

STUDI DINAMIKA MOLEKUL: PENGARUH FRAKSI Na⁺ DAN TEMPERATUR PADA SIFAT TRANSPORTASI ION DAN STRUKTUR CAIRAN IONIK NaTFSI/Py₁₃TFSI

Dhurin Faisal Bestari
21/476848/PA/20611

INTISARI

Penelitian mengenai analisis transportasi ion dan struktur cairan ionik natrium bis-(trifluorometanasulfonil) imida/N-metil-N-propilpirolidinium bis-(trifluorometanasulfonil) imida atau NaTFSI/Py₁₃TFSI melalui simulasi dinamika molekul menggunakan medan gaya dari Canongia Lopes dan Padua (CL&P) telah dilakukan. Medan gaya CL&P dirancang khusus untuk simulasi cairan ionik. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mempelajari sifat transportasi ion dan struktur cairan ionik NaTFSI/Py₁₃TFSI terhadap variasi fraksi Na⁺ dan temperatur. Variasi yang dilakukan yaitu fraksi Na⁺ 0,0; 0,1; 0,2; 0,3; dan 0,4 serta temperatur 300, 350, dan 400 K. Simulasi tahap pertama atau produksi NPT dilakukan untuk memperoleh densitas dan ukuran kotak simulasi. Simulasi tahap kedua atau produksi NVT menggunakan ukuran kotak simulasi yang diperoleh pada tahap pertama. Trajektori dari produksi NVT kemudian dilakukan analisis fungsi distribusi radial (RDF), rata-rata perpindahan kuadrat (MSD), dan konduktivitas. Data MSD yang diperoleh kemudian digunakan untuk menghitung koefisien difusitas diri.

Peningkatan fraksi Na⁺ menyebabkan penurunan koefisien difusi diri dan konduktivitas. Sebaliknya, peningkatan temperatur menyebabkan peningkatan koefisien difusi diri dan konduktivitas. Puncak RDF yang diperoleh mirip dengan sistem yang menggunakan garam LiTFSI. Peningkatan fraksi Na⁺ menyebabkan perubahan struktur sistem cairan ionik NaTFSI/Py₁₃TFSI menjadi lebih kompak. Peningkatan fraksi Na⁺ dan temperatur menyebabkan konfigurasi Na-TFSI secara bidentat berkurang dan monodentat bertambah. Selain itu, peningkatan temperatur menyebabkan jarak antar partikel pada sistem menjadi lebih jauh. Peningkatan fraksi Na⁺ menyebabkan puncak RDF pusat massa pasangan Py₁₃-Py₁₃ bergeser ke kanan dan intensitasnya menurun, pasangan Py₁₃-TFSI relatif tetap namun dengan intensitas yang menurun, pasangan TFSI-TFSI bergeser ke kiri dengan intensitas yang bervariasi, dan pasangan Na-TFSI tetap dengan penurunan intensitas. Sebaliknya, peningkatan temperatur menyebabkan interaksi antar ion akan melemah yang ditunjukkan oleh penurunan bilangan koordinasi.

Kata kunci: cairan ionik, CL&P, medan gaya, MSD, dan RDF.

MOLECULAR DYNAMICS STUDY: THE EFFECT OF Na⁺ FRACTION AND TEMPERATURE ON ION TRANSPORT PROPERTIES AND STRUCTURE OF NaTFSI/Pyr₁₃TFSI IONIC LIQUID

Dhurin Faisal Bestari
21/476848/PA/20611

ABSTRACT

Research on the analysis of ion transport and the structure of sodium bis-(trifluoromethanesulfonyl) imide/N-methyl-N-propylpyrrolidinium bis-(trifluoromethanesulfonyl) imide or NaTFSI/Pyr₁₃TFSI through molecular dynamics simulations using the Canongia Lopes and Padua (CL&P) force field has been conducted. The CL&P force field is specifically designed for ionic liquid simulations. The objective of this study was to investigate the ion transport properties and structure of the NaTFSI/Pyr₁₃TFSI ionic liquid with respect to variations in Na⁺ fraction and temperature. The variations performed were Na⁺ fractions of 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, and 0.4, and temperatures of 300, 350, and 400 K. The first stage of simulation, or NPT production, was to obtain the density and size of the simulation box. The second simulation stage, or NVT production, used the simulation box size obtained in the first stage. The trajectories from NVT production were then analyzed using Radial Distribution Function (RDF), Mean Square Displacement (MSD), and conductivity. The MSD data obtained was then used to calculate the self-diffusion coefficient.

An increase in the Na⁺ fraction causes the self-diffusion coefficient and conductivity to decrease. Conversely, an increase in temperature causes an increase in the self-diffusion coefficient and conductivity. The RDF peak obtained is similar to that of a system using LiTFSI salt. An increase in the Na⁺ fraction causes the structure of the NaTFSI/Pyr₁₃TFSI ionic liquid system to become more compact. An increase in the Na⁺ fraction and temperature causes the bidentate configuration of NaTFSI to decrease and the monodentate configuration to increase. In addition, an increase in temperature causes the distance between particles in the system to become greater. An increase in the Na⁺ fraction causes the center of mass RDF peak of the Pyr₁₃-Pyr₁₃ pair to shift to the right and its intensity to decrease, the Pyr₁₃-TFSI pair to remain relatively constant but with decreased intensity, the TFSI-TFSI pair to shift to the left with varying intensity, and the Na-TFSI pair to remain constant with decreased intensity. Conversely, an increase in temperature causes interionic interactions to weaken, as indicated by a decrease in coordination number.

Keywords: CL&P, force field, ionic liquid, MSD, and RDF.