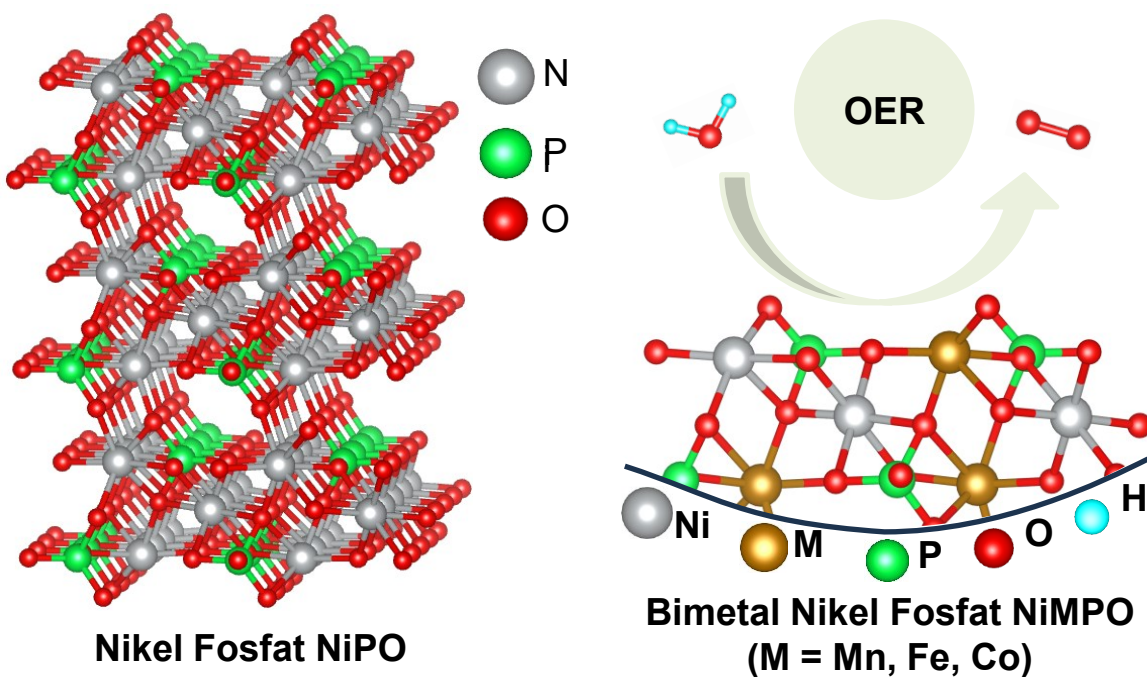


Latar Belakang

- Reaksi evolusi oksigen (*Oxygen Evolution Reaction*, OER) merupakan proses yang menjadi hambatan utama dalam produksi hidrogen dengan elektrolisis air [1].
- Alternatif katalis OER (anode) yang bekerja pada medium basa sudah banyak dikembangkan, salah satunya logam transisi fosfat.
- Dari hasil eksperimen Septiani, dkk. [1], katalis nikel-kobalt fosfat (NiCoPO) memiliki performa yang lebih baik dari katalis nikel fosfat (NiPO).
- Sayangnya, investigasi mekanisme OER pada katalis tersebut belum dilakukan lebih lanjut guna menjelaskan tren performa yang diperoleh.

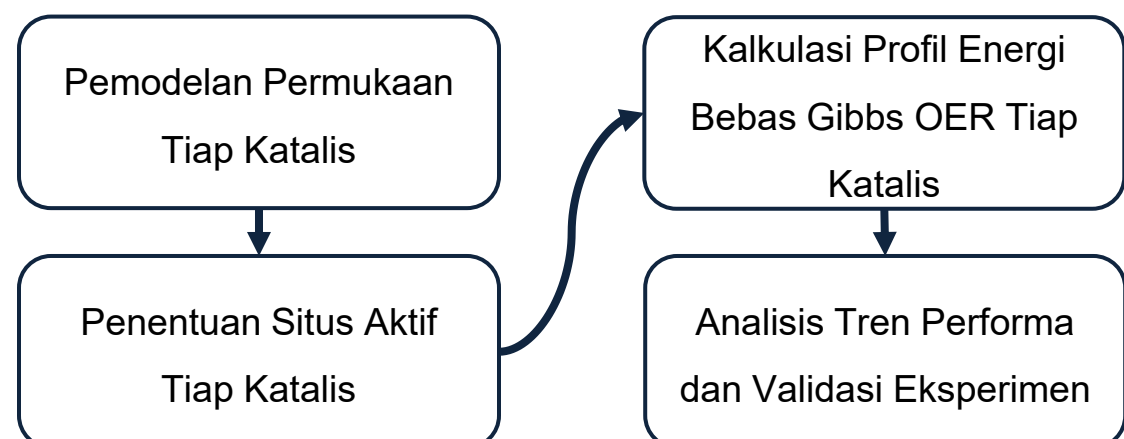


Penelitian ini berfokus pada investigasi mekanisme OER pada katalis NiPO dan NiMPO (M = Mn, Fe, Co) dengan metode *Computational Hydrogen Electrode* (CHE) yang memanfaatkan *Density Functional Theory* (DFT) dan hasilnya divalidasi dengan hasil eksperimen.

Tujuan Penelitian

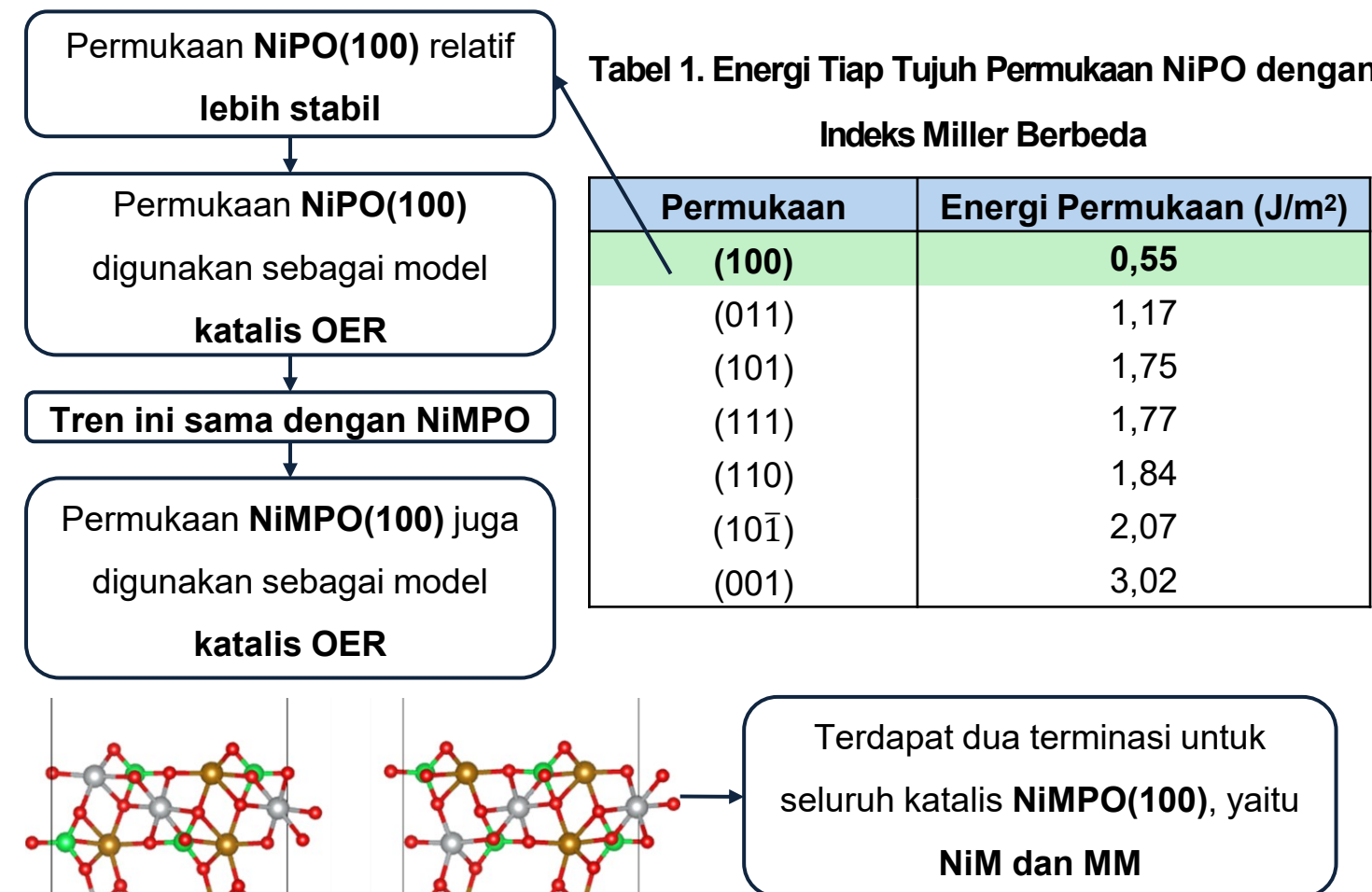
- Memodelkan dan menentukan struktur permukaan NiPO dan NiMPO yang ditinjau sebagai katalis OER.
- Menentukan mekanisme OER pada katalis NiPO dan NiMPO.
- Menentukan aktivitas termodinamika OER seluruh katalis NiPO dan NiMPO, serta memvalidasi hasil prediksi aktivitasnya dengan eksperimen.

Metodologi Penelitian

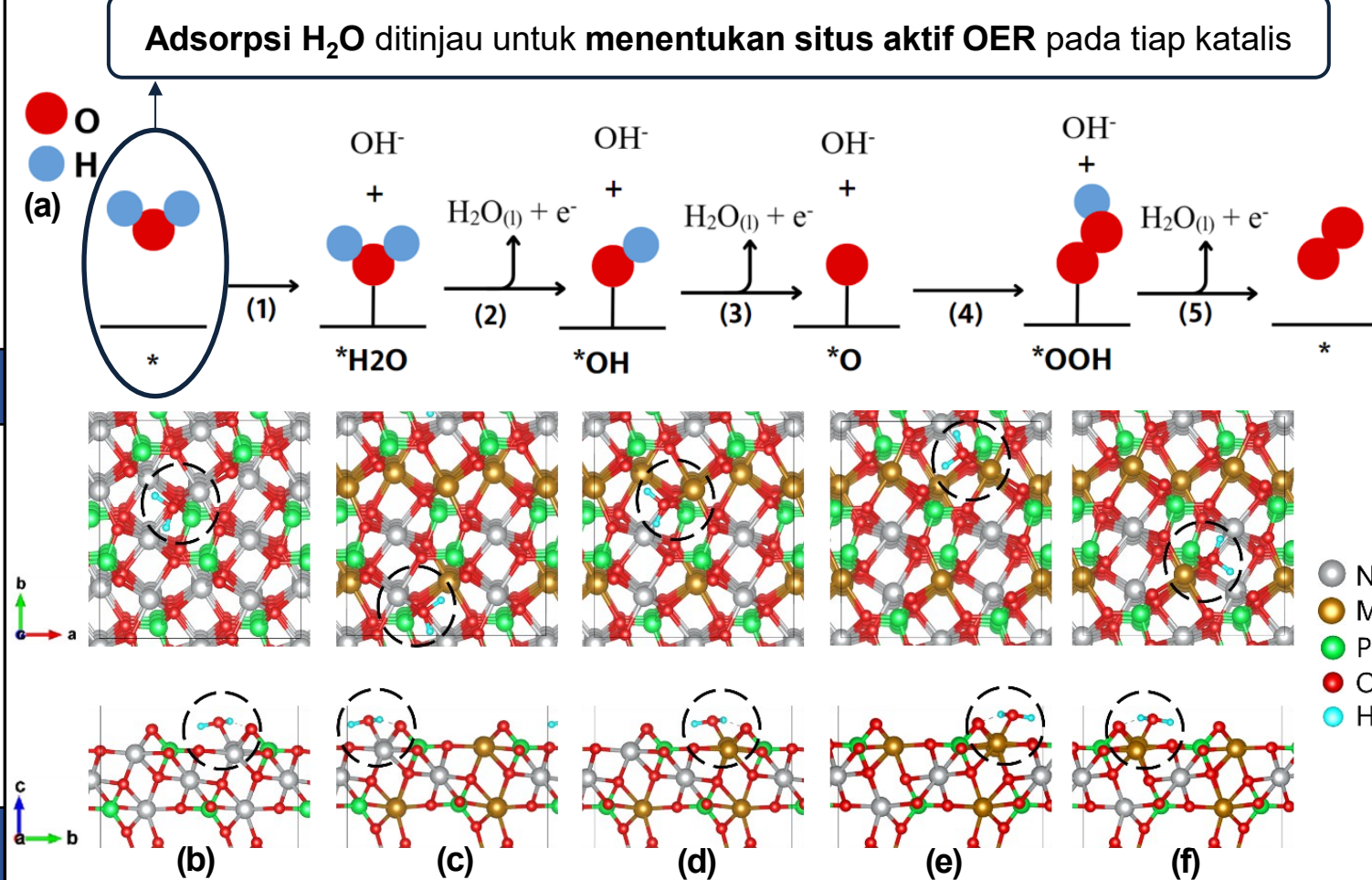


Pemodelan Permukaan dan Mekanisme OER pada Katalis NiPO dan NiMPO

Hasil eksperimen belum menunjukkan permukaan dengan indeks Miller apa yang berperan dominan sebagai permukaan aktif katalis selama proses OER berlangsung.



Gambar 1. Permukaan NiMPO(100) (a) Terminasi NiM dan (b) Terminasi MM



Gambar 2. (a) Ilustrasi reaksi elementer OER. Adsorpsi H₂O pada (b) NiPO(100) situs Ni, (c) NiMPO(100) situs Ni@NiM, (d) NiMPO(100) situs M@NiM, (e) NiMPO(100) situs M1@MM, dan (f) NiMPO(100) situs M2@MM

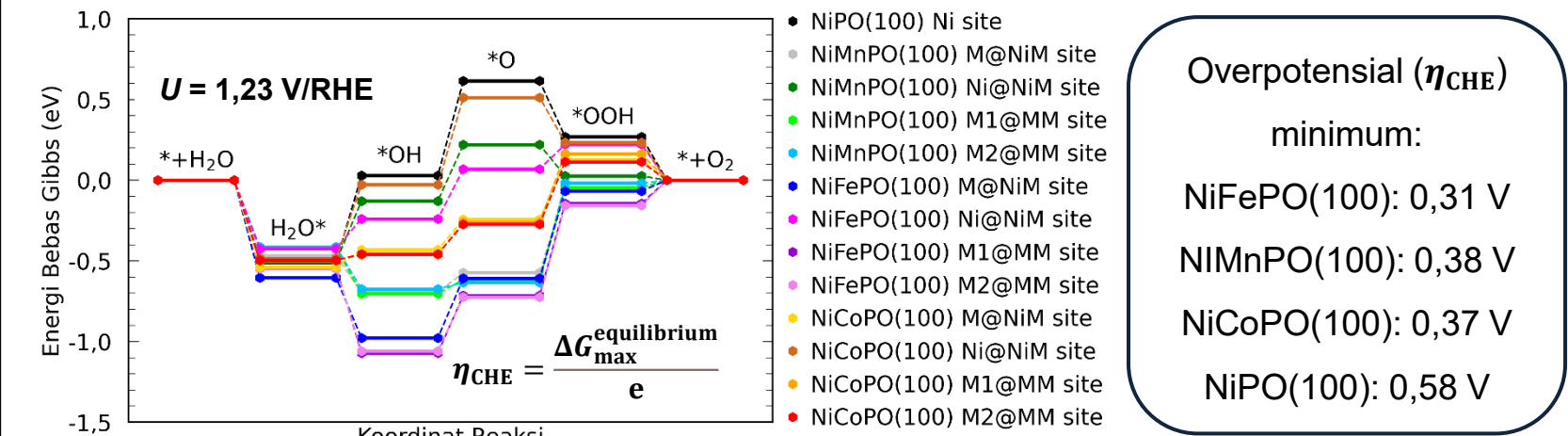
Dari investigasi adsorpsi H₂O, mekanisme OER pada tiap katalis yaitu:

- Untuk NiPO(100), OER berjalan hanya pada **situs Ni**.
- Untuk NiMPO(100), OER berjalan pada **situs Ni dan M (M, M1, dan M2)**.

Referensi

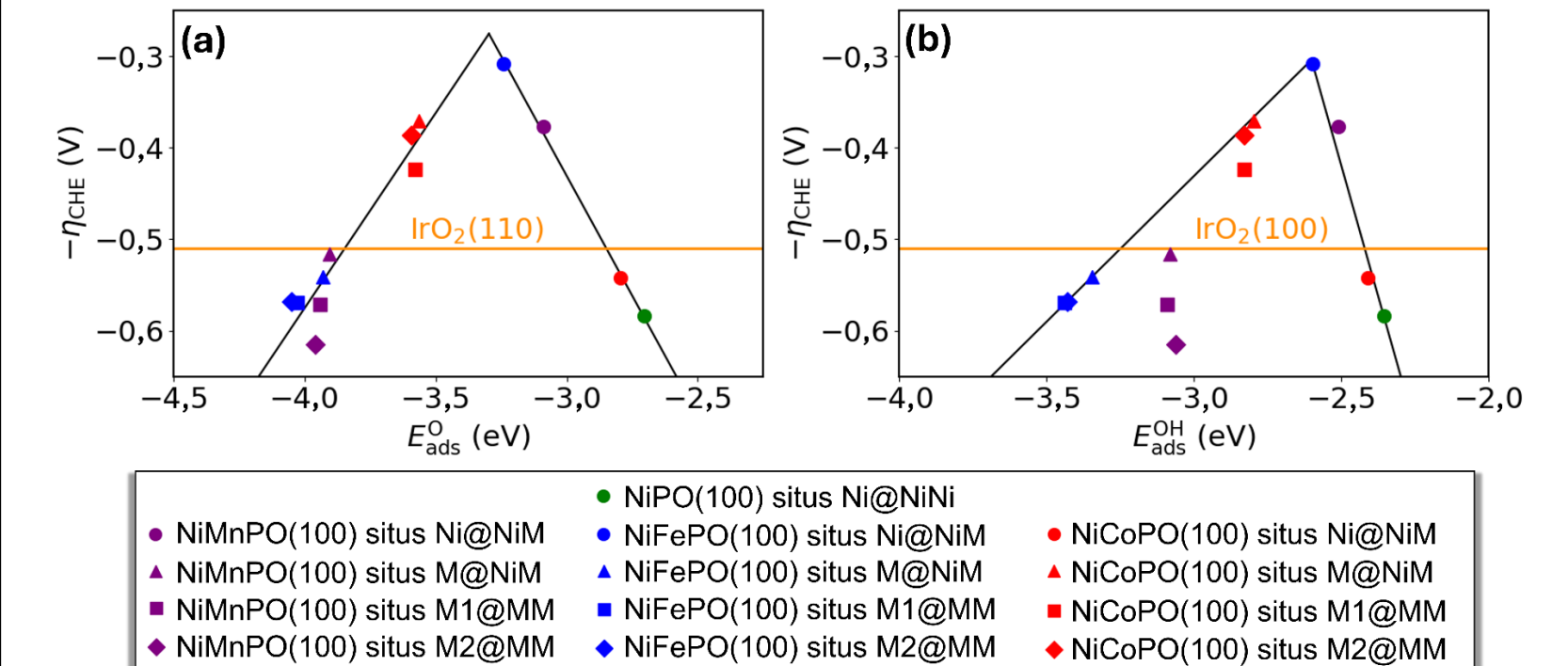
- [1] Septiani dkk., *Chemistry of Materials*, 32(16), 7005–7018 (2020).
[2] Nuruzzahran dkk., *Fuel*, 385, 134183 (2025).

Hasil dan Analisis Performa OER pada Katalis NiPO dan NiMPO



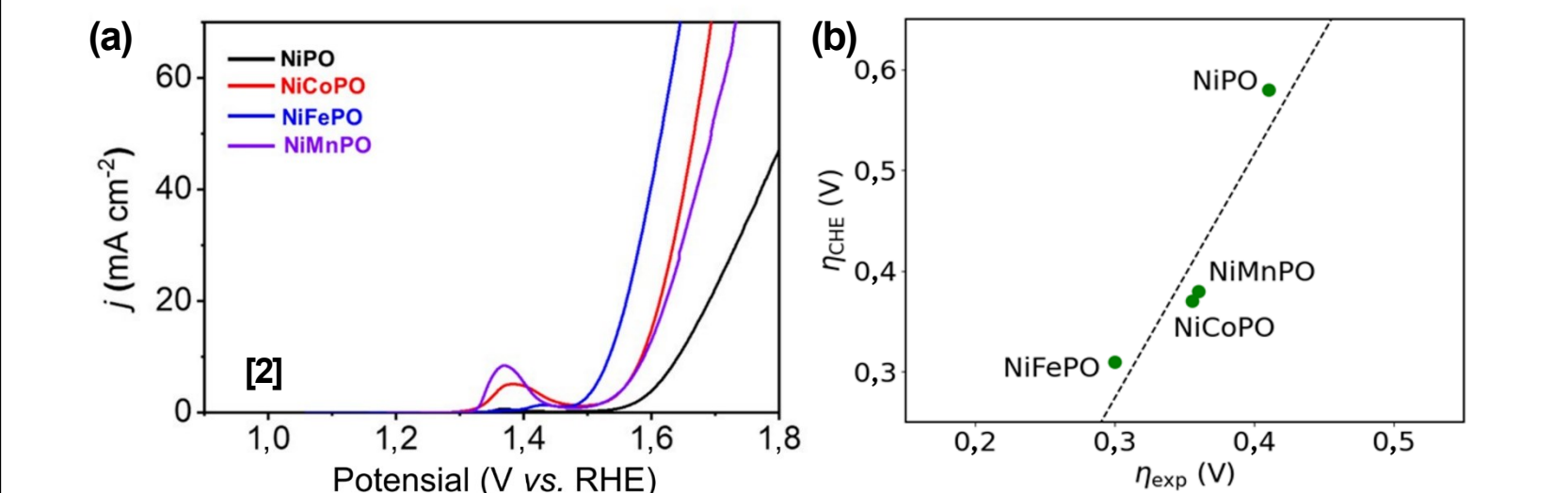
Gambar 3. Profil energi bebas Gibbs OER untuk seluruh katalis NiPO(100) dan NiMPO(100)

Dari hasil kalkulasi profil energi bebas Gibbs **NiFePO(100)** memiliki performa terbaik (overpotensial terendah), disusul dengan NiCoPO(100), NiMnPO(100), dan NiPO(100).



Gambar 4. Kurva volcano dari overpotensial hasil kalkulasi CHE terhadap (a) energi adsorpsi O dan (b) energi adsorpsi OH

Adsorpsi O dan OH menjadi deskriptor untuk sistem NiPO(100) dan NiMPO(100). Katalis dengan **adsorpsi O dan OH yang moderat** menghasilkan performa terbaik.



Gambar 5. (a) Kurva *Linear Sweep Voltammetry* (LSV) dan (b) perbandingan overpotensial DFT dengan eksperimen

Tren performa katalis sudah **sesuai dengan hasil eksperimen**

Kesimpulan

- Permukaan NiPO dan NiMPO yang paling stabil adalah permukaan **(100)**.
- Untuk **NiPO**, OER berjalan pada **situs Ni**, sedangkan pada **NiMPO**, OER berjalan pada **situs Ni, M, M1, dan M2**. Overpotensial pada sistem ini **bergantung pada adsorpsi O dan OH**.
- Tren overpotensial hasil prediksi DFT **sejalan dengan validasi eksperimen**. **NiFePO** memiliki **performa OER terbaik**, disusul dengan NiCoPO, NiMnPO, dan NiPO.