

PENGARUH KONSENTRASI GARAM NaTFSI DAN TEMPERATUR TERHADAP FUNGSI DISTRIBUSI RADIAL, KOEFISIEN DIFUSI DAN KONDUKTIVITAS IONIK ELEKTROLIT [BMIm][TFSI] MELALUI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Lathifah Atika Sari
21/475247/PA/20558

INTISARI

Penelitian ini membahas pengaruh konsentrasi garam dan temperatur terhadap sifat elektrolit NaTFSI/[BMIm][TFSI] untuk aplikasi baterai ion natrium, dengan pendekatan simulasi dinamika molekuler. Tujuan penelitian ini adalah untuk mempelajari pengaruh konsentrasi garam dan temperatur terhadap fungsi distribusi radial (RDF), koefisien difusi dan konduktivitas ionik serta menentukan kondisi optimum untuk elektrolit baterai tersebut.

Simulasi dinamika molekuler dilakukan pada sistem $\text{Na}_x\text{BMIm}_{(1-x)}\text{TFSI}$ yang dibangun dengan bantuan perangkat lunak Fftool dan Packmol. Parameter medan gaya yang digunakan berasal dari CL&P non-polarisasi. Simulasi dilakukan dalam empat tahapan, yaitu minimisasi energi, *annealing*, ekuilibrasi, dan produksi data dengan variasi konsentrasi garam ($X_{\text{NaTFSI}} = 0,0; 0,1 \text{ dan } 0,2$) dan temperatur (300; 350 dan 400 K). Data trajektori yang dihasilkan digunakan untuk menghitung RDF, koefisien difusi ion dan konduktivitas ionik dengan relasi Einstein.

Peningkatan konsentrasi garam NaTFSI dalam sistem menyebabkan terbentuknya kompleks ion ditandai dengan menurunnya intensitas puncak RDF Na–O. Hal ini menyebabkan berkurangnya mobilitas dan menurunkan koefisien difusi serta konduktivitas ionik. Peningkatan temperatur dalam sistem menyebabkan melemahnya struktur koordinasi ion yang ditunjukkan oleh pergeseran, pelebaran dan penurunan intensitas puncak RDF Na–O. Kondisi ini meningkatkan energi kinetik dan mobilitas ion sehingga koefisien difusi dan konduktivitas ionik meningkat. Berdasarkan hasil simulasi, kondisi optimum sistem elektrolit NaTFSI/[BMIm][TFSI] diperoleh pada fraksi mol NaTFSI sebesar 0,1 dan temperatur 300 K.

Kata kunci: cairan ionik, elektrolit, simulasi dinamika molekuler

EFFECT OF NaTFSI SALT CONCENTRATION AND TEMPERATURE ON THE RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION, DIFFUSION COEFFICIENT AND IONIC CONDUCTIVITY OF [BMIm][TFSI] ELECTROLYTE THROUGH MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Lathifah Atika Sari
21/475247/PA/20558

ABSTRACT

The research conducted discusses the effect of salt concentration and temperature on the properties of NaTFSI/[BMIm][TFSI] electrolyte for sodium ion battery applications, using a molecular dynamics simulation approach. The objective of this research was to investigate the effect of salt concentration and temperature on the radial distribution function (RDF), diffusion coefficient and ionic conductivity, as well as to determine the optimum conditions for the electrolyte system for battery applications.

Molecular dynamics simulations were performed on the $\text{Na}_x\text{BMIm}_{(1-x)}\text{TFSI}$ system constructed using Fftool and Packmol software. The force field parameters were derived from the non-polarized CL&P force field. The simulations were carried out in four stages: energy minimization, annealing, equilibration, and data production with variations in salt concentration ($X_{\text{NaTFSI}} = 0.0; 0.1 \text{ and } 0.2$) and temperature (300; 350 and 400 K). The generated trajectory data were used to calculate RDF, ion diffusion coefficient and ionic conductivity using Einstein's relation.

The increase in NaTFSI salt concentration in the system leads to the formation ion complexes, as indicated by decrease in the intensity of the Na–O RDF peak. This results in reduced mobility and decreases the diffusion coefficient and ionic conductivity. An increase in temperature causes a weakening of the ion coordination structure as indicated by the shift, broadening and decrease in the intensity of the Na–O RDF peak. This condition increases the kinetic energy and mobility of the ions, thereby enhancing the diffusion coefficient and ionic conductivity. Based on simulation results, the optimum conditions for the NaTFSI/[BMIm][TFSI] electrolyte system were obtained at a NaTFSI mole fraction of 0.1 and a temperature of 300 K.

Keywords: electrolyte, ionic liquid, molecular dynamics simulation