

STUDI MEKANISME DETEKSI GAS KARBON MONOKSIDA PADA PERMUKAAN SENSOR SEMIKONDUKTOR 2D TUNGSTEN DISELENIDA

Pembimbing : Adhitya Gandaryus Saputro, S.T., M.T., Ph.D.
Dr.Eng. Muhammad Haris Mahyuddin, S.T., M.Eng.



Latar Belakang

Gas karbon monoksida (CO) merupakan gas beracun yang tidak berwarna dan tidak berbau sehingga sulit dideteksi secara langsung oleh manusia tanpa bantuan alat. Paparan CO dalam konsentrasi tinggi dapat menimbulkan gejala seperti pusing, mual, sakit kepala, hingga kematian. Deteksi dini CO menjadi sangat krusial untuk mencegah keracunan dan dampak buruk terhadap kesehatan. Oleh karena itu diperlukan sensor CO yang portabel, berbiaya rendah, dan memiliki akurasi tinggi.

Permasalahan

Meskipun demikian, studi teoritis menunjukkan bahwa permukaan WSe_2 pristine hanya berinteraksi lemah dengan molekul CO. Hal ini menyebabkan mekanisme deteksi respons sensor masih belum sepenuhnya dapat dijelaskan. Fitur struktural tertentu, seperti cacat titik atau ketidaksempurnaan kristal, memiliki kemungkinan berperan dalam proses deteksi gas. Berbagai penelitian menyebutkan bahwa rekayasa permukaan melalui pembentukan cacat titik, misalnya vakansi selenium (Se-vacancy) maupun vakansi tungsten (W-vacancy), dapat mengubah sifat adsorpsi dan meningkatkan interaksi dengan molekul gas. Dalam konteks ini, cacat dapat berfungsi sebagai situs aktif yang memperkuat adsorpsi, transfer muatan, dan berpengaruh besar terhadap respons sensor.

Ide Solusi

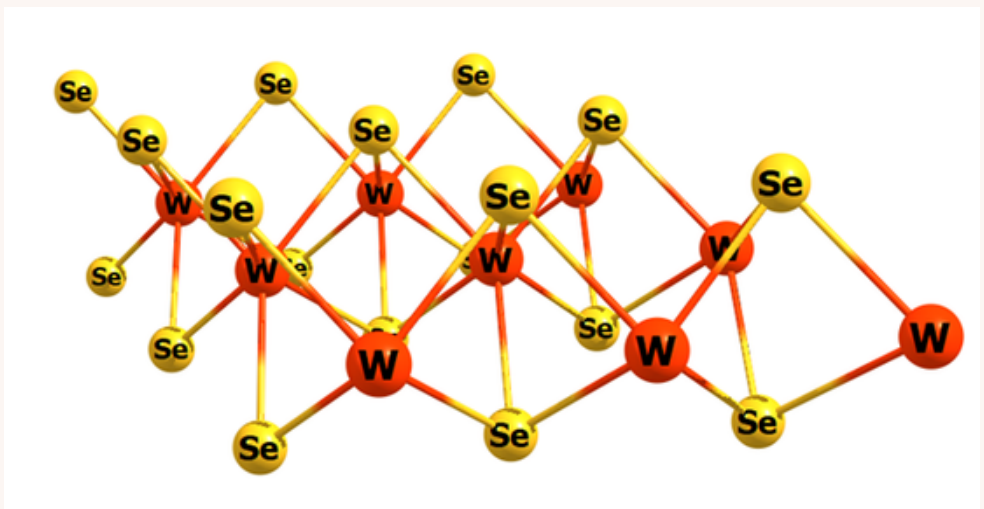
Penelitian ini berfokus pada mempelajari mekanisme deteksi CO pada permukaan WSe_2 pristine dan memiliki cacat titik dengan menggunakan pendekatan komputasi berbasis DFT. Melalui perhitungan energi adsorpsi, struktur elektronik, dan transfer muatan, penelitian ini bertujuan mengidentifikasi peran spesifik cacat, khususnya vakansi Se dan vakansi W, dalam menentukan kekuatan adsorpsi dan respons terhadap CO. Model mikrokinetika kemudian digunakan untuk mengkuantifikasi hubungan antara energi adsorpsi dengan surface coverage serta respons sensor dalam rentang tekanan parsial CO yang relevan, baik dalam kondisi vakum maupun dengan keberadaan gas-gas latar.

Tujuan

1. Menghitung energi adsorpsi, jarak adsorpsi, dan transfer muatan berbagai spesies gas (CO , N_2 , O_2 , CO_2 , dan H_2O) pada permukaan WSe_2 pristine dan dengan cacat vakansi W dan Se.
2. Menghitung surface coverage dan respons sensor terhadap CO dalam rentang tekanan parsial yang luas, baik pada kondisi vakum maupun dengan kehadiran gas-gas latar.
3. Mengevaluasi respons sensor WSe_2 pristine dan dengan cacat vakansi W dan Se terhadap CO dalam kondisi tanpa dan dengan kehadiran gas-gas latar.

Rancangan Simulasi

Berikut adalah model permukaan WSe_2 pristine yang akan digunakan untuk pada *software* Quantum Espresso



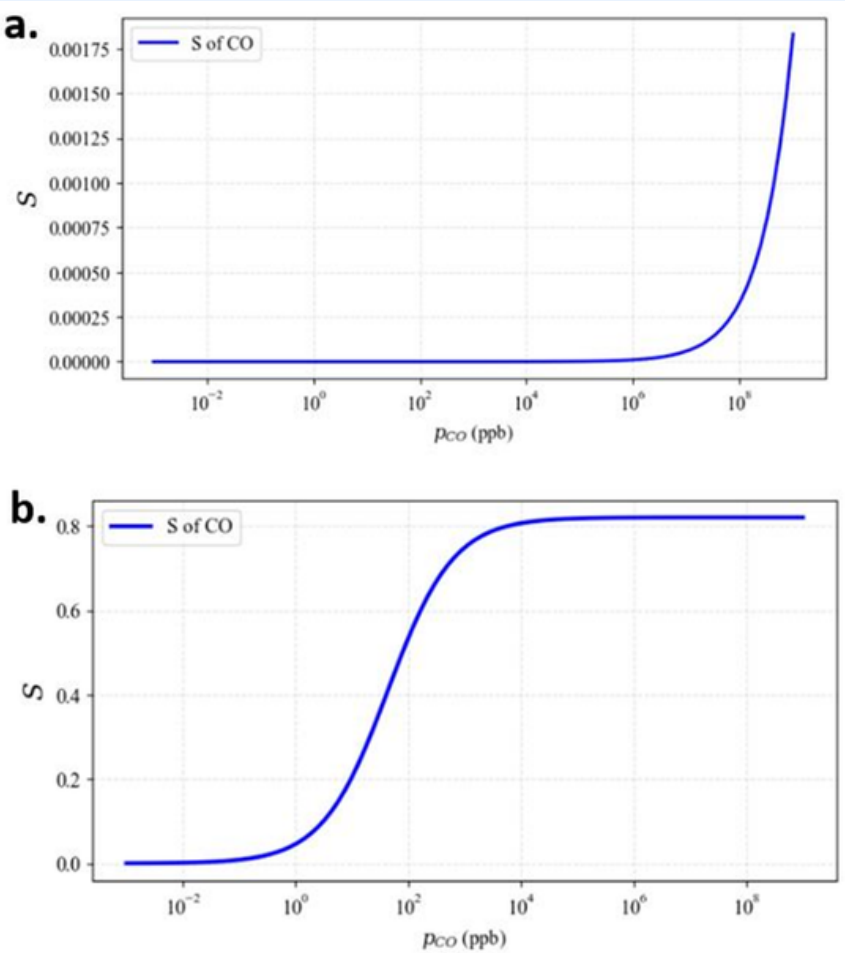
Penelitian melibatkan tiga model permukaan WSe_2 , yaitu WSe_2 pristine, W-vacancy, dan Se-vacancy. Berikut adalah rancangan simulasi dari penelitian tesis ini :

- Kondisi lingkungan: temperatur 300 K (room temperature), tekanan total 1 atm
- Mekanisme adsorpsi: asumsi non-aktivasi dengan vibrasi molekuler tetap dipertahankan dari gas bebas
- Functional exchange-correlation: PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) dengan koreksi DFT-D3 van der Waals
- Pseudopotential: ultrasoft pseudopotential (USPP)
- Plane-wave cutoff: 40 Ry untuk wavefunction, 400 Ry untuk charge density
- K-point sampling: Monkhorst-Pack mesh $5 \times 5 \times 1$
- SCF convergence: Gaussian smearing 0.005 Ry
- Vacuum layer: 20 Å perpendicular to surface

Surface Coverage dan Respons Sensor Gas CO pada Konfigurasi Permukaan WSe_2 di Kondisi Vakum

Pada permukaan WSe_2 pristine memiliki nilai respons sensor yang kecil dan hanya memunculkan noise. Permukaan dengan vakansi W (Gambar a) mulai menunjukkan respons hanya pada tekanan CO yang tinggi, melampaui 10^9 ppb. Hal ini konsisten dengan pola θ CO yang diamati. Namun, respons ini sangat terbatas karena baik nilai surface coverage CO maupun transfer muatan menunjukkan nilai yang dapat diabaikan. Sebaliknya, permukaan dengan vakansi Se (Gambar b) menunjukkan respons sensor yang kuat, hasil dari kombinasi surface coverage CO yang tinggi dan transfer muatan yang signifikan.

Temuan yang ada mengindikasikan bahwa respons sensor material WSe_2 terhadap gas CO sebagian besar berasal dari situs vakansi Se, bukan dari permukaan pristine atau dengan vakansi W. Simulasi mikrokinetika dalam kondisi vakum ini memberikan informasi mengenai kemampuan adsorpsi intrinsik masing-masing konfigurasi permukaan. Data menunjukkan bahwa situs vakansi Se unggul dalam menangkap CO pada temperatur ruangan, melampaui kinerja kedua permukaan lainnya.



Analisis Adsorpsi Gas CO pada Konfigurasi Permukaan WSe_2 dengan Kehadiran Gas Latar

Secara keseluruhan, hasil-hasil yang didapat menunjukkan bahwa perilaku respons sensor WSe_2 terhadap gas CO pada temperatur ruangan yang dilaporkan dalam Zhang et al. paling mungkin terkait dengan kehadiran vakansi Se dalam material. Mekanisme deteksi sensor diatur oleh model adsorpsi-desorpsi langsung daripada mekanisme ionosorpsi yang umum pada sensor berbasis oksida logam, mengingat O_2 tidak teradsorpsi atau teraktivasi secara efektif pada permukaan WSe_2 apapun.

Kesimpulan

Berikut ini adalah kesimpulan berdasarkan tujuan penelitian yang telah ditulis.

1. Energi adsorpsi, jarak adsorpsi, dan transfer muatan pada konfigurasi permukaan WSe_2 telah dihitung dan menunjukkan adsorpsi yang sangat kompetitif untuk gas CO pada permukaan WSe_2 Se-vacancy berdasarkan data yang didapatkan disbanding permukaan WSe_2 pristine dan W-vacancy.
2. Surface coverage dan respons sensor terhadap CO pada kondisi vakum dan kehadiran gas latar di permukaan WSe_2 -Se vacancy menunjukkan nilai yang paling tinggi dibandingkan kedua permukaan lainnya.
3. Respons sensor terhadap gas CO hanya dapat terdeteksi pada permukaan WSe_2 Se-vacancy karena hanya permukaan inilah yang dapat mengikat gas CO dengan baik secara kimia pada kondisi vakum maupun dengan kehadiran gas latar. Sedangkan pada kasus WSe_2 pristine dan W-vacancy hanya terikat lemah secara fisik sehingga tidak ada transfer muatan yang terjadi pada kedua permukaan ini.

Saran

Berdasarkan penelitian yang dilakukan, saran dari penelitian ini berupa perbaikan perhitungan respons sensor dengan melakukan perhitungan langsung konduktivitasnya, bukan melalui charge.