

PREDICTIVE MODELING OF IONIC LIQUIDS CO₂ CAPTURE USING MACHINE LEARNING AND QUANTUM CHEMICAL DESCRIPTORS

Maulana Ragil Zakariah

22/496063/PA/21294

ABSTRACT

Though they are promising for CO₂ capture, experimental screening of millions of cation–anion combinations is impractical. This study employs machine learning to predict CO₂ solubility by integrating quantum chemical descriptors with operational parameters. A dataset of 11,256 CO₂ solubility measurements for 113 ionic liquids (298–373 K, 0.1–22,330 kPa) was compiled from literature. Quantum descriptors (HOMO, LUMO, electronic energy, dipole moment) were calculated at B3LYP/6-31G(d,p) for 79 ionic liquid components. Four algorithms were trained: Random Forest, Gradient Boosting, Neural Network, and Ridge Regression.

Random Forest achieved the highest performance ($R^2 = 0.9853$, MAE = 0.0167 mol CO₂/mol IL). Feature importance analysis revealed pressure and temperature dominate solubility, being 15–45 times more influential than quantum descriptors, whilst anion electronic energy differentiates among ionic liquids. The model enables computational screening in milliseconds versus weeks of experiments. Extrapolative screening predicted [BMIM][Laurate] achieves 24–33% higher CO₂ solubility than [BMIM][Oleate], demonstrating the framework's utility for rational design of ionic liquids for carbon capture.

Keywords: CO₂ solubility, ionic liquids, machine learning, quantum chemical descriptors.

PEMODELAN PREDIKTIF PENANGKAPAN CO₂ CAIRAN IONIK MENGUNAKAN PEMBELAJARAN MESIN DAN DESKRIPTOR KIMIA KUANTUM

Maulana Ragil Zakariah
22/496063/PA/21294

INTISARI

Meskipun menjanjikan untuk penangkapan CO₂, penyaringan eksperimental jutaan kombinasi kation-anion tidak praktis. Studi ini menggunakan pembelajaran mesin untuk memprediksi kelarutan CO₂ dengan mengintegrasikan deskriptor kimia kuantum dengan parameter operasional. Sebuah dataset yang terdiri dari 11.256 pengukuran kelarutan CO₂ untuk 113 cairan ionik (298–373 K, 0,1–22.330 kPa) dikumpulkan dari literatur. Deskriptor kuantum (HOMO, LUMO, energi elektronik, momen dipol) dihitung pada B3LYP/6-31G(d,p) untuk 79 komponen cairan ionik. Empat algoritma dilatih: Random Forest, Gradient Boosting, Neural Network, dan Ridge Regression.

Random Forest mencapai kinerja tertinggi ($R^2 = 0,9853$, MAE = 0,0167 mol CO₂/mol IL). Analisis kepentingan fitur mengungkapkan tekanan dan suhu mendominasi kelarutan, 15–45 kali lebih berpengaruh daripada deskriptor kuantum, sementara energi elektronik anion membedakan antara cairan ionik. Model ini memungkinkan penyaringan komputasi dalam hitungan milidetik dibandingkan dengan eksperimen yang memakan waktu berminggu-minggu. Penyaringan ekstrapolatif memprediksi [BMIM][Laurat] mencapai kelarutan CO₂ 24–33% lebih tinggi daripada [BMIM][Oleat], menunjukkan kegunaan kerangka kerja untuk desain rasional cairan ionik untuk penangkapan karbon.

Kata kunci: cairan ionik, deskriptor kimia kuantum, kelarutan CO₂, pembelajaran mesin.