

Sintesis *Graphene Oxide* (GO) dari Grafit Limbah Baterai dengan Modifikasi Metode Hummer

Atika Putri Karina¹, Chandra Wahyu Purnomo², Teguh Ariyanto³

^{1,2,3} Departemen Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, Indonesia

ARTICLE INFO

Article history:

DOI:

10.30595/pspfs.v9i1.2164

Submitted:

December 11, 2025

Accepted:

January 20, 2026

Published:

February 12, 2026

Keywords:

Graphene Oxide, Spent LIBs, Modified Hummer method, Raman spectroscopy, Carbon-based materials

ABSTRACT

Graphene oxide (GO) is a carbon-based material with great potential for gas adsorption applications due its large surface area and abundant oxygen-containing functional groups. This study aims to synthesize GO from spent lithium-ion battery graphite through an environmentally friendly modification of the Hummer method. The modification involved varying the intercalation media using hydrogen peroxide (H₂O₂), sulfuric acid (H₂SO₄) and their combination to evaluate their effect on the oxidation of potassium permanganate (KMnO₄), heating, and post-reduction with H₂O₂. The structural evolution of graphite and the obtained GO was analyzed using Raman spectroscopy, where the I_D/I_G ratio was used an indicator of defect density. Result revealed that was battery graphite exhibited a higher degree of structural disorder than commercial graphite, with an increase I_D/I_G ratio from 0.12 to 0.32. After oxidation the I_D/I_G ratio increased to 0.33 for GO synthesized with mixed media (H₂SO₄ + H₂O₂) (GO-mix), 0.94 for GO synthesized with H₂SO₄ (GO-HM), and 1.36 for GO synthesized with H₂O₂ only (GO-PT H₂O₂). The highest ratio observed in GO-PT H₂O₂ indicates the most effective oxidation and the formation of abundant oxygen functional groups without KMnO₄ degradation. Therefore, using H₂O₂ as a single intercalation agent offers a simple, efficient, and sustainable approach for producing high-quality graphene oxide from waste battery graphite.

This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).



Corresponding Author:

Atika Putri Karina,
Departemen Teknik Kimia,
Fakultas Teknik, Universitas Gadjah Mada
Jalan Grafika No. 2, Yogyakarta, Indonesia.
Email: atikaputrikarina@mail.ugm.ac.id

1. PENDAHULUAN

Permasalahan peningkatan emisi karbon dioksida (CO₂) akibat aktivitas industri dan penggunaan energi fosil menjadi isu global yang mendesak. *Graphene oxide* (GO) sebagai salah satu material berbasis karbon memiliki potensi besar dalam teknologi adsorpsi CO₂ dengan luas permukaan besar dan gugus fungsional oksigen yang melimpah, seperti hidroksil (-OH), epoksi (C-O-C), karbonil (C=O) dan karboksil (-COOH) yang menunjukkan afinitas tinggi terhadap CO₂ melalui interaksi fisik dan kimia [1], [2].

Dalam perkembangan sintesis GO, beberapa metode telah dikembangkan dengan mengelola grafit dalam lingkungan asam pekat dan oksidator kuat. Pada tahun 1859, Profesor Brodie pertama kali memperkenalkan sintesis GO dengan mencampurkan grafit, asam nitrat (HNO₃) berasap dan kalium klorat (KClO₃) sebagai oksidator, yang direaksikan pada suhu 60°C selama 3-4 hari. Campuran tersebut dicuci dan dioksidasi ulang pada kondisi yang sama hingga empat kali pengulangan. GO diperoleh dengan rasio C : H : O sebesar 61,04 : 1,85 : 37,11. Pada tahun 1989, Staudenmaier menyempurnakan metode Brodie dengan menambahkan kalium klorat asap (KClO₃) dalam jumlah kecil dan menggunakan asam sulfat pekat (H₂SO₄). Material GO yang diperoleh dengan rasio C/O mirip metode Brodie yaitu sebesar 2:1 tanpa memerlukan empat kali pengulangan oksidasi [3]. Beberapa dekade selanjutnya pada tahun 1937, Hofmann melakukan kebaruan dengan mengganti asam nitrat (HNO₃) berasap dengan asam nitrat tidak berasap.

Pada tahun 1958 Hummer menyajikan pendekatan baru yang lebih aman dengan memanfaatkan kalium permanganat (KMnO_4) sebagai oksidator dalam campuran grafit, asam sulfat (H_2SO_4) pekat dan natrium nitrat (NaNO_3). Metode ini dianggap lebih aman karena tidak menghasilkan asam-asam nitrat in situ serta dapat menghilangkan penggunaan asam nitrat berasap yang sifatnya korosif. GO yang dihasilkan dengan metode Hummer menunjukkan hasil yang lebih kaya oksigen. Sehingga metode Hummer dapat diterima dengan baik serta diadopsi lebih lanjut oleh banyak peneliti [4].

Penelitian dengan tiga metode oksidasi berbeda yaitu metode Hummer, Staudenmaier dan Hofmann untuk membandingkan efisiensi oksidasi melaporkan sintesis menggunakan metode Hummer menghasilkan gugus karboksil optimum sebesar 15% berat yang merupakan jumlah tertinggi dibandingkan dua metode lainnya [5]. Namun, penggunaan natrium nitrat sebagai agen interkalasi masih menimbulkan permasalahan lingkungan, karena pada suhu tinggi dapat menghasilkan gas toksik seperti NO_2 , N_2O_4 dan NH_3 [6]. Untuk mengatasi hal tersebut, sejumlah penelitian terkini mengusulkan modifikasi metode Hummer dengan mengganti NaNO_3 menggunakan agen interkalasi yang lebih ramah lingkungan, seperti hidrogen peroksida (H_2O_2). Penggunaan hidrogen peroksida dalam media asam sulfat dapat menghasilkan *expanded graphite* (EG) dengan derajat oksidasi tinggi tanpa menghasilkan gas beracun [7]. Sementara itu, [8] melaporkan bahwa peningkatan rasio $\text{H}_2\text{SO}_4:\text{H}_2\text{O}_2$ meningkatkan rasio oksidasi grafit sehingga nilai C/O menurun.

Selain optimasi reagen, jenis sumber grafit juga menjadi faktor penting. Penggunaan grafit limbah baterai menawarkan alternatif berkelanjutan yang sejalan dengan konsep *circular economy*. Dalam perkembangannya, baterai ion litium (Li-ion) telah menjadi salah satu sumber grafit potensial untuk sintesis GO. Baterai ini banyak digunakan pada perangkat elektronik portabel dan kendaraan listrik karena memiliki densitas energi tinggi dan kemampuan pengisian ulang yang baik. Seiring meningkatnya permintaan global terhadap perangkat elektronik dan mobil listrik, kebutuhan baterai Li-ion diperkirakan mencapai 400.000 ton pada tahun 2025 [9]. Kondisi ini menimbulkan tantangan lingkungan terkait pengolahan limbah baterai yang mengandung grafit dalam jumlah besar, sehingga pemanfaatannya sebagai bahan baku sekunder menjadi langkah strategis yang dapat diterapkan [10]. Grafit dari limbah baterai memiliki struktur berlapis dan cacat alami akibat siklus litiasi-delitiasi, yang membuatnya lebih reaktif terhadap proses oksidasi [11]. Hal ini membuka peluang untuk menghasilkan *graphene oxide* dengan efisiensi oksidasi yang lebih tinggi.

Berdasarkan pertimbangan tersebut, penelitian ini dilakukan untuk mensintesis *graphene oxide* dari grafit limbah baterai melalui modifikasi metode Hummer menggunakan H_2O_2 sebagai agen interkalasi dan oksidator tambahan. Penelitian difokuskan pada analisis perubahan struktur grafit sebelum dan sesudah proses oksidasi menggunakan spektroskopi Raman sebagai indikator derajat cacat dan oksidasi. Hasil karakterisasi diharapkan dapat menunjukkan bahwa penggunaan H_2O_2 pada metode Hummer tidak hanya meningkatkan efisiensi oksidasi tetapi juga menjadi pendekatan yang lebih ramah lingkungan dan berkelanjutan dalam pemanfaatan limbah baterai untuk sintesis *graphene oxide*.

2. METODE PENELITIAN

2.1. Material

Baterai bekas *Nickel Manganese Cobalt* (NMC) dari PT VIAR Motor Indonesia. Bahan kimia yang digunakan pada penelitian ini baik untuk media interkalasi maupun sintesis GO meliputi hidrogen peroksida (H_2O_2), asam sulfat (H_2SO_4), kalium permanganat (KMnO_4) dan hidrogen klorida (HCl) diperoleh dari Merck Chemicals.

2.2. Metode

2.2.1. Praperlakuan Baterai Litium-ion Bekas

Pada penelitian ini limbah baterai melewati proses pemisahan fisik secara manual, pemisahan basah dan dilanjutkan dengan *acid leaching* menggunakan asam sulfat (H_2SO_4) 1,5 M dan hidrogen klorida (HCl) 32% dengan rasio 80% *Solid/Liquid* pada suhu 60°C selama 1 jam. Selanjutnya, serbuk grafit disaring dan dinetralisasi dengan air deionisasi serta dilakukan pengeringan dengan oven pada suhu 60°C sampai berat konstan.

2.2.2. Sintesis *Graphene Oxide* (GO) dengan Modifikasi Metode Hummer

Penelitian ini dilakukan untuk mensintesis GO dari grafit limbah baterai melalui metode Hummer, dengan memodifikasi tahap interkalasi dengan menambahkan variasi media reaksi untuk mempelajari pengaruhnya terhadap derajat oksidasi grafit. Sebagai bahan baku utama digunakan grafit hasil pemisahan anoda dari baterai litium-ion bekas, sedangkan grafit komersial digunakan sebagai pembanding.

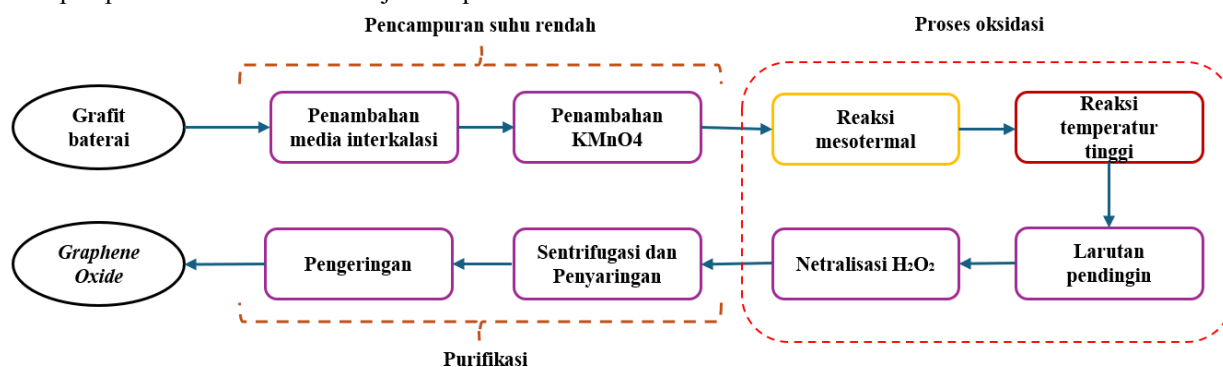
Tahap penelitian diawali dengan perlakuan interkalasi grafit menggunakan tiga variasi media, yaitu H_2SO_4 saja seperti metode Hummer (GO-HM), H_2O_2 saja (GO-PT H_2O_2) serta kombinasi H_2SO_4 dan H_2O_2 (GO-mix) dengan perbandingan 1:0,5 (v/v) untuk 20 mL H_2SO_4 . Variasi ini bertujuan untuk mengevaluasi peran masing-masing reagen terhadap proses interkalasi dan oksidasi grafit.

Sebanyak 1 gram grafit dicampurkan dengan larutan sesuai variasi media. Campuran diaduk secara menyeluruh hingga grafit terdispersi merata dalam larutan asam. Setelah tercampur homogen, campuran didinginkan

menggunakan *ice-bath* hingga mencapai suhu 0°C untuk mengontrol reaksi dan mencegah peningkatan suhu berlebih saat penambahan agen pengoksidasi. Selanjutnya sebanyak 3 gram kalium permanganat (KMnO_4) ditambahkan secara perlahan ke dalam campuran dingin tersebut sambil diaduk konstan. Setelah seluruh KMnO_4 larut sempurna, campuran dibiarkan mencapai suhu kamar dan kemudian diaduk pada suhu 30°C selama dua jam untuk memastikan proses oksidasi berlangsung merata.

Campuran hasil oksidasi kemudian dituangkan ke dalam labu yang berisi 50 mL air deionisasi. Penambahan air dilakukan hati-hati untuk menghindari reaksi eksotermis yang berlebihan. Setelah tahap ini larutan hasil pengenceran dipanaskan hingga suhu 70°C selama 15 menit guna memastikan reaksi oksidasi berjalan sempurna. Campuran kemudian kembali diencerkan dengan penambahan 250 mL air deionisasi untuk menghentikan reaksi. Selanjutnya, larutan hidrogen peroksida (H_2O_2 30%) ditambahkan sebanyak 5 mL secara perlahan untuk mereduksi sisa KMnO_4 dan mangan dioksida (MnO_2) menjadi ion mangan yang larut. Pada tahap ini, warna campuran menjadi coklat keemasan yang menandakan reaksi reduksi telah terjadi.

Campuran hasil kemudian dibiarkan mengendap sehingga GO dapat terpisah dari fase cair. Endapan GO dimurnikan melalui proses sentrifugasi berulang dan *redisperse* dalam air deionisasi hingga tidak lagi menunjukkan reaksi positif terhadap ion sulfat, yang menandakan penghilangan residu asam telah sempurna. Akhirnya *slurry* GO diperoleh dikeringkan di dalam oven pada suhu 45°C selama 6-12 jam hingga didapatkan lembaran GO kering. Tahapan proses secara umum ditunjukkan pada Gambar 1.



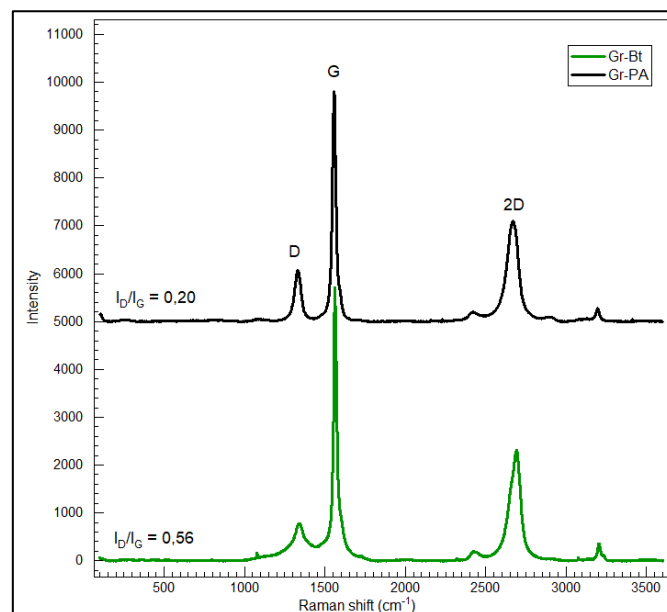
Gambar 1. Diagram Skematik Tahapan Percobaan Sintesis *Graphene Oxide* dengan Modifikasi Metode Hummer

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil karakterisasi menggunakan spektroskopi raman terhadap grafit limbah baterai dan grafit komersial ditunjukkan pada Gambar 2. Spektroskopi Raman merupakan metode non-destruktif yang umum digunakan untuk menganalisis struktur material berbasis karbon. Dalam spektrum Raman, pita utama yang diamati adalah pita D ($\sim 1350\text{ cm}^{-1}$) dan G ($\sim 1580\text{ cm}^{-1}$). Pita G berhubungan dengan getaran regangan *in-plane* dari atom karbon sp^2 dalam kisi heksagonal, sedangkan pita D muncul akibat cacat struktur atau gangguan pada konfigurasi sp^2 . Rasio antara intensitas pita D dan G (I_D/I_G) digunakan sebagai indikator tingkat cacat atau ketidakteraturan struktur karbon [12], [13].

3.1. Analisis Struktur Grafit Limbah Baterai

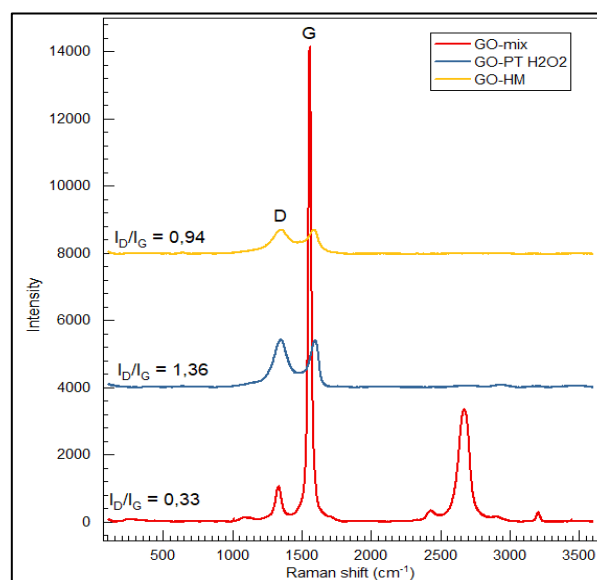
Spektrum grafit komersial menunjukkan pita G yang lebih tajam dan intensitas pita D yang relatif kecil, dengan rasio I_D/I_G 0,12 menandakan struktur kristalin yang baik dengan tingkat cacat rendah. Sebaliknya, grafit limbah baterai memperlihatkan peningkatan intensitas pita D dan sedikit pergeseran pita G ke arah bilangan gelombang lebih rendah, menghasilkan rasio I_D/I_G sebesar 0,32. Hasil ini mengindikasikan bahwa grafit dari limbah baterai memiliki tingkat cacat struktural yang lebih tinggi, yang secara umum disebabkan oleh proses litiasi-delitiasi selama siklus hidup baterai. Dengan demikian, grafit limbah baterai memiliki tingkat disorder yang lebih tinggi dan berpotensi lebih reaktif terhadap proses oksidasi pada tahap sintesis GO berikutnya [14].



Gambar 2. Raman Spektra Grafit Limbah Baterai (Gr-Bt) dan Grafit Komersial (Gr-PA)

3.2. Pengaruh Variasi Media Interkalasi terhadap Struktur Graphene Oxide (GO)

Spektrum Raman GO hasil oksidasi grafit limbah baterai dengan tiga variasi media reaksi ditampilkan pada Gambar 3. Ketiga sampel menunjukkan dua pita khas karbon, D ($\sim 1350\text{ cm}^{-1}$) dan G ($\sim 1580\text{ cm}^{-1}$), dengan intensitas berbeda tergantung pada media yang digunakan. Nilai rasio I_D/I_G hasil pengolahan data Raman disajikan pada Tabel 1. Nilai I_D/I_G meningkat secara signifikan dibandingkan dengan grafit awal, menunjukkan terbentuknya cacat struktural dan gugus oksigen akibat proses oksidasi.



Gambar 3. Raman Spektra GO-mix, GO-PT H₂O₂, GO-HM

Tabel 1. Nilai Rasio I_D/I_G tiga variasi GO

Jenis GO	Rasio I_D/I_G
GO-mix	0,33
GO-HM	0,94
GO-PT H ₂ O ₂	1,36

Perbedaan nilai rasio I_D/I_G pada ketiga sampel GO menunjukkan pengaruh nyata jenis media interkalasi terhadap keberhasilan proses oksidasi grafit. Pada GO mix, diperoleh rasio I_D/I_G yang lebih rendah, yaitu 0,33 menandakan reaksi oksidasi tidak berlangsung efektif. Hal ini disebabkan oleh degradasi dini $KMnO_4$ akibat reaksi langsung dengan H_2O_2 dalam media asam pekat. Interaksi keduanya menghasilkan oksigen aktif secara cepat sebelum dapat mengoksidasi grafit, sehingga $KMnO_4$ tereduksi menjadi Mn_2^+ dan kehilangan kemampuan oksidatifnya. Akibatnya, struktur grafit tidak mengalami perubahan signifikan, bahkan cenderung mempertahankan karakter grafitik aslinya [15].

Pada variasi H_2SO_4 saja (GO-HM), rasio I_D/I_G meningkat menjadi 0,94 menunjukkan bahwa proses oksidasi berlangsung sebagian. Dalam sistem ini, H_2SO_4 berfungsi sebagai media protonasi dan interkalasi yang membuka lapisan grafit, sementara $KMnO_4$ berperan sebagai oksidator utama yang menghasilkan gugus oksigen seperti hidroksil (-OH) dan epoksi (C-O-C) [16]. Namun, karena tidak ada oksidator tambahan yang mempercepat pembentukan gugus oksigen, oksidasi hanya terjadi pada permukaan grafit dan belum mencapai bidang basal secara merata.

Sementara itu, variasi H_2O_2 pada interkalasi awal grafit menghasilkan rasio I_D/I_G tertinggi sebesar 1,36 menandakan derajat oksidasi paling tinggi di antara semua sampel. Dalam kondisi ini, H_2O_2 berperan sebagai oksidator sekaligus interkalator yang mampu menghasilkan radikal hidroksil ($\bullet OH$) dan oksigen reaktif (O_2^-) yang menyerang ikatan C=C pada bidang basal grafit. Reaksi ini menyebabkan peningkatan jumlah cacat struktural dan pembentukan gugus fungsional oksigen, terutama gugus karboksil (-COOH) dan hidroksil (-OH) [7], [8], [17]. Nilai I_D/I_G di atas 1 menunjukkan bahwa sebagian besar ikatan sp^2 telah terganggu dan struktur grafit telah berubah menjadi *graphene oxide*.

Secara keseluruhan, hasil ini menunjukkan bahwa penggunaan H_2O_2 tunggal sebagai media interkalasi tambahan memberikan hasil oksidasi paling efektif tanpa menyebabkan degradasi $KMnO_4$. Mekanisme ini berbeda dari kombinasi $H_2SO_4 + H_2O_2$ yang bersifat terlalu reaktif dan destruktif terhadap oksidator utama. Peningkatan rasio I_D/I_G yang signifikan pada sampel GO-PT H_2O_2 juga menegaskan bahwa hidrogen peroksida mampu menggantikan peran $NaNO_3$ dalam metode Hummer konvensional, menghasilkan proses yang lebih ramah lingkungan tanpa menurunkan efisiensi oksidasi. Temuan ini memberikan wawasan baru bahwa grafit limbah baterai yang dioksidasi dengan H_2O_2 murni dapat menghasilkan GO dengan derajat oksidasi tinggi, yang berpotensi digunakan sebagai material adsorben CO_2 atau bahan dasar komposit fungsional.

4. KESIMPULAN

Hasil penelitian menunjukkan bahwa efektivitas proses oksidasi grafit limbah baterai sangat dipengaruhi oleh jenis media interkalasi yang digunakan. Penggunaan kombinasi H_2SO_4 dan H_2O_2 (GO-mix) menyebabkan degradasi $KMnO_4$ sebelum dapat mengoksidasi grafit, ditunjukkan oleh rasio I_D/I_G rendah sebesar 0,33. Oksidasi dengan H_2SO_4 saja (GO-HM) menghasilkan nilai I_D/I_G sebesar 0,94 menunjukkan peningkatan cacat moderat. Variasi H_2O_2 saja (GO-PT H_2O_2) menghasilkan rasio tertinggi sebesar 1,36 menandakan pembentukan cacat dan gugus oksigen yang paling banyak. Dengan demikian, H_2O_2 murni merupakan media terbaik sintesis GO dari grafit limbah baterai, menghasilkan *graphene oxide* dengan derajat oksidasi tinggi melalui proses yang lebih ramah lingkungan dan bebas emisi gas berbahaya.

DAFTAR PUSTAKA

- R. Ahmed, G. Liu, B. Yousof, Q. Abbas, H. Ullah, and M. U. Ali, "Recent advances in carbon-based renewable adsorbent for selective carbon dioxide capture and separation-A review," Jan. 01, 2020, Elsevier Ltd. doi: 10.1016/j.jclepro.2019.118409.
- M. Nasrollahzadeh, M. Atarod, B. Jaleh, and M. Gandomirouzbahani, "In situ green synthesis of Ag nanoparticles on graphene oxide/TiO₂ nanocomposite and their catalytic activity for the reduction of 4-nitrophenol, congo red and methylene blue," *Ceram Int*, vol. 42, no. 7, pp. 8587–8596, May 2016, doi: 10.1016/j.ceramint.2016.02.088.
- C. K. Chua and M. Pumera, "Chemical reduction of graphene oxide: A synthetic chemistry viewpoint," Jan. 07, 2014, Royal Society of Chemistry. doi: 10.1039/c3cs60303b.
- D. R. Dreyer, S. Park, C. W. Bielawski, and R. S. Ruoff, "The chemistry of graphene oxide," *Chem Soc Rev*, vol. 39, no. 1, pp. 228–240, Dec. 2010, doi: 10.1039/b917103g.
- M. Nováček et al., "Tuning of graphene oxide composition by multiple oxidations for carbon dioxide storage and capture of toxic metals," 2017.
- A. C. Ribeiro, B. E. Piske, V. R. Wiggers, and E. G. C. Neiva, "Exploring Hummers Approach for Graphene Oxide Synthesis and Industrial Viability," *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, vol. 15, no. 2, 2024, doi: 10.18178/ijcea.2024.15.2.814.
- G. Tarango-Rivero et al., "Effect of Process Parameters on the Graphite Expansion Produced by a Green Modification of the Hummers Method," *Molecules*, vol. 27, no. 21, Nov. 2022, doi: 10.3390/molecules27217399.

- F. Tarannum et al., "Hydrogen-peroxide intercalated expanded graphite facilitates large enhancement in thermal conductivity of polyetherimide/graphite nanocomposites," *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 33, pp. 1420–1435, Nov. 2024, doi: 10.1016/j.jmrt.2024.09.043.
- M. Kumar, K. P. Panda, R. T. Naayagi, R. Thakur, and G. Panda, "Comprehensive Review of Electric Vehicle Technology and Its Impacts: Detailed Investigation of Charging Infrastructure, Power Management, and Control Techniques," Aug. 01, 2023, Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). doi: 10.3390/app13158919.
- S. D. Suryohendrasworo, "Penyisihan Kontaminan dari Air Limbah Hasil Daur Ulang Baterai LiFePO₄ (LFP) Menggunakan Penukar Ion Resin Kation Amberlite HPR1100 Na dan Resin Anion Dowex Marathon A," *Jurnal Rekayasa Proses*, vol. 15, no. 2, p. 231, Dec. 2021, doi: 10.22146/jrekpros.69847.
- Y. Qiao et al., "Recycling of graphite anode from spent lithium-ion batteries: Advances and perspectives," Apr. 01, 2023, John Wiley and Sons Inc. doi: 10.1002/eom2.12321.
- J. Homepage et al., "METALLION JOURNAL OF CHEMISTRY LITERATUR REVIEW: POTENSI SUMBER ALAM SEBAGAI BAHAN BAKU GRAFENA," 2024.
- S. N. Alam, N. Sharma, and L. Kumar, "Synthesis of Graphene Oxide (GO) by Modified Hummers Method and Its Thermal Reduction to Obtain Reduced Graphene Oxide (rGO)*," *Graphene*, vol. 06, no. 01, pp. 1–18, 2017, doi: 10.4236/graphene.2017.61001.
- M. S. Islam, A. K. Kushwaha, and M. Misra, "Review on the recycling of anode graphite from waste lithium-ion batteries," Nov. 01, 2024, Springer. doi: 10.1007/s10163-024-02093-4.
- K. Savaram et al., "Synergy of oxygen and a piranha solution for eco-friendly production of highly conductive graphene dispersions," *Green Chemistry*, vol. 17, no. 2, pp. 869–881, Feb. 2015, doi: 10.1039/c4gc01752h.
- N. S. Suhaimin et al., "The evolution of oxygen-functional groups of graphene oxide as a function of oxidation degree," *Mater Chem Phys*, vol. 278, Feb. 2022, doi: 10.1016/j.matchemphys.2021.125629.
- Z. Benzait and L. Trabzon, "Graphite Size Effect on Chemical Expansion and Graphene Oxide Properties," *ACS Omega*, vol. 7, no. 42, pp. 37885–37895, Oct. 2022, doi: 10.1021/acsomega.2c05059.