Pengaruh Modifikasi Si terhadap Tegangan Interkalasi dan Difusi Ion Na+ pada Katoda $Na_3V_2(PO_4)_3$

Riset Unggulan ITB 2026

Hasna Afifah[1], Qory C. Scientika[1], Sasfan A. Wella[2], Fadjar Fathurrahman[1], Aditya W. Sakti[3], Lee Tian Khoon[4], Kenta Hongo[5], Ryo Maezono[5], Mohammad K. Agusta[1], Imran Khan[6], Ganes Shukri[1]*

[1]Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Bandung;
[2]Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN); [3]Waseda University, Jepang; [4]Universiti Kebangsaan Malaysia; [5]JAIST, Jepang; [6]Islamic University of Madinah

Ringkasan

Katoda $Na_3V_2(PO_4)_3$ (NVP) memiliki struktur NaSICON yang stabil, tetapi peningkatan karakteristik tegangan dan mobilitas ion Na+ tetap diperlukan. Riset ini membandingkan NVP pristine dengan $Na_{3.1}V_2(PO_4)_{2.9}(SiO_4)_{0.1}$ menggunakan perhitungan first-principles. Modifikasi Si memperlebar rentang tegangan interkalasi dan menurunkan energi aktivasi lintasan concerted ion hopping dari 0,46 eV menjadi 0,18 eV. Hasil ini menempatkan modifikasi Si sebagai acuan untuk evaluasi dopan anion berikutnya.

Kata kunci: baterai ion natrium, NVP, modifikasi Si, tegangan interkalasi, difusi Na+

Latar Belakang dan Tujuan

• NVP menawarkan kerangka tiga dimensi yang mendukung transport ion Na+ dan stabilitas siklus.

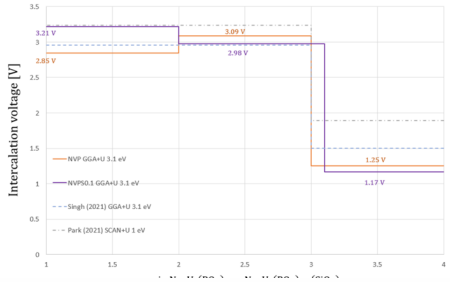
• Modifikasi pada situs fosfat dapat mengubah lingkungan lokal, struktur elektronik, dan respons elektrokimia.

• Tahap riset ini memprioritaskan Si agar perbandingan dengan material pristine dapat dilakukan secara mendalam dan konsisten.

• Tujuan utama: mengukur perubahan tegangan interkalasi dan hambatan difusi ion Na+ akibat modifikasi Si.

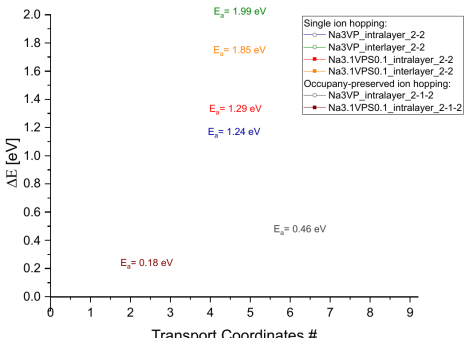
Metode

• Optimasi struktur dan energi total berbasis DFT.
• Perbandingan NVP pristine dan sistem termodifikasi Si.
• Tegangan interkalasi dari perubahan energi total pada variasi kandungan Na.
• Lintasan difusi dan energi aktivasi dihitung dengan CI-NEB.

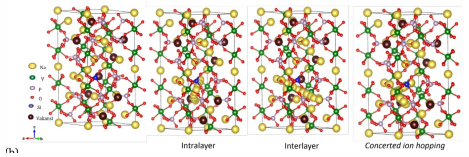


Gambar 1. Profil tegangan interkalasi terhadap kandungan Na

Rentang tegangan meningkat dari 1,60 V pada NVP pristine menjadi 2,04 V setelah modifikasi Si.



Gambar 2. Energi aktivasi beberapa lintasan difusi Na+



Gambar 3. Lintasan difusi Na+ pada struktur NVP

PEMBACAAN HASIL
Lintasan concerted ion hopping memberikan hambatan terendah. Modifikasi Si memperbesar ruang lokal di sekitar jalur migrasi dan menurunkan interaksi Coulomb yang dialami ion Na+.

Hasil Utama

Perbandingan langsung menunjukkan bahwa Si mengubah profil interkalasi sekaligus jalur migrasi ion Na+.

Rentang pristine: 1,60 V
Rentang +Si: 2,04 V

Rentang tegangan interkalasi melebar 0,44 V pada profil GGA+U yang ditampilkan.

Ea pristine: 0,46 eV
Ea +Si: 0,18 eV

Hambatan concerted ion hopping turun 0,28 eV, setara sekitar 61%.

• Stabilitas: energi pencampuran tetap negatif dan konfigurasi termodifikasi Si stabil secara termodinamika.

• Mekanisme redoks: keadaan V mendominasi daerah sekitar tingkat Fermi pada kedua sistem.

Kesimpulan dan Tindak Lanjut

KESIMPULAN
Modifikasi Si memperlebar rentang tegangan interkalasi NVP dan mempercepat transport Na+ melalui penurunan energi aktivasi lintasan concerted ion hopping.

MAKNA ILMIAH
Perubahan lingkungan lokal akibat Si memengaruhi karakter elektronik dan hambatan migrasi ion. Hasil komparatif dengan sistem pristine menyediakan acuan yang terukur untuk penyaringan dopan.

TAHAP BERIKUTNYA
Metodologi yang telah tervalidasi pada sistem Si akan diterapkan secara bertahap pada dopan pembanding. Kajian lanjutan mencakup energi formasi, konduktivitas elektronik, dan perumusan kriteria desain lintas dopan.