INTISARI

STRUKTUR SOLVASI, TRANSPORT ION DAN SIFAT KONDUKTIVITAS ION PADA NATRIUM BIS(TRIFLUOROMETANA SULFONIL)IMIDA (NaTFSI): KAJIAN DINAMIKA MOLEKULER STRUKTUR WATER-IN-SALT

Oleh

ALBERTO KRISHNA KSATRIA WINNING KUSUMA
22/495683/PPA/06315

Kajian mengenai struktur solvasi, transport ion dan konduktivitas ion pada natrium *bis*(trifluorometana sulfonil)imida (NaTFSI) dengan keadaan *water-in-salt* telah dilakukan. Tujuan dari kajian ini adalah mempelajari struktur solvasi NaTFSI, transport dan konduktivitas ion Na^+. Natrium *bis*(trifluorometana sulfonil)imida dengan konsentrasi 1, 5, 10 dan 20 m dilakukan simulasi dinamika molekuler klasik pada temperatur 298,15 K dan tekanan 0,9869 atm. Medan gaya yang digunakan adalah *general Amber force field* dan *Austin Model 1-bond charge correction* sebagai muatan parsial atom. Hasil simulasi dilakukan *sampling* selama 20 ns dengan ensembel NPT pada temperatur 298,15 K dan tekanan 0,9869 atm. Sampel trajekori dilakukan analisis fungsi distribusi radial, *self-diffusion*, transport ion Na^+ dan konduktivitas ionik.

Analisis fungsi distribusi radial dilakukan antara ion Na^+–O_{H_2O}, H_{H_2O}–O_{TFSI^-}, ion Na^+–O_{TFSI^-} dan O_{H_2O}–O_{H_2O}. Hasil yang didapatkan adanya kesesuaian dengan eksperimen serta timbul jarak yang lebih panjang untuk fungsi distribusi radial antara O_{H_2O}–O_{H_2O} dengan meningkatnya konsentrasi NaTFSI. Nilai koefisien *self-diffusion*, transport ion Na^+ dan konduktivitas ionik tidak sebanding dengan konsentrasi NaTFSI. Penurunan signifikan nilai konstanta *self-diffusion* dan konduktivitas ionik, terjadi pada konsentrasi 10 m. Transport ion Na^+ secara maksimal terjadi pada konsentrasi 10 m dan mengalami penurunan pada konsentrasi 20 m. Konduktivitas ionik menunjukkan tren penurunan yang disebabkan oleh peluang adanya pembentukan endapan NaTFSI pada konsentrasi tinggi.

Kata kunci: solvasi, transport ion, konduktivitas ion, dinamika molekuler, NaTFSI, *water-in-salt*

ABSTRACT

SOLVATION STRUCTURE, ION TRANSPORT AND IONIC CONDUCTIVITY PROPERTIES ON SODIUM BIS(TRIFLUOROMETHANE SULFONYL)IMIDE (NaTFSI): A MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF WATER-IN-SALT

By

ALBERTO KRISHNA KSATRIA WINNING KUSUMA
22/495683/PPA/06315

Studies on structure, ion transport and conductivity of water-in-salt sodium *bis*(trifluoromethane sulfonyl)imide (NaTFSI) had been carried out. Purpose of this study is to describe the solvation structure of NaTFSI, Na^+ ionic transport and conductivity. Water-in-salt NaTFSI with concentrations of 1, 5, 10 and 20 m were simulated using classical molecular dynamics simulations at 298.15 K and 0.9869 atm. General Amber force field and Austin Model 1-bond charge correction were used for force field and atomic partial charges, respectively. The simulation results were sampled for 20 ns using NPT ensemble at temperature 289.15 K and 0.9869 atm. The sample trajectory was analyzed for radial distribution function, self-diffusion, ion transport Na^+ and ionic conductivity.

Radial distribution function analysis was performed between Na^+–O_{H_2O}, H_{H_2O}–O_{TFSI^-}, Na^+–O_{TFSI^-} and O_{H_2O}–O_{H_2O} ions. The results obtained were in accordance with the experiment and there was a longer distance for the radial distribution function between O_{H_2O}–O_{H_2O} with increasing NaTFSI concentration. The values of self-diffusion coefficient, Na^+ ion transport and ionic conductivity were not proportional to the NaTFSI concentration. Significant decrease in the value of *self-diffusion* constant and ionic conductivity, occurred at a concentration of 10 m. The maximum ion transport of Na^+ occurred at a concentration of 10 m and decreased at a concentration of 20 m. Ionic conductivity showed a decreasing trend caused by the possibility of NaTFSI precipitate formation at high concentrations.

Keywords: solvation, ionic transport, ionic conductivity, molecular dynamics, NaTFSI, water-in-salt