

**STRUKTUR SOLVASI DAN SIFAT TRANSPOR NATRIUM 1-ETIL-3-METIL-IMIDAZOLIUM BIS(TRIFLUOROMETANASULFONIL)IMIDA MELALUI DINAMIKA MOLEKULER DENGAN *CHARGE SCALING* SERTA MEDAN GAYA CANONGIA LOPES PADUA**

Irma Eliana  
21/481802/PA/20990

**INTISARI**

Kajian mengenai analisis struktur dan sifat transpor natrium 1-etil-3-metil-imidazolium bis(trifluorometanasulfonil)imida melalui dinamika molekuler dengan *charge scaling* serta medan gaya Canongia Lopes Padua telah dilakukan. Tujuan dari kajian ini adalah menganalisis sifat struktur dan sifat transpor ionik serta memvalidasi akurasi metode yang digunakan. Elektrolit NaTFSI/EMIm–TFSI dengan fraksi konsentrasi natrium 0, 0,1, 0,2, dan 0,3 serta temperatur 300, 350, dan 400 K pada tekanan 1 bar dilakukan simulasi dinamika molekuler klasik. Medan gaya yang digunakan adalah Canongia Lopes dan Padua (CL&P) yang dikembangkan khusus untuk cairan ionik dan *charge scaling* 0,7e sebagai muatan polarisasi rata-rata. Simulasi dilakukan selama 300 ns dengan produksi pada ensembel NVT. Trajektori dilakukan analisis fungsi distribusi radial, koefisien *self-diffusion*, konduktivitas, dan angka transferensi ion.

Analisis fungsi distribusi radial dilakukan antara Na-O<sub>TFSI</sub>. Hasil yang didapatkan menunjukkan pelebaran jarak yang mengindikasikan pelemahan interaksi, sehingga atom-atom lebih bebas bergerak yang menandakan berkurangnya *overbinding* yang sering terjadi di medan gaya *non-polarizable*. Nilai koefisien *self-diffusion* didapatkan kesesuaian dengan eksperimen dan menurunkan kesalahan relatif menjadi <10%. Konduktivitas ionik yang didapatkan jauh lebih kecil dibanding dengan eksperimen dengan kesalahan relatif 39–43%. Angka transferensi Na<sup>+</sup> semuanya bernilai positif yang menunjukkan ion natrium berkontribusi terhadap konduktivitas. Nilai tersebut lebih baik dibanding dengan penelitian sebelumnya yang menghasilkan nilai transferensi negatif.

Kata kunci: cairan ionik, *charge scaling*, CL&P, elektrolit.

***SOLVATION STRUCTURE AND TRANSPORT PROPERTIES SODIUM 1-ETHYL-3-METHYL-IMIDAZOLIUM BIS(TRIFLUOROMETHANESULFONYL)IMIDE VIA MOLECULAR DYNAMICS WITH CHARGE SCALING AND CANONGIA LOPES PADUA FORCE FIELD***

Irma Eliana

21/481802/PA/20990

**ABSTRACT**

Studies analysis of the structure and transport properties of sodium 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide via molecular dynamics with charge scaling and Canongia Lopes Padua force field has been conducted. The objective of this study is to analyse the structural properties and ionic transport properties, and validate the accuracy of the methods used. Classical molecular dynamics simulations were performed for NaTFSI/EMIm–TFSI with sodium concentration fractions of 0, 0.1, 0.2, and 0.3, with temperatures 300, 350, and 400 K at pressure 1 bar. The force field used was Canongia Lopes and Padua (CL&P), specifically developed for ionic liquids, with charge scaling of 0,7e as the average polarisation charge. The simulations were conducted for 300 ns with production in the NVT ensemble. Trajectories were analysed for radial distribution function, self-diffusion coefficient, conductivity, and transference number.

Radial distribution function analysis was performed between Na-O<sub>TFSI</sub>. The results showed a widening of the distance, which indicated a weakening of interactions, so the atoms were freer to move, signifying a reduction in overbinding that often occurred in non-polarizable force fields. The self-diffusion coefficient values were consistent with the experiments and reduced the relative error to <10%. The ionic conductivity was much smaller than the experiment with a relative error of 39–43%. All Na<sup>+</sup> transfer numbers were positive, indicating that sodium ions contributed to the conductivity. These values were better than those obtained in previous studies, which produced negative transfer numbers..

Keywords: charge scaling, CL&P, electrolyte, ionic liquid.