

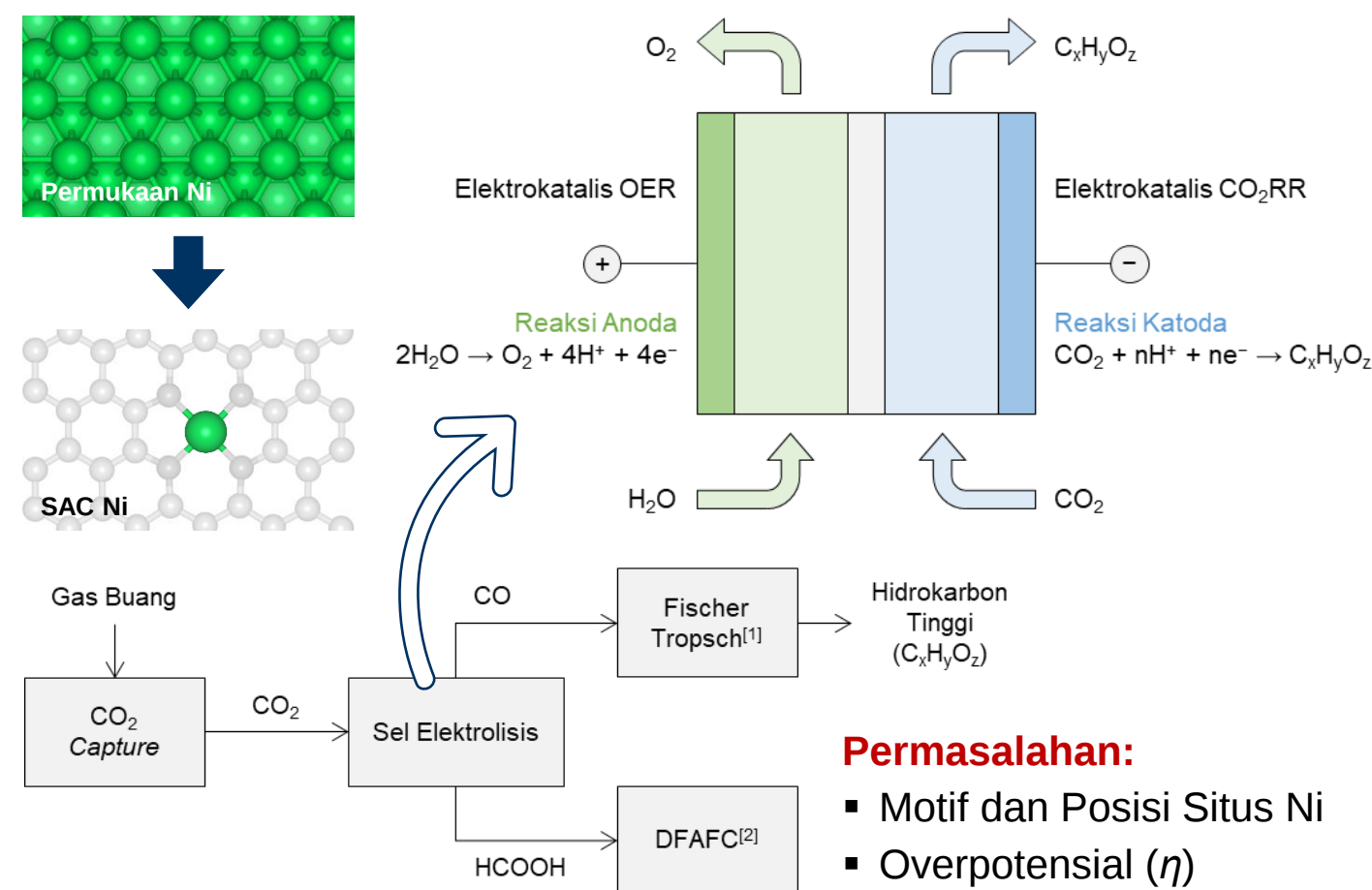
Studi Ab-Initio Aktivitas Katalis Berbasis Ni/N/C Situs Tepi pada Reaksi Reduksi Elektrokimia CO₂ dengan Efek Penambahan Dopan Boron

Arifin Luthfi Maulana (23319009) | Adhitya Gandaryus Saputro, Ph.D. | Prof. Hermawan Kresno Dipojono, Ph.D.
Program Studi Magister Teknik Fisika, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Bandung

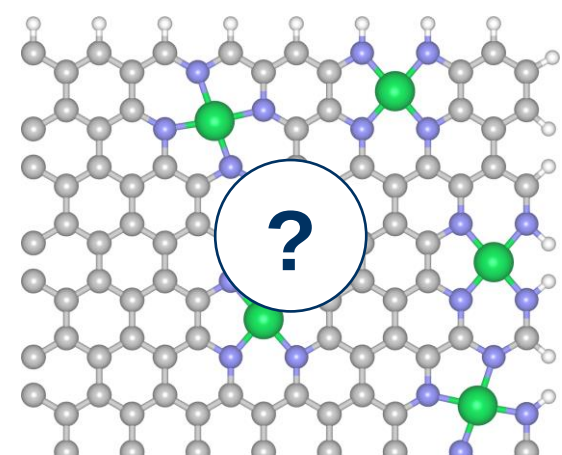


Latar Belakang

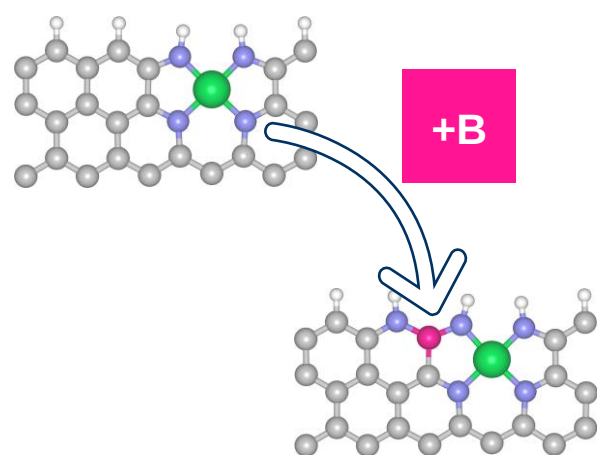
- CO₂ dapat dikonversi melalui reduksi elektrokimia (CO₂RR).^[1]
- Digunakan pendekatan bertahap (CO₂ → CO/HCOOH → C_xH_yO_z) untuk mengendalikan produk reaksi.^[2,3]
- Elektrokatalis logam memiliki selektivitas produksi CO₂RR yang rendah akibat kompetisi dengan reaksi evolusi hidrogen (HER).^[1,4]
- Elektroda Ni dapat membentuk CO, namun terhalang CO poisoning.^[4]
- Katalis permukaan Ni direduksi menjadi skala atom tunggal (SAC).



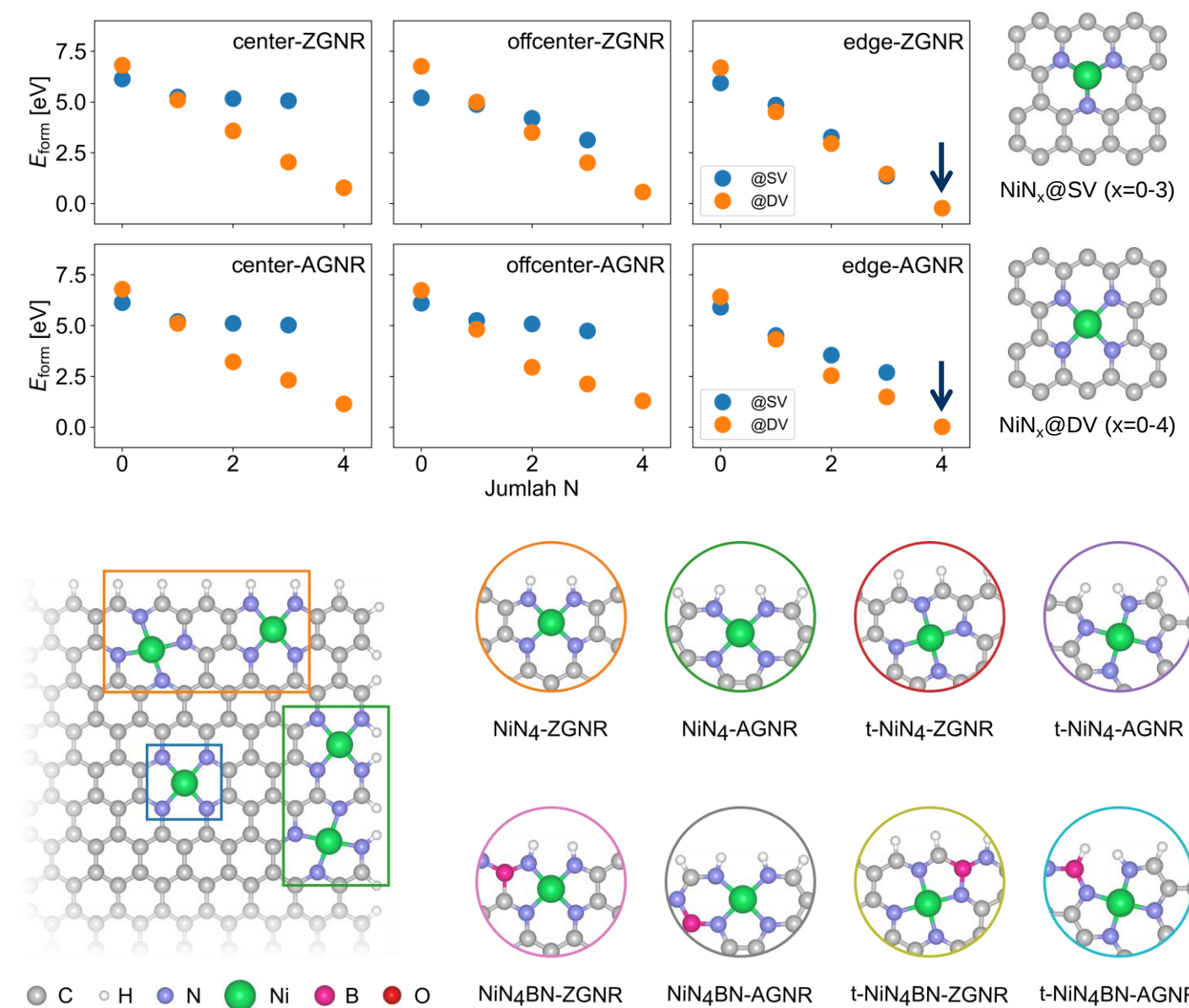
Eksplorasi Motif dan Kestabilan Situs Ni Tepi Grafena^[5,6]



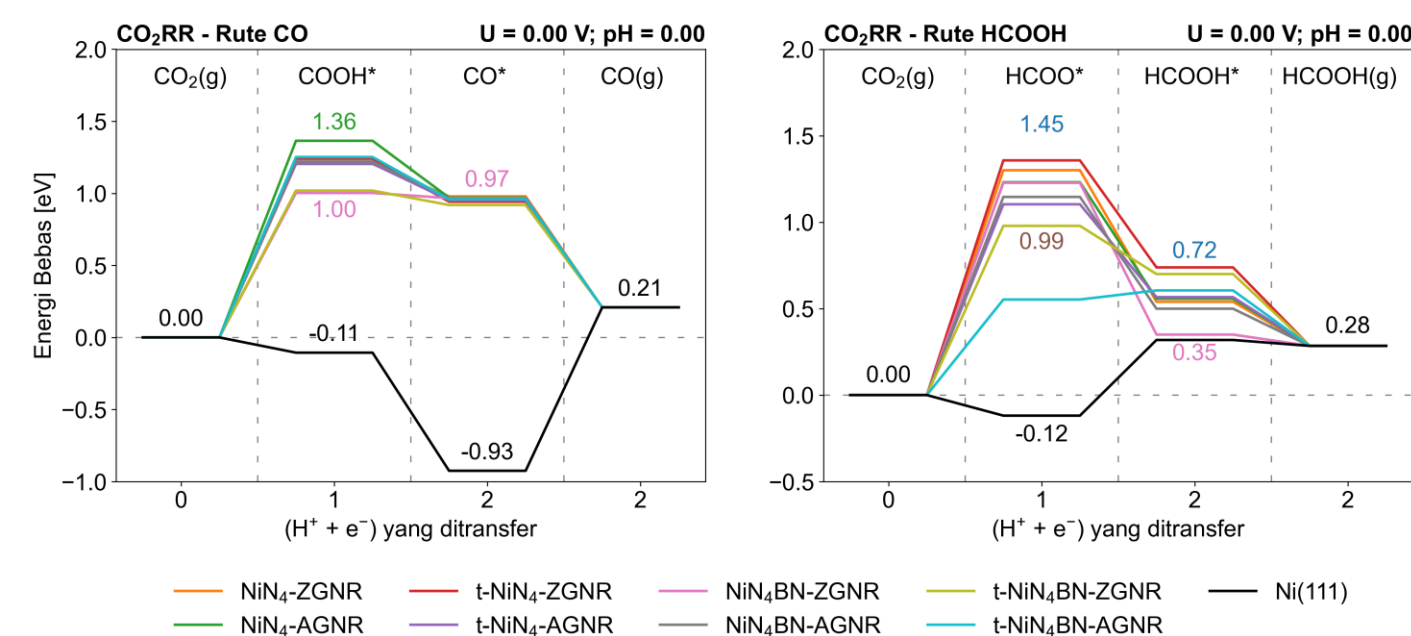
Pengimbuhan Dopan BN ke SAC Ni^[7-9]



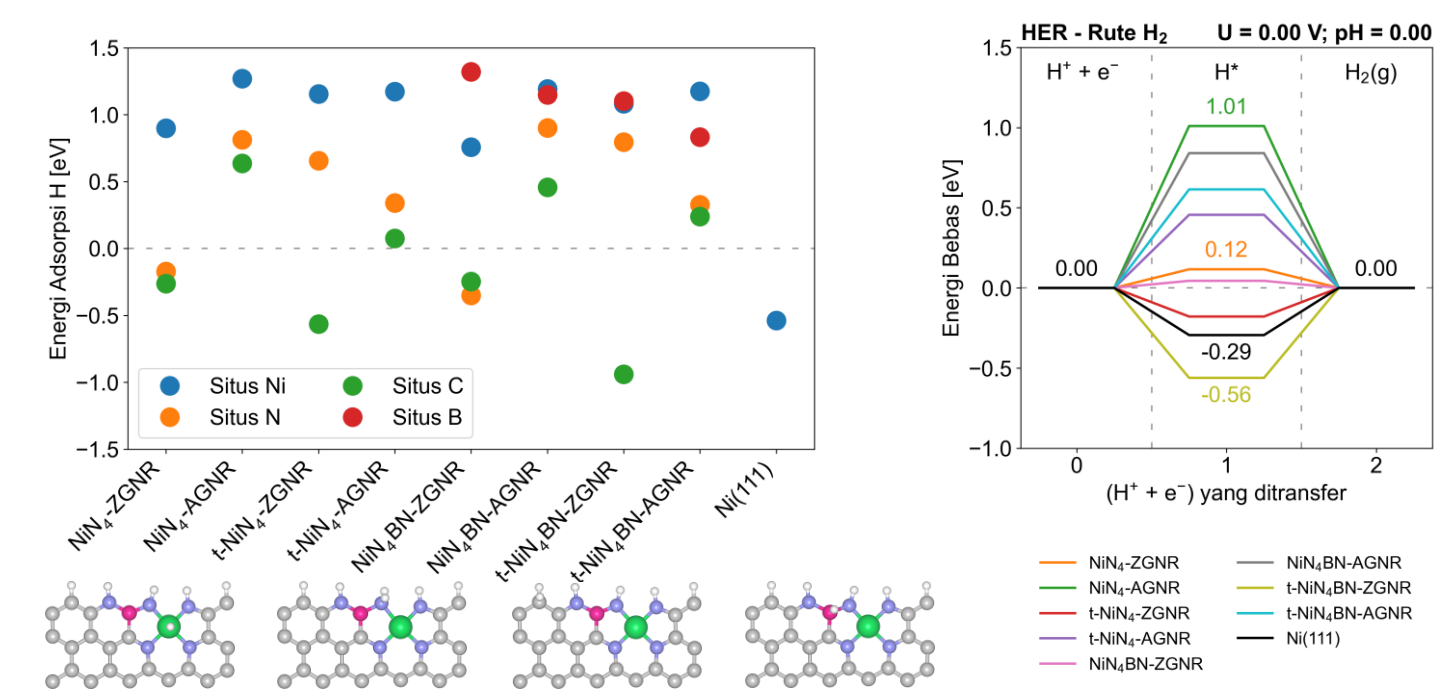
Jenis dan Posisi Situs Aktif



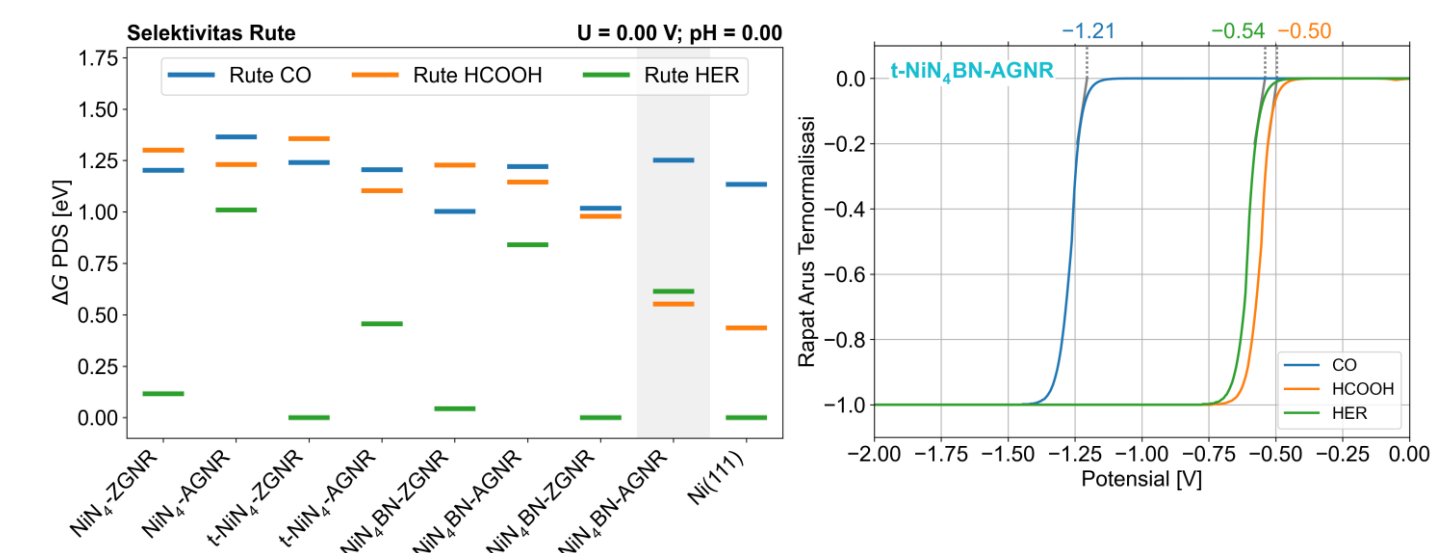
Energetika dan Mekanisme CO₂RR



Energetika dan Mekanisme dan HER



Selektivitas dan Aktivitas Reaksi



Simpulan

- Konfigurasi paling stabil: Motif NiN₄@DV pada bagian tepi grafena.
- Substitusi dopan BN dapat menurunkan energi total sistem.
- PDS: CO₂ → COOH*/HCOO*. Linear scaling relation COOH*-CO* dapat dipatahkan. Kehadiran BN dapat menurunkan ΔG PDS dan η .
- Adsorpsi H* cenderung terjadi di atas situs C.
- Situs t-NiN₄BN-AGNR selektif terhadap CO₂RR (HCOOH). Keberadaan BN dapat menggeser selektivitas menuju HCOOH.
- Potensial onset rute HCOOH pada t-NiN₄BN-AGNR jatuh paling awal.