<sub>2</sub>

Nitrogen oksida (NO<sub>x</sub>) adalah senyawa gas di atmosfer yang sebagian besar terdiri atas nitrit oksida (NO) dan nitrogen dioksida (NO<sub>2</sub>) serta berbagai jenis oksida dalam jumlah yang lebih sedikit. Kedua macam gas tersebut mempunyai sifat yang sangat berbeda dan keduanya sangat berbahaya bagi kesehatan.

Pengaruh negatif  $\text{NO}_2$  terhadap kesehatan manusia adalah menurunnya pada fungsi paru-paru dan dapat meningkatnya risiko kanker (Karimi *et al.*, 2019).

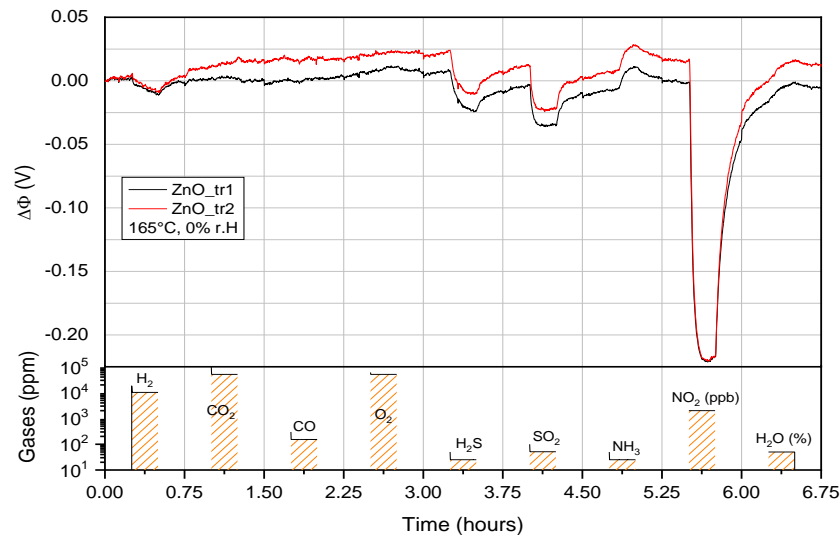
Nitrogen dioksida ( $\text{NO}_2$ ) juga merupakan salah satu prekursor pembentuk polutan sekunder berupa ozon. Secara alami,  $\text{NO}_2$  mengalami siklus fotolitik dengan bantuan matahari membentuk  $\text{O}_3$  dan sebaliknya. Siklus fotolitik tersebut dapat mengalami gangguan akibat adanya senyawa hidrokarbon yang bereaksi dengan  $\text{NO}$  sehingga kadar  $\text{O}_3$  meningkat pada lapisan troposfer. Perkembangan penelitian terkait sensor gas  $\text{NO}_2$  berfokus pada penggunaan semikonduktor logam oksida karena memiliki sensitifitas dan selektivitas yang baik. Beberapa logam oksida yang biasanya dapat digunakan sebagai sensor gas  $\text{NO}_2$  antara lain  $\text{ZnO}$  (Sankar, 2019; Wang *et al.*, 2020),  $\text{SnO}_2$  (Liu *et al.*, 2020; Qi *et al.*, 2019) dan  $\text{WO}_3$  (Paolucci *et al.*, 2019; Zhou *et al.*, 2019). Diantara ketiga material tersebut, logam oksida yang paling banyak diteliti sebagai sensor gas pendeteksi  $\text{NO}_2$ .

### **1.7 Sensor Gas $\text{NO}_2$ Berbasis $\text{ZnO}$**

Berbagai riset telah dilakukan untuk mempelajari karakteristik sensor gas berbasis  $\text{ZnO}$  yang digunakan untuk mendeteksi gas  $\text{NO}_2$ . Menurut Spencer (2010),  $\text{NO}$  maupun  $\text{NO}_2$  akan terserap pada permukaan  $\text{Zn}$  di beberapa tempat dan konfigurasi, namun dengan pengikat yang lemah dengan sedikit perubahan pada struktur permukaan yang menyerap atau setelah penyerapan. Walaupun ikatan gas tersebut lemah, tetapi tetap terdapat transfer muatan dari permukaan ke kedua adsorbat. Selain itu, penyerapan  $\text{NO}_2$  dan  $\text{NO}$  akan menimbulkan keadaan pengotor dalam celah pita  $\text{ZnO}$  murni. Atom  $\text{O}$  dan  $\text{N}$  juga diketahui stabil diberbagai tempat di permukaan, namun mereka terserap lebih kuat sehingga menyebabkan rekonstruksi permukaan yang lebih besar, dengan struktur yang paling stabil akan membentuk ikatan kovalen ke permukaan yang

menghasilkan penyerapan  $O_2^-$  dan  $NO^-$  ke dalam permukaan. O dan N yang terserap kimiawi akan stabil pada permukaan hingga 700 K dan tidak akan mengalami desorpsi atau berdifusi melintasi permukaan dalam kerangka waktu simulasi. Stabilitas  $NO_2$  pada ZnO dapat ditingkatkan dengan adanya kekosongan oksigen karena pengikatan  $NO_2$  yang lebih kuat ke permukaan cacat, dimana kekosongan oksigen tersebut mendorong terjadinya disosiasi  $NO_2$  (Spencer, 2010).

Kemudian Widanarto (2011) berhasil membuat sensor gas  $NO_2$  menggunakan sistem Floating Gate Field Effect Transistor (FG-FET) dengan menggunakan material ZnO. Perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ) pada material ZnO karena interaksi dengan gas  $NO_2$  berhasil diukur pada berbagai suhu dan kelembaban relatif. Sensor berhasil menunjukkan sensitivitas dan selektivitas tinggi, 1-20 ppm  $NO_2$  pada rentang suhu antara suhu kamar dan  $165^\circ C$  seperti yang terlihat pada Gambar 2.3. Gambar tersebut menunjukkan bahwa selektivitas sensor ditandai dengan memaparkannya ke 8 gas berbeda selain  $NO_2$ , diantaranya gas  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$ ,  $H_2S$ ,  $NH_3$ ,  $H_2O$ , dan  $SO_2$  dengan hasil bahwa material ZnO juga dapat menampilkan sinyal gas lain selain dari gas  $NO_2$  meskipun perubahan sinyal yang ditampilkan lemah. Ini menunjukkan bahwa keberadaan gas tersebut masih dapat terdeteksi dan menghasilkan perubahan fungsi kerja.



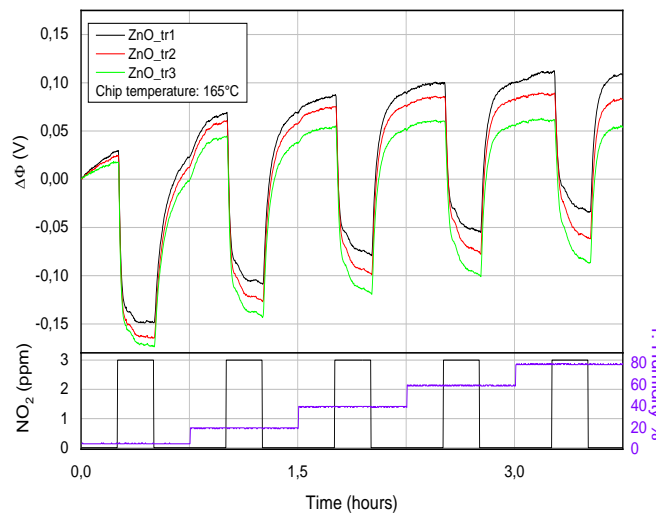
**Gambar 2.3.** Selektivitas sensor untuk 8 jenis gas berbeda pada suhu  $165^\circ C$  dalam keadaan kering (Widanarto *et al.*, 2011).

Pada tahun 2013, Stuk melakukan eksperimen yang mendapatkan hasil bahwa terdapat pengaruh gas eksternal pada sifat optik struktur sensor berdasarkan lapisan seng oksida. Lapisan ZnO yang digunakan dalam struktur sensor optoelektronik akan peka terhadap beberapa lingkungan gas yang dipilih, dan yang terpenting dalam proses penembakkan  $NO_2$  pada sensor ZnO dalam atmosfer udara sintesis akan menyebabkan parameter optik dan karakteristik spektral transmisi material mengalami perubahan akibat interaksi sensor dengan gas tersebut (Stuk *et al.*, 2013). Sementara itu, Shankar (2015) mengungkapkan bahwa gas  $NO_2$  dapat dideteksi oleh sensor berbasis film tipis ZnO dengan beragam bentuk yang disintesis menggunakan deposisi uap fisik dan kimia. Sensor ini menunjukkan respon yang cukup baik hanya pada suhu operasi yang tinggi (Shankar, 2015). Kemudian pada tahun 2021, Marjunus melakukan simulasi sinyal sensor berbasis fungsi kerja  $NO_2$  pada ZnO dengan hasil bahwa simulasi ini dapat digunakan untuk mencari nilai parameter yang bertanggung jawab pada deteksi  $NO_2$  pada ZnO, membuktikan bahwa nilai parameter hanya dipengaruhi oleh gas dan karakteristik lapisan sensitif, grafik perubahan fungsi

kerja terhadap waktu dengan Tren yang sama dengan hasil eksperimen, nilai cakupan didominasi oleh unsur O, dan rata-rata error perubahan fungsi kerja antara hasil simulasi dan eksperimen adalah 0,447035 V (Marjunus dkk., 2021).

## 1.8 Efek Kelembaban pada Sensor ZnO

Kelembaban relatif merupakan masalah serius bagi sensor karena arus permukaan mengganggu pengukuran potensial. Pengaruh kelembaban dapat mempengaruhi lapisan sensitif kimia. Dari Gambar 2.4 bisa terlihat bahwa sensitivitas sensor menurun dengan meningkatnya kelembaban relatif. Interaksi antara ZnO dan uap air pada suhu 165°C menghasilkan kimia absorpsi gugus OH pada permukaan. Karena energi ikat dari proses kimia absorpsi cukup kuat, suhu tinggi diperlukan untuk menghilangkan gugus OH. Sinyal tetap stabil dalam kondisi lembab selama paparan gas NO<sub>2</sub> (Widanarto, 2007).



**Gambar 2.4.** Respon sensor terhadap paparan NO<sub>2</sub> 3 ppm pada suhu 165°C di bawah dengan berbagai kelembaban relatif (Widanarto *et al.*, 2011).

## 1.9 Mekanisme Reaksi Pendeteksian Nitrogen Dioksida

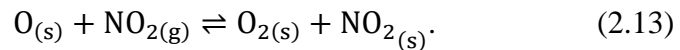
Pendeteksian gas nitrogen dioksida terjadi proses penyerapan yang reaksinya ketika ZnO terkena udara, molekul oksigen terserap di permukaan material (Callaghan, 2006) seperti yang ditunjukkan dalam Persamaan (2.11) berikut ini:



Menurut Sonker (2016) ketika film tipis ZnO terkena gas NO<sub>2</sub>, gas tersebut akan diserap langsung pada permukaan film tipis ZnO. Oleh karena itu, konsentrasi elektron pada permukaan lapisan tipis ZnO berkurang.



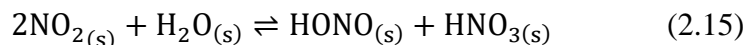
Persamaan (2.11) dan (2.12) menunjukkan proses terserapnya gas O<sub>2</sub> dan NO<sub>2</sub> pada permukaan material sensor ZnO. Setelah terserap, O<sub>2</sub> akan terurai menjadi O dan selanjutnya akan terjadi interaksi diantara keduanya pada permukaan material sebagaimana ditunjukkan pada Persamaan (2.13) berikut ini:



Kemudian ketika ZnO terkena udara, selain molekul oksigen terdapat juga molekul air yang terserap pada permukaan material (Marjunus, 2018), seperti yang ditunjukkan pada persamaan (2.14) berikut ini:



Persamaan (2.12) dan (2.14) menunjukkan proses terserapnya gas H<sub>2</sub>O dan NO<sub>2</sub> pada permukaan material sensor ZnO. Menurut Pitts (2002) setelah terserap H<sub>2</sub>O dan NO<sub>2</sub> akan terjadi interaksi diantara keduanya pada permukaan material sebagaimana ditunjukkan pada Persamaan (2.15) berikut ini:



Berdasarkan reaksi yang digunakan memiliki nilai parameter-parameter selama proses pendeteksian yaitu koefisien Arrhenius, koefisien lengket (*sticking*



*coefficient*) dan energi aktivasi. Koefisien Arrhenius menggambarkan pengaruh terhadap perubahan suhu yang menunjukkan laju reaksi yang terjadi, sedangkan koefisien lengket merupakan perbandingan antara partikel yang terikat dengan permukaan dan energi aktivasi merupakan energi minimum yang diperlukan untuk menjalankan suatu reaksi (Nix, 2014). Dalam penelitian ini, nilai koefisien Arrhenius, koefisien lengket (*sticking coefficient*) dan energi aktivasi yang terdapat pada reaksi maju (*forward*) dan reaksi balik (*reverse*) yang terlibat dalam penelitian ini dianggap sama. Kemudian dari studi literatur yang telah dilakukan, menurut Marjunus (2021) diperoleh nilai untuk parameter-parameter tersebut seperti yang ditunjukkan pada Tabel 2.1.

**Tabel 2.1** Koefisien Arrhenius dan energi aktivasi dalam reaksi pendeteksian gas NO<sub>2</sub> (Marjunus dkk., 2021).

Reaksi	S <sub>O</sub> dan Koefisien Arrhenius (s <sup>-1</sup> )		Energi Aktivasi (eV)	
	Reaksi maju ( <i>Forward</i> )	Reaksi balik ( <i>Reverse</i> )	Reaksi maju ( <i>Forward</i> )	Reaksi balik ( <i>Reverse</i> )
(2.11)	S <sub>0-O</sub> = 0,068	$\nu_{r1} = 8,0 \times 10^{12}$	$E_{f1} = 0,70$	$E_{r1} = 1,47$
(2.12)	S <sub>0-NO<sub>2</sub></sub> = 0,13	$\nu_{r2} = 6,8 \times 10^{12}$	$E_{r2} = 0,48$	$E_{r2} = 0,46$
(2.13)	$\nu_{f3} = 8,3 \times 10^{12}$	$\nu_{r3} = 9,5 \times 10^{12}$	$E_{f3} = 0,34$	$E_{r3} = 0,50$
(2.14)	$\nu_{f4} = 1,0 \times 10^6$	$\nu_{r4} = 1,0 \times 10^{14}$	$E_{f4} = 0$	$E_{r4} = 0,42$
(2.15)	$\nu_{f5} = -$	$\nu_{r5} = -$	$E_{f5} = -$	$E_{r5} = -$

Tabel 2.1 menunjukkan data nilai parameter-parameter yang terdapat pada reaksi gas NO<sub>2</sub>. Koefisien lengket dari Oksigen pada bahan ZnO adalah 0,068 kemudian koefisien Arrhenius pada reaksi ini  $8,0 \times 10^{12}$ . Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju dan mundurnya berturut-turut adalah sebesar 0,70

dan 1,47. Pada reaksi Nitrogen Dioksida pada bahan ZnO gas tersebut memiliki nilai koefisien lengket 0,13 kemudian koefisien Arrhenius pada reaksi ini sebesar  $6,8 \times 10^{12} \text{ (s}^{-1}\text{)}$ . Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju dan mundurnya berturut-turut adalah sebesar 0,48 eV dan 0,46 eV. Pada permukaan bahan ZnO, ternyata juga terjadi reaksi antara oksigen dan nitrogen dioksida dengan koefisien lengket  $8,3 \times 10^{12}$  kemudian nilai koefisien Arrhenius pada reaksi ini  $9,5 \times 10^{12}$ . Energi aktivasi yang dibutuhkan pada reaksi maju dan mundurnya berturut-turut adalah sebesar 0,34 eV dan 0,50 eV (Marjunus dkk., 2021). Pada permukaan bahan ZnO, ternyata juga terjadi reaksi pembentukan uap air dengan nilai koefisien lengket  $\nu_{f4} = 1,0 \times 10^6$  dan koefisien Arrhenius  $\nu_{r4} = 1,0 \times 10^{14}$  yang membutuhkan energi aktivasi untuk reaksi maju 0 eV dan untuk reaksi mundurnya membutuhkan 0,42 eV (Marjunus, 2018).

### III. METODOLOGI PENELITIAN

#### 3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini telah dilakukan di Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung, pada bulan Januari sampai Juni 2024.

#### 3.2 Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini adalah seperangkat komputer yang telah terinstal *software* Matlab untuk simulasi dan *software* Origin untuk melakukan *plotting* grafik.

#### 3.3 Prosedur Penelitian

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

##### 3.3.1 Menyusun Persamaan Diferensial Biasa (PDB) Orde Satu untuk Hunian Molekul/Atom

Persamaan reaksi 2.11, 2.12, 2.13, 2.14 dan 2.15 disusun menjadi persamaan diferensial orde satu untuk mendapatkan nilai hunian ( $\theta$ ) gas dan perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ) pada permukaan bahan ZnO.

### 3.3.2 *Fitting* Persamaan Garis Hasil Penelitian Widanarto (2011).

Mengacu pada penelitian Sucipto (2021), Kekalenteu (2020), dan Fatih (2020), dilakukan pendekatan grafik penelitian Widanarto (2011) dengan menggunakan *fitting* grafik untuk mendapatkan persamaan garis yang akan memudahkan perhitungan nilai *error*. Langkah yang dilakukan sebagai berikut:

- a. Data hasil penelitian Widanarto (2011) dimasukkan ke dalam *software* Origin.
- b. Dilakukan *plotting* grafik penelitian Widanarto (2011).
- c. Diperoleh grafik hasil penelitian Widanarto (2011).
- d. Dilakukan *fitting* persamaan garis pada *software* Origin.
- e. Diperoleh grafik hasil *fitting* dan persamaan garis.

### 3.3.3 Optimasi Parameter

Tahap selanjutnya yang dilakukan setelah mendapatkan nilai yang diperlukan untuk melengkapi Tabel (2.1) adalah mengoptimasi nilai-nilai yang telah didapatkan sebelumnya, optimasi parameter ini bertujuan untuk mendapatkan nilai-nilai dengan nilai *error* terkecil jika dibandingkan dengan grafik penelitian Widanarto (2011). Langkah-langkah yang dilakukan pada tahapan ini adalah sebagai berikut:

- a. Persamaan diferensial yang telah dibuat diselesaikan dengan menggunakan program dalam *software* Matlab.
- b. Variasi waktu dalam program dibuat selama 180 menit dan suhu yang digunakan pada suhu 165°C.
- c. Nilai fungsi kerja dari bahan ZnO berbanding lurus dengan  $\theta_{\text{NO}_2}$ ,  $\theta_{\text{O}_2}$ ,  $\theta_{\text{NO}}$ ,  $\theta_{\text{O}}$ ,  $\theta_{\text{H}_2\text{O}}$ ,  $\theta_{\text{HONO}}$  dan  $\theta_{\text{HNO}_3}$ .
- d. Menentukan tebakan awal dari nilai-nilai yang belum diketahui pada Tabel 2.1. nilai tebakan awal untuk  $\nu_{f5}$  dipilih sebesar  $8,3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , untuk  $\nu_{r5}$

dipilih sebesar  $8,3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , untuk  $E_{f5}$  yang dipilih sebesar 0,1 eV untuk  $E_{r5}$  dipilih sebesar 0,1 eV. Nilai parameter tebakan awal dapat dilihat pada tabel 3.1.

**Tabel 3.1.** Nilai tebakan awal untuk optimasi parameter

No	$S_0$ dan Koefisien Arrhenius ( $\text{s}^{-1}$ )		Energi Aktivasi (eV)	
	Reaksi maju ( <i>Forward</i> )	Reaksi mundur ( <i>Reverse</i> )	Reaksi maju ( <i>Forward</i> )	Reaksi mundur ( <i>Reverse</i> )
1.	$S_{0-O} = 0,068$	$\nu_{r1} = 8,0 \times 10^{12}$	$E_{f1} = 0,70$	$E_{r1} = 1,47$
2.	$S_{0-NO_2} = 0,13$	$\nu_{r2} = 6,8 \times 10^{12}$	$E_{f2} = 0,48$	$E_{r2} = 0,46$
3.	$\nu_{f3} = 8,3 \times 10^{12}$	$\nu_{r3} = 9,5 \times 10^{12}$	$E_{f3} = 0,34$	$E_{r3} = 0,50$
4.	$\nu_{f4} = 1,0 \times 10^6$	$\nu_{r4} = 1,0 \times 10^{12}$	$E_{f4} = 0$	$E_{r4} = 0,42$
5.	$\nu_{f5} = 8,3 \times 10^{12}$	$\nu_{r5} = 8,3 \times 10^{12}$	$E_{f5} = 0,1$	$E_{r5} = 0,1$

- e. Setelah Tabel 3.1 terisi semua nilainya, maka seluruh parameter dioptimasi satu per satu dan akan diperoleh grafik fungsi kerja.
- f. Kemudian grafik yang diperoleh disisihkan dengan grafik Widanarto (2011), di mana hasil selisih terkecil akan menjadi nilai parameter terbaik.
- g. Kemudian dilakukan optimasi untuk semua parameter yang terdapat pada Tabel 3.1.

### 3.3.4 Simulasi Akhir

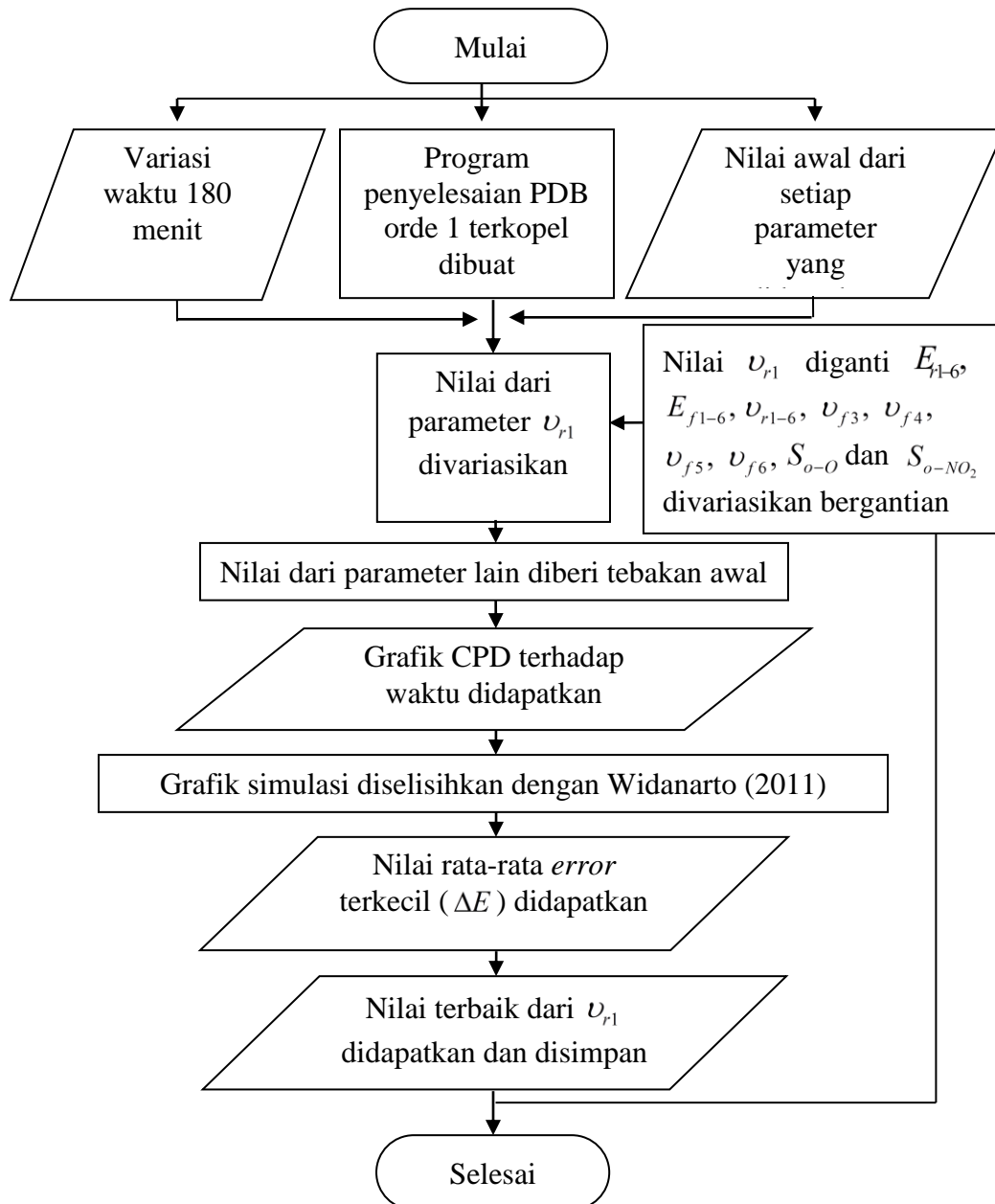
Penelitian ini diakhiri dengan sebuah simulasi yang dilakukan pada nilai-nilai parameter yang didapatkan. Simulasi akhir ini dilakukan setelah nilai-nilai parameter tersebut dioptimasi, yang bertujuan untuk mendapatkan grafik

perubahan fungsi kerja terhadap waktu dengan nilai-nilai yang didapatkan dari hasil optimasi yang dilakukan. Simulasi akhir ini dilakukan dengan langkah yang secara garis besar sama seperti proses-proses yang telah dilakukan sebelumnya, dengan beberapa tambahan sebagai berikut:

- a. Persamaan diferensial yang telah dibuat diselesaikan dengan menggunakan program dalam *software* Matlab.
- b. Variasi waktu dalam program dibuat selama 180 menit dan suhu yang digunakan pada suhu  $165^{\circ}\text{C}$ .
- c. Nilai fungsi kerja dari bahan ZnO berbanding lurus dengan  $\theta_{NO_2}$ ,  $\theta_{O_2}$ ,  $\theta_{NO}$ ,  $\theta_{O}$ ,  $\theta_{H_2O}$ ,  $\theta_{HONO}$  dan  $\theta_{HNO_3}$ .
- d. Program dijalankan dengan semua parameter yang sudah didapatkan dimasukkan ke dalam penyelesaian persamaan diferensial.
- e. Nilai hunian ( $\theta$ ) dan perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ) didapatkan pada permukaan bahan  $NO_2$  secara simulasi.
- f. Grafik perubahan fungsi kerja ( $\Delta\phi$ ) terhadap waktu ( $t$ ) dibuat dengan menggunakan MATLAB.
- g. Hasil simulasi dibandingkan dengan hasil penelitian Widanarto (2011).

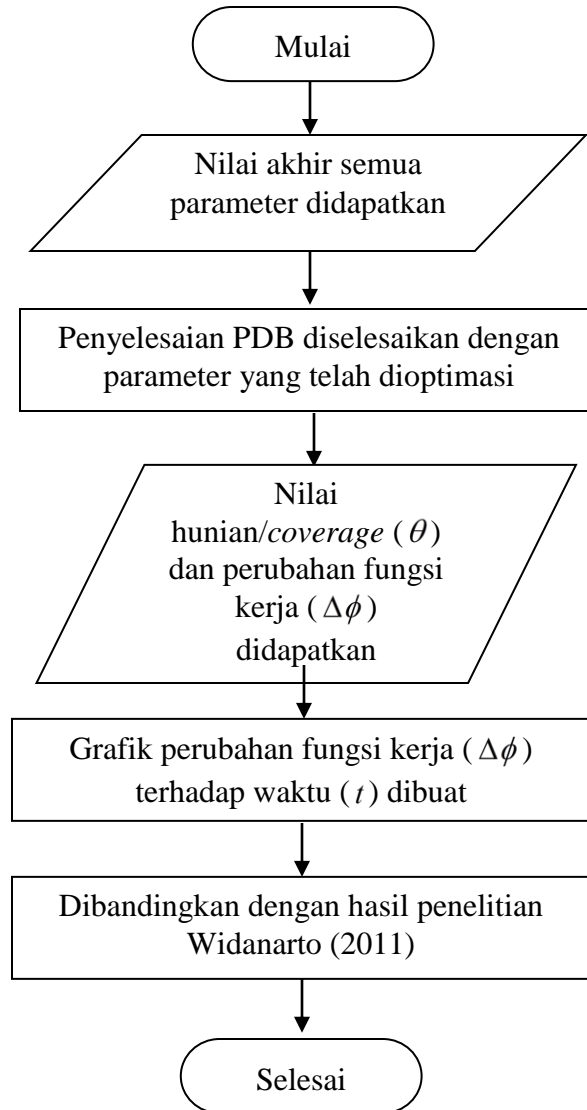
### 3.4 Diagram Alir Penelitian

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



**Gambar 3.1** Optimasi Parameter

Adapun diagram alir akhir dari penelitian ini ditunjukkan pada Gambar (3.2) sebagai berikut.



**Gambar 3.2** Diagram alir simulasi akhir penelitian



## V. KESIMPULAN DAN SARAN

### A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut:

1. Bentuk Simulasi yang dilakukan dalam penelitian ini menghasilkan grafik perubahan fungsi kerja terhadap waktu kurang sesuai dengan hasil eksperimen yang didapatkan Widanarto seiring dengan waktu berjalannya simulasi ini.
2. Simulasi dalam penelitian ini berhasil mendapatkan nilai parameter yang terdapat dalam pendeteksian gas NO<sub>2</sub>. Dimulai dari nilai-nilai energi aktivasi untuk setiap reaksi yaitu energi penyerapan O<sub>2</sub> ( $E_{f1}$ ) sebesar 1,42 eV dan penyerapan gas NO<sub>2</sub> ( $E_{f2}$ ) sebesar 1,9 eV serta reaksi maju interaksi keduanya di permukaan material ZnO ( $E_{f3}$ ) sebesar 1,05 eV, kemudian penyerapan H<sub>2</sub>O ( $E_{f4}$ ) sebesar 0,53 eV serta reaksi maju antara NO<sub>2</sub> dan H<sub>2</sub>O ( $E_{f5}$ ) sebesar 0,14 eV. Kemudian diikuti oleh energi pelepasan O<sub>2</sub> ( $E_{r1}$ ) sebesar 0,56 eV dan pelepasan gas NO<sub>2</sub> ( $E_{r2}$ ) sebesar 0,7 eV serta reaksi balik interaksi keduanya ( $E_{r3}$ ) sebesar 9,86 eV kemudian pelepasan H<sub>2</sub>O ( $E_{r4}$ ) sebesar 0,43 eV dan reaksi balik interaksi keduanya ( $E_{r5}$ ) sebesar 0,24 eV. Kemudian nilai koefisien lengket untuk reaksi penyerapan O<sub>2</sub> ( $S_{o-o}$ ) sebesar 1,1 dan penyerapan gas NO<sub>2</sub> ( $S_{o-no2}$ ) sebesar 1,52 serta nilai koefisien Arrhenius untuk reaksi maju interaksi keduanya ( $\nu_{f3}$ ) sebesar  $5,5 \times 10^{12} \text{ S}^{-1}$  di permukaan material ZnO dan koefisien Arrhenius H<sub>2</sub>O ( $\nu_{f4}$ ) sebesar  $1 \times 10^{11} \text{ S}^{-1}$  serta nilai koefisien Arrhenius untuk reaksi maju keduanya ( $\nu_{f5}$ ) sebesar  $4 \times 10^{11} \text{ S}^{-1}$  diikuti oleh nilai koefisien

Arrhenius untuk pelepasan  $O_2$  ( $v_{r1}$ ) sebesar  $6,8 \times 10^{12} S^{-1}$  dan pelepasan gas  $NO_2$  ( $v_{r2}$ ) sebesar  $2,8 \times 10^{12} S^{-1}$  serta reaksi dari interaksi keduanya nilai koefisien Arrhenius untuk reaksi balik interaksi keduanya ( $v_{r3}$ ) sebesar  $5,9 \times 10^{12} S^{-1}$  di permukaan material ZnO dan koefisien Arrhenius  $H_2O$  ( $v_{r4}$ ) sebesar  $10 \times 10^{12} S^{-1}$  serta nilai koefisien Arrhenius untuk reaksi balik keduanya ( $v_{r5}$ ) sebesar  $1,2 \times 10^{12} S^{-1}$

3. Reaksi- reaksi yang digunakan dalam simulasi ini berjumlah 5 reaksi selain reaksi yang digunakan dalam penelitian sebelumnya reaksi yang digunakan dalam simulasi ini menggunakan reaksi air ( $H_2O$ )

## **B. Saran**

Saran dalam upaya peningkatan dan pengembangan penelitian ini yaitu perlu dilakukan simulasi lanjutan mengenai pendeteksian gas  $NO_2$  oleh sensor ZnO dengan menambahkan reaksi lain yang mungkin terjadi dalam pendeteksian selain reaksi yang digunakan dalam penelitian ini kemudian perlu dilakukan eksperimen untuk membuktikan perhitungan nilai cakupan yang telah didapatkan dalam simulasi ini serta penambahan jumlah reaksi yang kemungkinan besar juga berpengaruh terhadap hasil simulasi sehingga diperlukan reaksi yang lebih lengkap yang berkaitan dengan simulasi ini.

## DAFTAR PUSTAKA

- Abdullah, M., Khairurrijal. 2009. Karakterisasi nanomaterial. *Jurnal Nanosains & Nanoteknologi*. 2.
- Adi, M., Firdaus, K.S., Budi, W.S. 2007. Efek Magnet Optis pada lapisan tipis (ZnO). *Berkala Fisika* Vol 10. No. 1. hal 31-34.
- Callaghan, C. A. 2006. Kinetic and Catalysis of Water-Gas-Shift Reaction: A Microkinetic and Graph Theoretic Approach. *PhD Tesis*. Worcester Polytechnic Institute.
- Fatih, Y. 2020. Simulasi Sinyal Sensor Gas H<sub>2</sub> berbasis perubahan fungsi kerja pada permukaan bahan Pt<sub>80</sub>Au<sub>14</sub>T<sub>16</sub>. *Skripsi*. Universitas Lampung.
- Firdausia, S.T. 2017. *Toksikologi Udara Nitrogen Dioksida (NO<sub>2</sub>)*. Surakarta: Universitas Sebelas Maret.
- Gusti, A. 2019. Health Risk Assessment Of Inhalation Exposure To SO<sub>2</sub> And NO<sub>2</sub> Among Traders In A Traditional Market. *Public Health of Indonesia* 5:30–35.
- Gottfried, J. M. 2003. CO Oxidation Over Gold: Adsorption and Reaction of Oxygen, Carbon Monoxide, and Carbon Dioxide on an Au (110)-(1x2) surface. *PhD Tesis*. Universitat Berlin.
- Han, N., Chai, L., Wu, X., and Liu, H. 2010. Counterintuitive Sensing Mechanism of ZnO Nanoparticle Based Gas Sensors. *Sensors and Actuators B Chemical*. Vol. 150. No. 1. Hal. 230 - 238.

- Handayani, D., F. Yunus, dan W.H. Wiyono. 2003. Pola Penyebaran Gas NO<sub>2</sub> di Udara Ambien Kawasan Utara Kota Semarang pada Musim Kemarau Menggunakan Program ISCST3. *Jurnal Presipitasi*. Vol. 1 No. 1, Agt 2003: 8–9.
- Hulanicki, A., Geab, S., and Ingman, F. 1991. Chemical Sensors Definitions and Classification. *Pure and Applied Chemistry*. Vol. 63. No. 9. Hal. 1247-1250.
- Karimi, A., Shirmardi, M., Hadei, M., Birgani, Y.T., Neisi, A., Takdastan, A. dan Goudarzi, G. 2019. Concentrations and health effects of short- and long-term exposure to PM<sub>2.5</sub>, NO<sub>2</sub>, and O<sub>3</sub> in ambient air of Ahvaz city, Iran (2014–2017). *Ecotoxicology and Environmental Safety* 180:542–48.
- Kekalenteu, D. C. 2020. Simulasi Sinyal Sensor berbasis Fungsi Kerja ZnO untuk Gas NO<sub>2</sub>. *Skripsi*. Universitas Lampung.
- Khan, Z.R., Khan, M.S., Zulfequar, M., Khan, M.S. 2011. Optical and Structural Properties of ZnO Thin Films Fabricated by Sol-Gel Method. *Materials Sciences and Applications*.
- Kumar R., Al-Dossary, O., Kumar, G., and Umar, A. 2015. Zinc Oxide Nanostructures for NO<sub>2</sub> Gas-Sensor Applications. *Nano-micro lett*. Vol. 7. Hal. 97-120.
- Liu, D., Tang, Z. dan Zhang, Z. 2020. Visible light assisted room-temperature NO<sub>2</sub> gas sensor based on hollow SnO<sub>2</sub>@SnS<sub>2</sub> nanostructures. *Sensors and Actuators, B: Chemical* 324.
- Marjunus, R., Kekalenteu, D. C., Riyanto, A dan Widanarto, W. 2021. Simulation of NO<sub>2</sub> Work function-based sensor Signal on ZnO. *Journal of Physics: Conference Series*. Hal. 8.
- Marjunus, R. 2018. Development of Pt-based Sensitive Layer for Carbon Monoxide Work Function Change Based Sensor in Air at Room Temperature. (*Disertasi*). Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik. Universität der Bundeswehr München. German.

- Mukono, J. 2008. *Pencemaran Udara dan Pengaruhnya Terhadap Gangguan Saluran Pernapasan*. Surabaya: Airlangga University Press.
- Nagirnyak, S. V. dan Dontsova, T.A. 2017. Gas sensor device creation. Proceedings of the 2017 IEEE 7th International Conference on Nanomaterials: *Applications and Properties*, NAP 2017 2017-Januari:1–4.
- Nix, R.M. 2014. *An introduction to surface chemistry*. Quenn Mary University of London. London.
- Paolucci, V., Emamjomeh, S.M., Anselmi-Tamburini, U. dan Cantalini, C. 2019. The Influence of Temperature and Visible Light Activation on the NO<sub>2</sub> Response of WO<sub>3</sub> Nanofibers Prepared by Electrospinning. Hal. 1 in *Proceedings*. Vol. 14.
- Qi, W., Li, W., Sun, Y., Guo, J., Xie, D. dan Cai, L. 2019. In fl uence of lowdimension carbon-based electrodes on the performance of SnO<sub>2</sub> nano fiber gas sensors at room temperature. *Nanotechnology* 30:345503.
- Rustami, E. 2012. Sistem instrumentasi berbasis Kristal fotonik satu dimensi untuk pengukuran parameter gas NO<sub>2</sub> pada indeks standar pencemaran udara. (*Tesis*). Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam. Institut Pertanian Bogor: Bogor.
- Sandra, C. 2008. Pengaruh Penurunan Kualitas Udara Ambien Terhadap Fungsi Paru dan Keluhan Pernafasan Pada Polisi Lalu Lintas Polwiltabes Surabaya. *Tesis*. Surabaya: Universitas Airlangga.
- Sankar Ganesh, R., Patil, V.L., Durgadevi, E., Navaneethan, M., Ponnusamy, S., Muthamizhchelvan, C., Kawasaki, S., Patil, P.S. dan Hayakawa, Y. 2019. Growth of Fe doped ZnO nanoellipsoids for selective NO<sub>2</sub> gas sensing application. *Chemical Physics Letters* 734:3–5.
- Senft, C., Iskra, P., Eisele, I. and Hansch, W. 2011. *Work function - based sensor: Schottky - and FET-based devices (in Chemical Sensors: Comprehensive Sensor Technologies, Editor: G. Korotchenkov)*. Vol. 4. Momentum Press. New York.

- Senft, C. 2009. Austrittsarbeitsbasierte Wassertofdetektion für Fahrzeuge mit Brennstoffzellenantrieb. *PhD Tesis*. Universität der Bundeswehr München.
- Shankar, P. 2015. Gas Sensing Mechanism of Metal Oxide : The Role of Ambient Atmosphere, Type of Semiconductor and Gases. *Science Jet*. Vol. 4. Hal. 126.
- Somorjai, G. A., dan Li, Y. 2010. *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis Second Edition*. John Wiley & Son. New Jersey.
- Sonker, R., Yadav, B.C., Sharma, A., Tomar, M., and Gupta, V. 2016. Experimental Investigation on NO<sub>2</sub> Sensing of Pure ZnO and PANI-ZnO Composite Thin Film. *The Royal Society of Chemistry*. Vol. 6 Hal. 56149-56148.
- Spencer, M. 2010. ZnO Nanostructures for Gas Sensing : Interaction of NO<sub>2</sub>, NO, O, and N with the ZnO. *J. Phys. Chem. C*. Vol. 114. Hal. 10881–10893.
- Stuk, P., Pustenly, T., Golaszewka, K., and Borysiewicz, M.A. 2013. Gas Sensor Based on ZnO Structures. *Acta Physica Polonica A*. Vol. 124. No. 3. Hal. 567 – 569.
- Sucipto, A. 2020. Simulasi Pendeteksian Sinyal Sensor Gas H<sub>2</sub>S menggunakan Ag<sub>2</sub>O berbasis Fungsi Kerja. *Skripsi*. Universitas Lampung.
- Sunu, P. 2001. *Melindungi Lingkungan Dengan Menerapkan ISO 14001*. Jakarta: PT. Gramedia Widia Sarana Indonesia.
- Suwanboon, S., Tanattha, R. dan Tanakorn, R. 2008. Fabrication And Properties Of Nanocrystalline Zinc Oxide Thin Film Prepared By Sol-gel Method. *Songklanakarinn journal of Science and technology*. 30(1), 65-69.
- Suyono. 2014. *Pencemaran Kesehatan Lingkungan*. Jakarta: Penerbit Buku Kedokteran EGC.
- Vaseem, M., Umar A, Hahn Y. 2010. ZnO Nanoparticles : Growth , Properties , and Applications. *Metal Oxide Nanostructures and Their Applications*. 5:1-36.

- Wang, H., Zhou, L., Liu, Y., Liu, Fengmin, Liang, X., Liu, Fangmeng, Gao, Y., Yan, X. dan Lu, G. 2020. UV-activated ultrasensitive and fast reversible ppb NO<sub>2</sub> sensing based on ZnO nanorod modified by constructing interfacial electric field with In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles. *Sensors and Actuators, B: Chemical* 305.
- Wardhana, W. A. 2004. *Dampak Pencemaran Lingkungan*. Edisi Revisi. Yogyakarta: Andi Offset.
- Widanarto, W. 2007. Gas Detection with Floating Gate Field Effect Transistor. *Disertasi*. Universitas der Bundeswehr Munchen.
- Widanarto, W., Senft, C. Senftleben, O., Hansch, W., and Eisele, I. 2011. Characterization and Sensing Properties of ZnO Film In FG-FET Sensor System for NO<sub>2</sub> Detection. *International Journal of Basic & Applied Sciences IJBAS-IJENS*. Vol. 11. No. 1. Hal. 104 – 108.
- Wolfbeis, O. S. 2000. *Sensor kimia serat optik dan biosensor*. Jakarta: Balai Pustaka. Hal 81-89.
- Yan, X. T., and Xu, Y. 2010. *Chemical Vapor Deposition*. Springer-Verlag. London.
- Zeng, Y., Cao, Y., Qiao, X., Seyler, B.C. dan Tang, Y. 2007. Air pollution reduction in China: Recent success but great challenge for the future. *Science of the Total Environment* 663:329–37.
- Zhao, S., Liu, S., Sun, Y., Liu, Y., Beazley, R. dan Hou, X. 2020. Assessing NO<sub>2</sub> related health effects by non-linear and linear methods on a national level. *Science of the Total Environment* 744:140909.
- Zhou, P., Shen, Y., Zhao, S., Li, G., Yin, Y., Lu, R., Gao, S., Han, C. dan Wei, D. 2019. NO<sub>2</sub> sensing properties of WO<sub>3</sub> porous films with honeycomb structure. *Journal of Alloys and Compounds* 789:129–38.
- Zhu, D. dan Zhou, X. 2019. Effect of urban water bodies on distribution characteristics of particulate matters and NO<sub>2</sub>. *Sustainable Cities and Society* 50.