

STUDI AKTIVITAS KATALIS BIMETAL NIKEL FOSFAT DENGAN DOPING LOGAM TRANSISI UNTUK REAKSI EVOLUSI OKSIGEN MENGGUNAKAN TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN

Dzaki Ahmad Syaifullah
(23324007)

Pembimbing:

1. Ir. Adhitya Gandaryus Saputro, Ph.D.
2. Dr. Ni Luh Wulan Septiani

Kolaborator:
Dr. Sasfan Arman Wella, M.Si., M.Sc.
(BRIN)



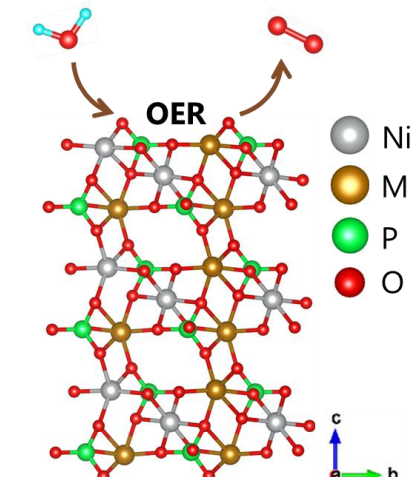
LATAR BELAKANG

Reaksi evolusi oksigen (OER) menjadi proses kunci dalam upaya produksi hidrogen bersih, namun masih terhalang overpotensial yang tinggi. Pengembangan elektrokatalis untuk menurunkan nilai overpotensial OER masih terus dilakukan. Bimetal nikel fosfat NiMPO(100) (M = Mn, Fe, Co) telah dimodelkan secara komputasi (disertai validasi eksperimen) sebagai katalis OER pada medium basa [1]. Akan tetapi, efek penambahan doping logam transisi terhadap performa OER-nya belum dipelajari lebih lanjut.

Tabel 1. Performa OER pada bimetal nikel fosfat murni [1].

Katalis	$\eta_{\text{komputasi}}(V)$	$\eta_{\text{eksperimen}}(V)$
NiPO	0,58	0,41
NiMnPO	0,38	0,36
NiFePO	0,31	0,30
NiCoPO	0,37	0,36

Bagaimana **efek penambahan doping** terhadap performa OER?



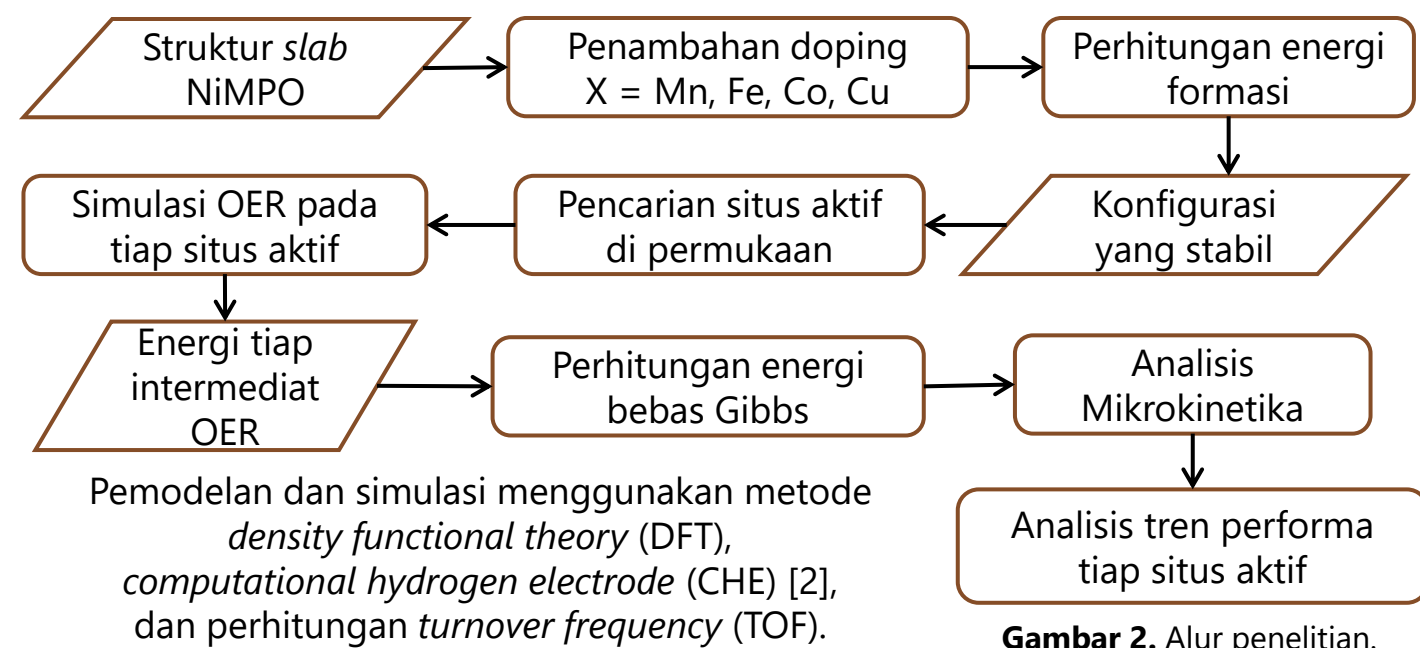
Gambar 1. Model katalis NiMPO.

TUJUAN

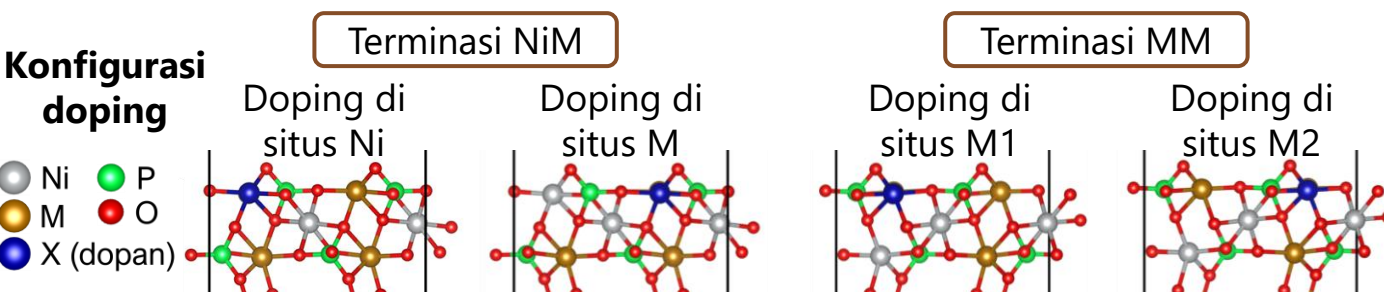
Penelitian ini bertujuan mempelajari aktivitas katalis bimetal nikel fosfat dengan doping logam transisi (**NiMPO-X**; **M** = **Mn, Fe, Co**; dopan **X** = **Mn, Fe, Co, Cu**) untuk OER. Tujuan ini diperinci menjadi:

1. Membangun **model permukaan** katalis NiMPO-X.
2. Menentukan **situs aktif** yang berperan dalam proses OER.
3. Menentukan **efek doping** logam transisi terhadap performa katalis.
4. Menentukan **tren performa OER** pada NiMPO-X jika dibandingkan dengan struktur tanpa doping dan iridium dioksida.

METODOLOGI

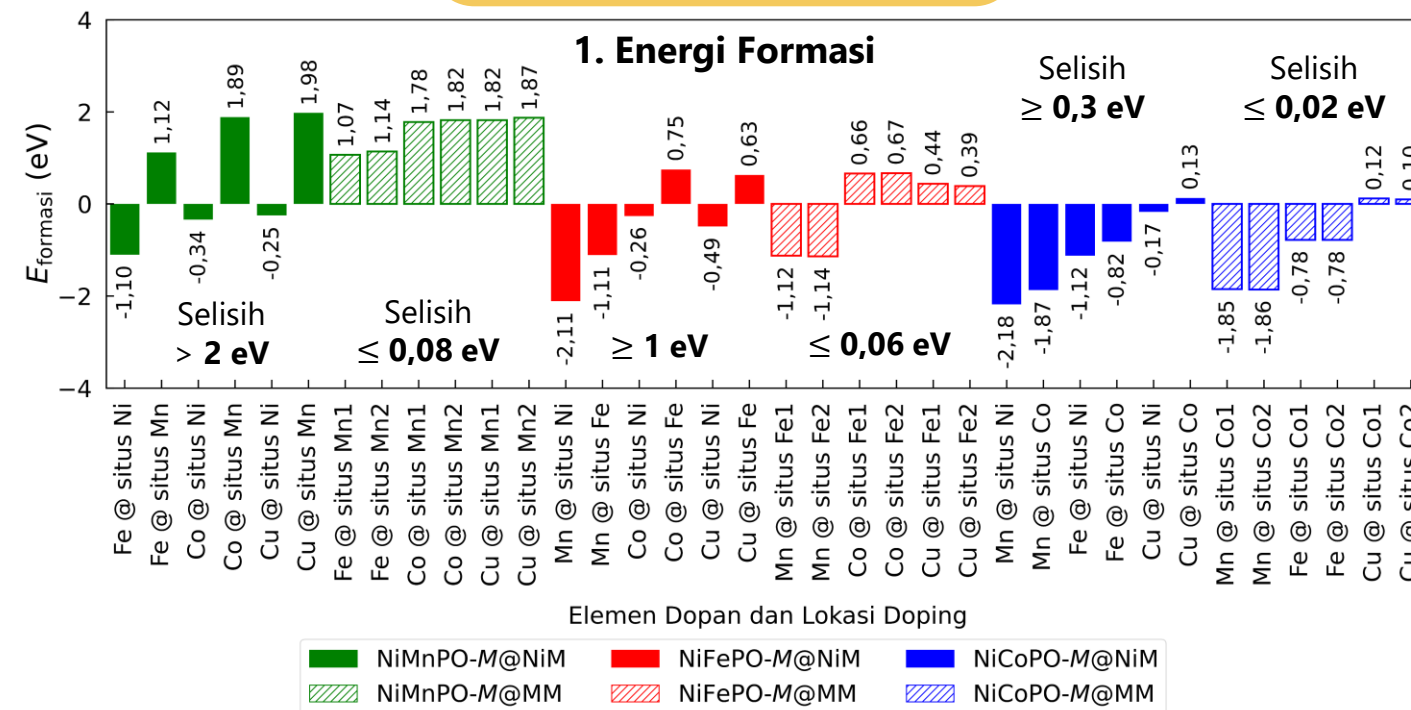


Gambar 2. Alur penelitian.



Gambar 3. Lokasi doping yang ditinjau pada penelitian ini.

HASIL DAN ANALISIS

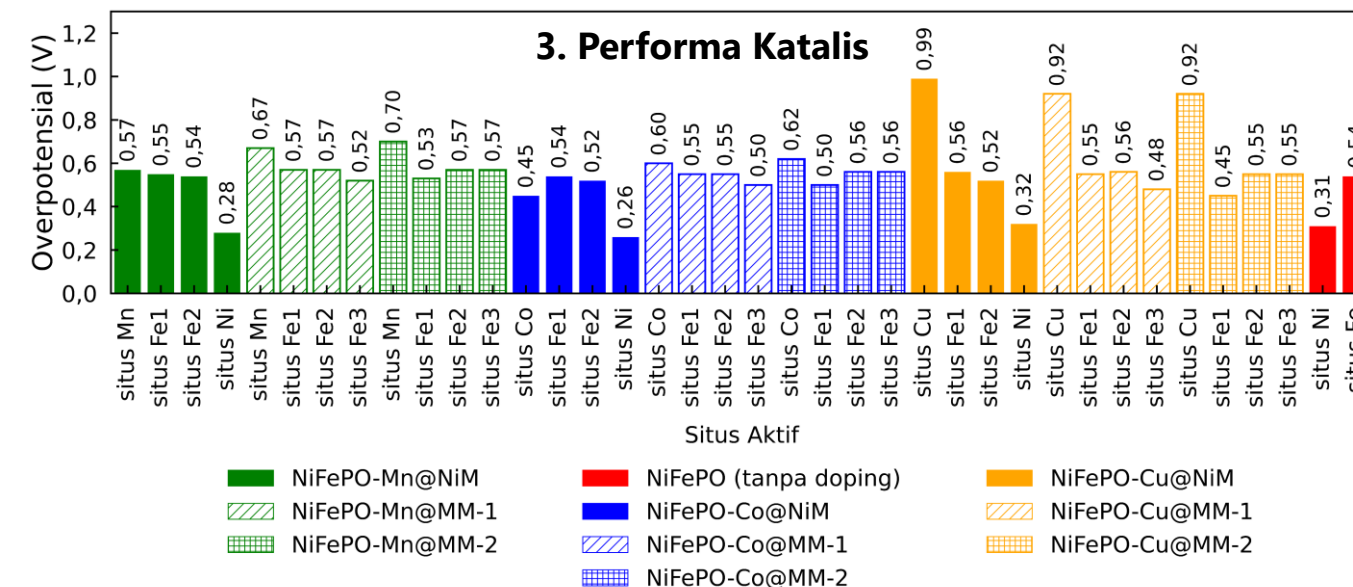


Gambar 4. Energi formasi untuk setiap konfigurasi struktur *slab* terdoping.

Untuk terminasi NiM, doping di situs Ni lebih stabil dibanding doping di situs M dengan beda E_{formasi} yang signifikan. Untuk terminasi MM, doping pada situs M1 dan M2 memberikan E_{formasi} yang mirip.

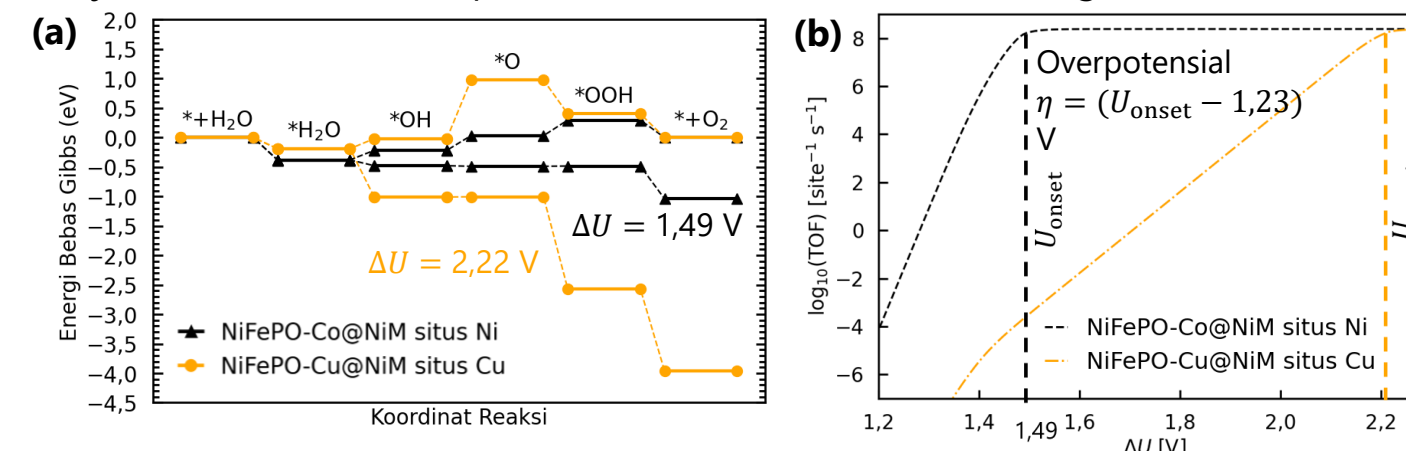
2. Situs Aktif dan Adsorpsi H₂O

Energi adsorpsi H₂O di empat situs logam pada NiMPO-X@NiM, NiMPO-X@MM-1, dan NiMPO-X@MM-2 didapati bernilai negatif. Hal ini menandakan bahwa keempat situs logam berpotensi menjadi situs aktif yang menginisiasi proses OER di permukaan katalis.



Gambar 5. Overpotensial OER untuk setiap situs aktif pada NiFePO-X.

Doping Co dan Mn pada NiFePO secara berturut-turut menurunkan nilai overpotensial menjadi 0,26 V dan 0,28 V (pada situs Ni), lebih rendah dibanding NiFePO murni (0,31 V).

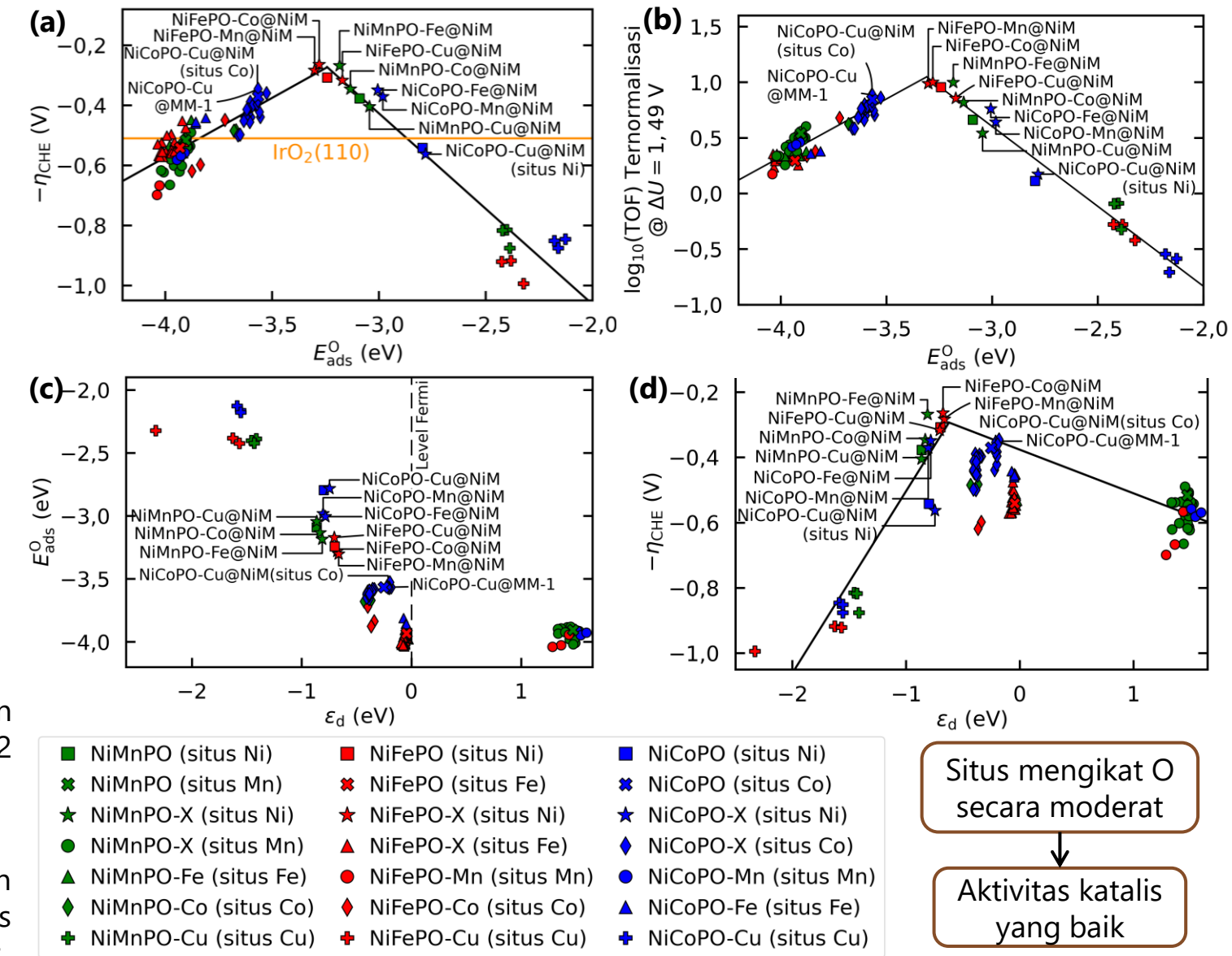


Gambar 6. (a) Profil energi bebas dan (b) TOF sebagai fungsi dari beda potensial ($\Delta U = U_{\text{OER}} - U_{\text{HER}}^0$).

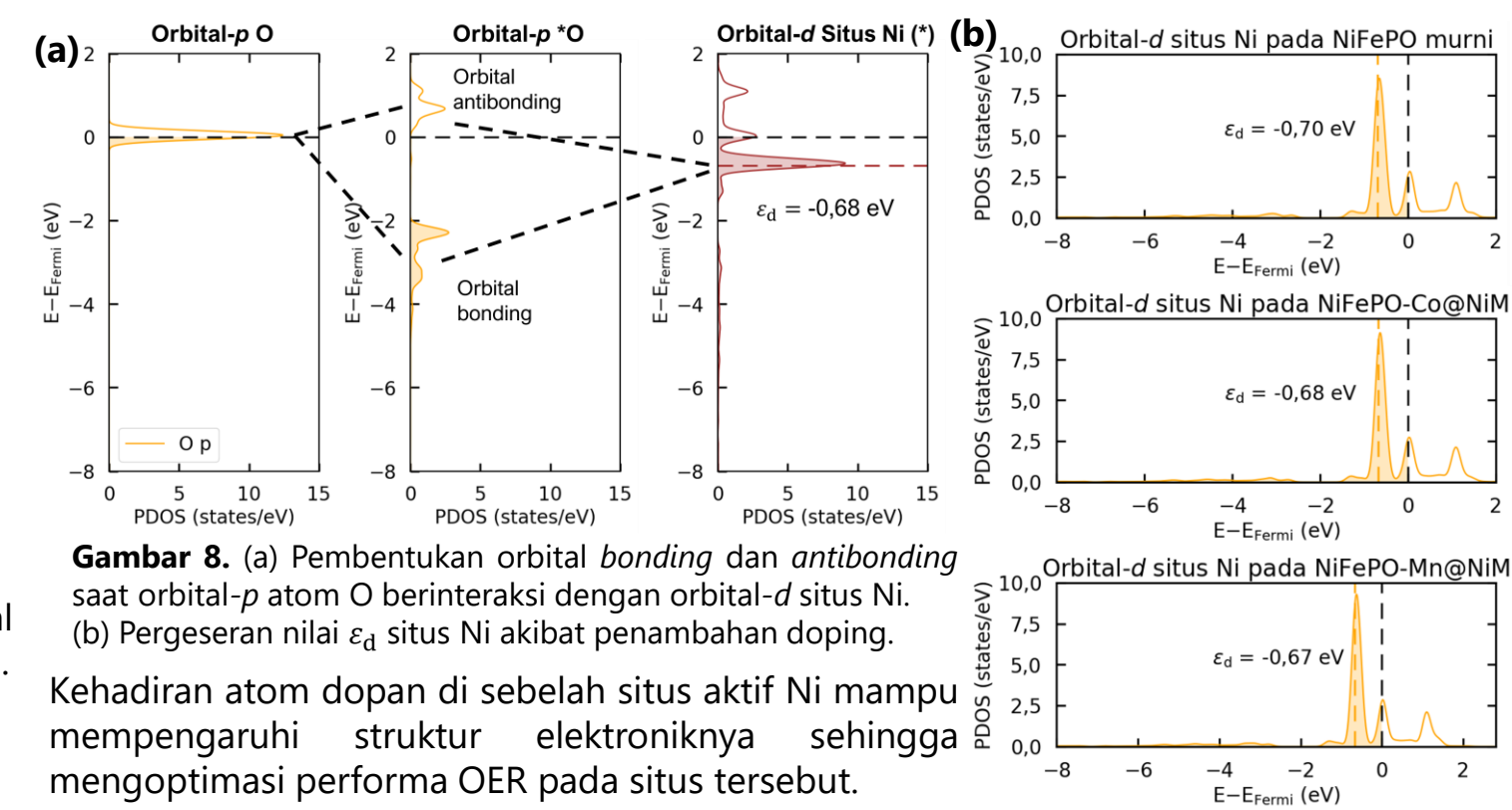
Pendekatan mikrokinetika telah konsisten dengan model CHE.

REFERENSI

- [1] M. A. Nuruzzahran dkk., *Fuel*, vol. 385, 134183, 2025.
[2] J. Norskov dkk., *J Phys Chem B*, vol. 108, no. 46, pp. 17886–17892, 2004.



Gambar 7. (a) Tren overpotensial (η_{CHE}) dan (b) $\log(\text{TOF})$ terhadap energi adsorpsi $^*\text{O}$. Relasi antara (c) energi adsorpsi $^*\text{O}$ dan (d) overpotensial terhadap *average atomic state* dari orbital- d (ε_d).



Gambar 8. (a) Pembentukan orbital *bonding* dan *antibonding* saat orbital-*p* atom O berinteraksi dengan orbital-*d* situs Ni. (b) Pergeseran nilai ϵ_d situs Ni akibat penambahan doping.

Kehadiran atom dopan di sebelah situs aktif Ni mampu mempengaruhi struktur elektroniknya sehingga mengoptimasi performa OER pada situs tersebut.

KESIMPULAN

1. Pada terminasi NiM, **doping di situs Ni** memberikan E_{formasi} lebih rendah dibanding di situs M dengan perbedaan cukup signifikan. Pada terminasi MM, dua konfigurasi doping menghasilkan E_{formasi} yang mirip.
2. Terdapat **empat situs aktif logam transisi** pada masing-masing permukaan NiMPO-X@NiM, NiMPO-X@MM-1, dan NiMPO-X@MM-2.
3. Doping Mn, Fe, dan Co (kecuali Cu) **memodifikasi struktur elektronik** situs aktif dan mengoptimalkan ikatan dengan *O sehingga diperoleh overpotensial rendah.
4. Katalis **NiFePO-Co@NiM (situs Ni)** memberikan performa paling baik ($\eta = 0,26 \text{ V}$), lebih rendah dibanding NiFePO murni ($\eta = 0,31 \text{ V}$) dan IrO₂ ($\eta = 0,51 \text{ V}$).