



ANALISIS TEORI ENERGI DESOLVASI ION NATRIUM PADA PELARUT
ELEKTROLIT ORGANIK MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL TIGHT
BINDING (DFTB)

*THEORETICAL ANALYSIS OF DESOLVATION ENERGY SODIUM IONS IN ORGANIC ELECTROLYTE
SOLVENTS USING DENSITY FUNCTIONAL TIGHT BINDING (DFTB)*

Ismiatul Hidayah^{1*}, Multazam^{2*}, Yahdi³, & Aditya Wibawa Sakti⁴

^{1,2,3}Program Studi Tadris Kimia, Fakultas Tarbiyah dan Keguruan UIN Mataram, Indonesia.

⁴Kimia, Universitas Pertamina, Jakarta, 12220

DOI: 10.20414/spin.v4i1.5147

History Article

Submitted:

24 May 2022

Accepted:

27 June 2022

Published:

30 June 2022

Kata Kunci:

DFTB; energi
desolvasi; pelarut
elektrolit organik.

Keywords:

Desolvation energy;
DFTB; organic
electrolyte solvents

ABSTRAK

Larutan elektrolit sangat berperan penting sebagai media transfer ion pada baterai. Transfer ion pada antar muka elektrolit dan elektroda dapat menentukan energi desolvasi dan konduktivitas ion. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui pengaruh variasi pelarut organik terhadap energi desolvasi lepasnya pelarut organik. Penelitian ini menggunakan lima pelarut elektrolit organik yaitu *Adiponitrile* (APN), *Acetonitrile* (ATN), *Butylene Carbonate* (BC), *Diethyl Carbonate* (DEC), dan *1,4-Dioxane* (DIO). Parameter yang diamati adalah energi desolvasi menggunakan metode DFTB dengan program *Dcdftbmd*. Hasil analisis data *two way* ANOVA diperoleh signifikansi kurang dari 0,05 dan *Ha* diterima yang berarti bahwa ada perbedaan yang nyata pada jenis pelarut elektrolit organik terhadap energi desolvasi. Untuk uji lanjut *Post Hoc* diperoleh bahwa terdapat perbedaan secara signifikan. Berdasarkan parameter yang diamati, dapat disimpulkan bahwa kelima jenis pelarut elektrolit organik memiliki pengaruh terhadap energi desolvasi. Energi desolvasi masing-masing pelarut organik cenderung meningkat seiring dengan semakin banyaknya pelarut organik yang lepas ikatannya dengan Natrium.

ABSTRACT

*Electrolyte is very important as an ion transfer medium in battery. Ion transfer at the interface between electrolyte and electrode can determine desolvation energy and ion conductivity. The aims of this study is to determine the effect of variations in organic solvent on desolvation energy of organic solvent. In this study, we were used five organic electrolyte solvents namely Adiponitrile (APN), Acetonitrile (ATN), Butylene Carbonate (BC), Diethyl Carbonate (DEC), and 1,4-Dioxane (DIO). The parameter observed were desolvation energy using DFTB method with the Dcdftbmd program. The result of two way ANOVA data analysis obtained a significance of less than 0.05 and *Ha* was accepted, which means that there is significant difference between the type of organic electrolyte solvent and the desolvation energy. For the Post Hoc test, it was found that there was a significant difference. Based parameter observed, the five organic solvents have an influence on the desolvation energy. Each desolvation energy of organic solvents tends to increase along with the increasing number of organic solvents released of bond with Sodium.*

How to Cite

Hidayah, I., Multazam., Yahdi., & Sakti, A. W. (2022). Analisis Teori Energi Desolvasi Ion Natrium pada Pelarut Elektrolit Organik Menggunakan Density Functional Tight Binding (DFTB). *SPIN-Jurnal Kimia & Pendidikan Kimia*. 4(1). 86-94.

*Correspondence Author:

Jl. Gajah Mada No. 100, Kota Mataram, Indonesia

Email: chemung@uinmataram.ac.id

p-ISSN: 2580-2623

e-ISSN: 2745-6854

PENDAHULUAN

Berbagai perangkat elektrokimia, seperti baterai, kapasitor, dan sel bahan bakar mengandung larutan elektrolit. Larutan elektrolit umumnya terletak diantara dua elektroda yaitu anoda dan katoda. Larutan elektrolit tidak boleh mengalami perubahan kimia selama baterai digunakan, yaitu proses *faradaic* yang berlangsung diantara kedua elektroda (Bekaert, dkk., 2017). Larutan elektrolit berfungsi sebagai media transfer ion dan sebagai pengisolasi elektron (Multazam, 2014). Baterai juga menjadi salah satu penyimpan listrik dalam bentuk energi kimia karena baterai memiliki keamanan yang baik, konduktivitas ion yang tinggi, dan murah dalam biaya (Chen, 2012). Baterai ion Natrium merupakan baterai sekunder yang dapat diisi ulang. Natrium menjadi alternatif sebagai pengganti Litium, Kalium, dan Zinc dalam baterai sekunder karena Natrium melimpah di alam dan ekonomis. Oleh karena itu, sistem penyimpanan energi berbasis Natrium dapat dipertimbangkan dan menjanjikan sebagai penyimpanan energi dengan skala besar (Nishimura dan Nakai, 2019). Baterai ion Natrium bekerja dengan fenomena proses interkalasi dan transfer ion Natrium. Proses ini terjadi pada proses *charge discharge* baterai ion Natrium. *Charge* merupakan proses pengosongan elektron pada katoda, elektron meninggalkan katoda dan menuju anoda memberikan muatan negatif. *Discharge* merupakan proses penggunaan isi kapasitas baterai (Ellis dan Nazar, 2012).

Larutan elektrolit terdiri atas 2 jenis, yaitu larutan elektrolit berair dan larutan elektrolit tak berair (Yamada, 2020). Kestabilan elektrokimia bukan hanya sifat yang harus dimiliki oleh sebuah larutan elektrolit dalam baterai tetapi larutan

elektrolit yang ideal seharusnya memiliki karakteristik, yaitu a) Memiliki konduktivitas ion yang tinggi untuk melakukan transfer ion antara elektroda dalam baterai, b) Memiliki konduktivitas elektronik yang rendah untuk mengurangi terjadinya penggunaan daya secara sendiri dan menghindari terjadinya sirkuit arus pendek, c) Kestabilan elektrokimia yang besar untuk menghindari terjadinya dekomposisi dalam baterai, d) Secara kimia bersifat *inert* dengan komponen baterai lainnya, e) Kelembaban yang tinggi terhadap permukaan elektroda, f) Tangguh dalam beberapa kondisi seperti suhu tinggi dan penyalahgunaan secara mekanik dan elektrokimia, g) Ramah lingkungan (Bekaert, dkk., 2017). Beberapa pelarut organik yang digunakan dalam baterai sebagai elektrolit antara lain *adiponitrile*, *acetonitrile*, *butylene carbonate*, *diethyl carbonate*, *1,2-dioxane*, *dimethyl formamide*, *dimethyl imidazolidinone*, *dimethyl sulfoxide*, *ethylene carbonate*, *ethyl-methyl carbonate*, *ethylene sulfite*, *fluoroethylene carbonate*, *glutaronitrile*, *gamma-valero lactone*, *2-methyl tetrahydrofuran*, *2-methoxy acetonitrile*, *3-methoxy propionitrile*, *2-methyl sulfolane*, *nitro ethane*, *nitro methane*, *N-methyl oxazolidinone*, *N-methyl pyrrolidinone*, *propylene carbonate*, *sulfolane*, *tetrahydrofuran*, *trimethyl phosphate*, *vinylene carbonate* (Okoshi, dkk., 2016), dan *methyl propyl carbonate* (Eineli dan Mcdevitt, 1997).

Kinetika reaksi dalam baterai bergantung pada beberapa faktor, antara lain: 1) adanya injeksi dan ekstraksi elektron pada antarmuka bahan pengumpul arus baik katoda maupun anoda yang disebabkan adanya reaksi redoks, 2) injeksi dan ekstraksi ion pada antarmuka elektrolit dengan katoda

maupun anoda, 3) transfer ion melalui anoda dan katoda (Abe, 2004). Desolvasi memiliki peran yang sangat penting pada proses transfer ion yang terjadi di antar muka elektrolit dan elektroda (Abe, 2004). Selain itu, efek solvasi antara kation dengan pelarut organik merupakan parameter penting dalam menentukan konduktivitas ion. Energi desolvasi yang lebih rendah menunjukkan laju pengangkutan ion yang lebih cepat. Jenis pelarut juga memiliki peran dalam penentuan besarnya energi desolvasi (Huang, 2019).

Pemodelan komputasi adalah salah satu metode tepat untuk menjelaskan fenomena mikroskopik yang terjadi pada proses transfer elektron dalam baterai. DFTB (*Density Functional Tight-Binding*) dan

$$E^{DFTB3-diag} = \frac{1}{2} \sum_{AB} U_{AB}^{rep} + \sum_{\mu\nu} D_{\mu\nu} H_{\mu\nu}^0 + \frac{1}{2} \sum_{AB} \gamma_{AB} \Delta Q_A \Delta Q_B + \frac{1}{6} \sum_A \Gamma_{AA}^{diag} \Delta Q_A^3$$

Suku pertama dari persamaan di atas mempresentasikan potensial repulsif dari atom a dan b. Suku kedua mempresentasikan energi elektronik dari elektron valensi, $D_{\mu\nu}$ merupakan densitas dan $H_{\mu\nu}^0$ merupakan elemen matriks hamiltonian. Suku ketiga dan keempat merupakan energi total yang terjadi adanya transfer muatan.

Pada penelitian sebelumnya, Masaki Okoshi (2016) melakukan penelitian tentang analisis energi desolvasi pada Litium, Sodium, dan Magnesium pada pelarut elektrolit organik. Penelitian Masaki Okoshi ini menggunakan perhitungan komputasi dengan metode DFT (*Density Functional Theory*). Sakti (2020) juga melakukan perhitungan komputasi menggunakan metode DFTB dalam menentukan energi difusi zat yang mengandung karbon dari hasil pembakaran katalis Pt_n/Al_2O_3 pada permukaan (100)- $\gamma-Al_2O_3$. Berdasarkan

DFTB+ (*Density Functional Tight-Binding Plus*) merupakan contoh pemodelan komputasi pada abad ini yang banyak digunakan. DFTB merupakan metode pendekatan yang berdasarkan pada fungsi kerapatan yang tidak memerlukan parameter empiris yang besar. Metode DFTB lebih mudah meningkatkan efek relativitas dan dispersi London dibandingkan dengan metode DFT. Selain itu, metode DFTB juga memungkinkan untuk melakukan perhitungan sifat optik karena bergantung dengan waktu (Oliveira, 2009). Metode ini menitikberatkan pada skema pengikatan kuat pada teori fungsi rapatan (*Density Functional Theory*, DFT) (Chou, 2018). Energi total DFTB pada suku ketiga yang dilambangkan $DFTB^3$ -diag adalah sebagai berikut (Sakti, 2017):

uraian latar belakang di atas, pada penelitian ini dilakukan “Analisis Teori Energi Desolvasi Kation Natrium pada Pelarut Elektrolit Organik Menggunakan *Density Functional Tight Binding* (DFTB)”.

METODE

Alat dan Bahan

Alat dan bahan yang digunakan selama penelitian untuk mempermudah peneliti dalam mengumpulkan data terdiri atas perangkat keras dan perangkat lunak. Perangkat keras berupa sebuah laptop dengan merk ASUS dengan spesifikasi RAM 2Gb DDRD3 dengan hardisk 500 Gb menggunakan OS Linux Ubuntu 20.04, processor Intel Inside. Perangkat lunak yang digunakan adalah Avogadro, VMD, dan DFTB (*Density Functional Tight Binding*).

Prosedur Penelitian

Pembuatan Molekul Tunggal dan Optimasi Geometri

Pemodelan dari masing-masing pelarut organik menggunakan Avogadro. Setiap molekul tunggal yang dibuat disimpan dalam bentuk file .XYZ. Optimasi geometri dilakukan pada folder **opt** di dalam masing-masing folder pelarut organik. Pada folder **opt**, disiapkan file molekul tunggal, *dftb.inp*, dan *.skf* yang akan digunakan sebagai *input* pada perhitungan DFTB. Beberapa hal yang perlu diubah pada file *dftb.inp* yaitu jumlah atom, muatan, multiplisitas, dan koordinat dari struktur molekul tunggal. Dijalankan perintah script *dftb* yang telah dibuat dalam komputer melalui terminal. Hasil perhitungan optimasi geometri diperoleh energi molekul dari masing-masing pelarut organik (Nakai, 2019).

Optimasi Frekuensi

Pada folder yang berbeda dengan nama **frek**, disalin file *dftb.xyz*, *dftb.inp*, dan semua *.skf* yang ada di folder **opt** ke folder **frek**. Beberapa hal yang perlu diubah pada file *dftb.inp* yaitu mengubah `FREQ=TRUE` dan koordinat struktur molekul. Dijalankan

perintah script *dftb* kemudian enter. Perhitungan optimasi frekuensi dilakukan untuk memperoleh koreksi energi sistem dan energi termal molekul (Nakai, 2019).

Analisis data

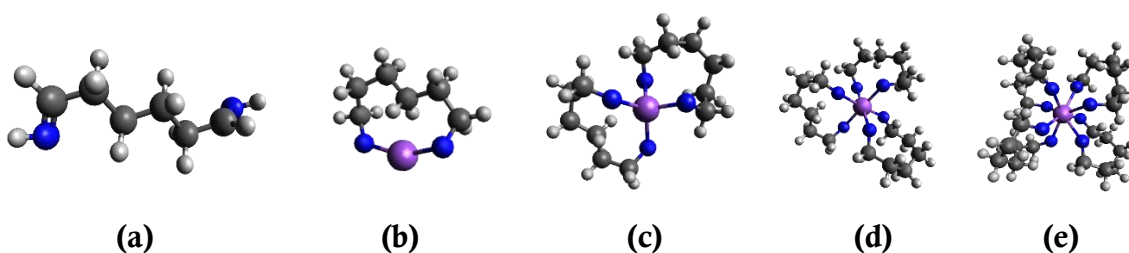
Teknik analisa data pada penelitian ini menggunakan uji ANOVA (Analysis of Variance) dua arah (two way anova). Teknik analisis data menggunakan uji parametris dengan menggunakan taraf signifikan 5%, penelitian ini menganalisis dua variabel yaitu variabel terikat dan variabel bebas. Selain itu, penelitian ini juga menggunakan uji lanjut *Post Hoc* (Sugiyono, 2013).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Optimasi Geometri

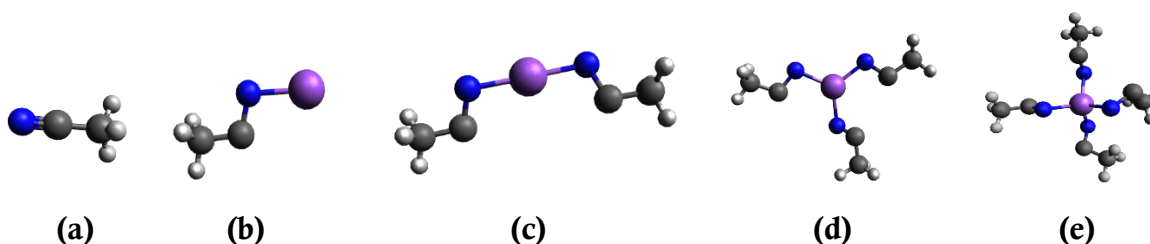
Proses pembuatan molekul menggunakan aplikasi Avogadro. Struktur yang dibuat pada Avogadro merupakan struktur input yang akan dioptimasi geometri pada aplikasi DFTB. Hasil optimasi dari *Adiponitrile* (Gambar 1a-e), *Acetonitrile* (Gambar 2a-e), *Butylene Carbonate* (Gambar 3a-e), *Diethyl Carbonate* (Gambar 4a-e), dan *1,4-dioxane* (Gambar 5a-e) sebagai berikut:

Adiponitrile

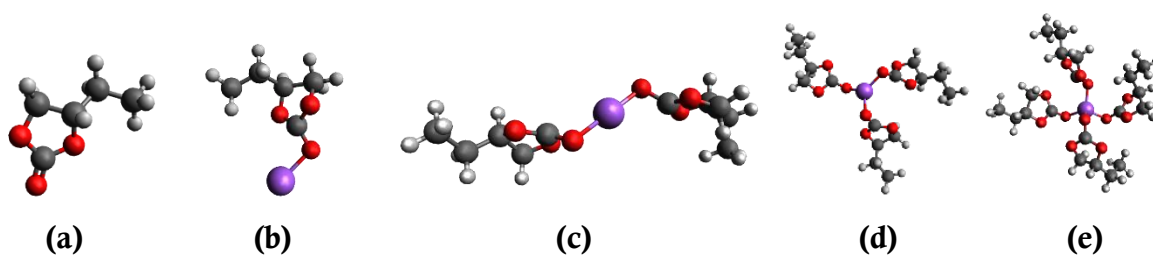


Gambar 1. (a) Pelarut, (b) pelarut + Na, (c) 2 pelarut + Na, (d) 3 pelarut + Na, (e) 4 Pelarut + Na

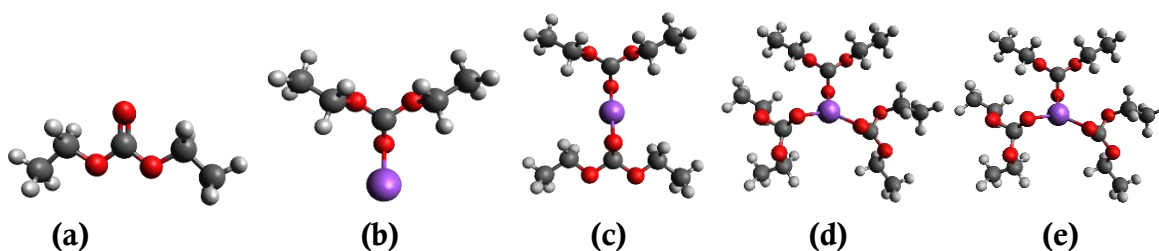
Acetonitrile



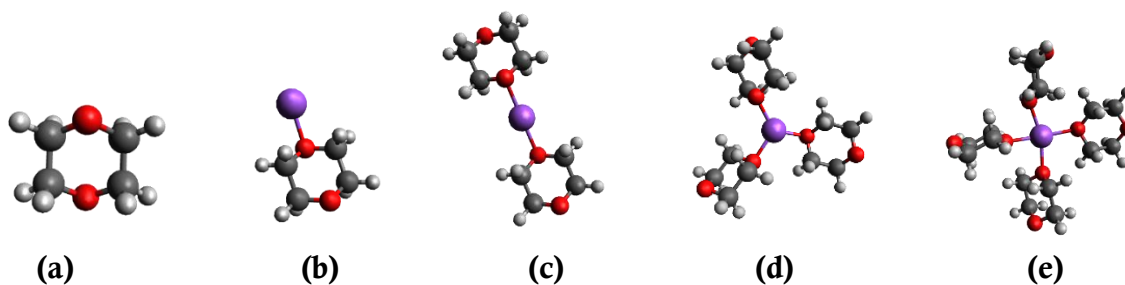
Gambar 2. (a) Pelarut, (b) pelarut + Na, (c) 2 pelarut + Na, (d) 3 pelarut + Na, (e) 4 Pelarut + Na

Butylene Carbonate

Gambar 3. (a) Pelarut, (b) pelarut + Na, (c) 2 pelarut + Na, (d) 3 pelarut + Na, (e) 4 Pelarut + Na

Diethyl Carbonate

Gambar 4. (a) Pelarut, (b) pelarut + Na, (c) 2 pelarut + Na, (d) 3 pelarut + Na, (e) 4 Pelarut + Na

1,4-dioxane

Gambar 5. (a) Pelarut, (b) pelarut + Na, (c) 2 pelarut + Na, (d) 3 pelarut + Na, (e) 4 Pelarut + Na

Perhitungan optimasi geometri juga energi masing-masing pelarut dapat dilihat menghasilkan energi dari molekul. Adapun pada Tabel 1.

Tabel 1. Energi molekul pelarut organik

Pelarut	Energi Molekul (Eh)				
	S	S+Na	2S+Na	3S+Na	4S+Na
<i>Adiponitrile</i> (APN)	-18,0898	-18,0750	-36,2274	-54,3525	-72,4583
<i>Acetonitrile</i> (ATN)	-6,9504	-6,9099	-13,9033	-20,8898	-27,8701
<i>Butylene Carbonate</i> (BC)	-21,5472	-21,5247	-43,1293	-64,7228	-86,3043
<i>Diethyl Carbonate</i> (DEC)	-22,3033	-22,2742	-44,6443	-66,9828	-89,3321
<i>1,4-Dioxane</i> (DIO)	-16,4615	-16,4208	-32,9201	-49,4214	-65,9440

Optimasi geometri merupakan suatu proses perubahan geometri yang diikuti dengan perhitungan energi sehingga memiliki struktur yang stabil dan energi yang paling rendah (Pranowo, 2011). Optimasi geometri dilakukan dengan perhitungan menggunakan aplikasi DFTB.

Pertama dibuat struktur molekul pada aplikasi Avogadro. Molekul atau pelarut organik yang digunakan pada penelitian ini adalah *Adiponitrile* (APN), *Acetonitrile* (ATN), *Butylene Carbonate* (BC), *Diethyl Carbonate* (DEC), dan *1,4-Dioxane* (DIO). Selain itu, dibuat juga struktur molekul

pelarut organik yang terdiri dari pelarut organik dan Natrium. Struktur molekul pelarut organik yang telah dioptimasi dapat dilihat pada Gambar 1a-e, Gambar 2a-e, Gambar 3a-e, Gambar 4a-e, dan Gambar 5a-e.

Selain itu, dari perhitungan optimasi geometri diperoleh energi molekul yang disajikan pada Tabel 1. Hasil energi optimasi geometri menunjukkan bahwa semakin banyak pelarut yang digunakan maka energi molekul semakin kecil. Hal ini menunjukkan bahwa energi yang semakin kecil menandakan molekul atau struktur dari molekul tersebut stabil. Perbedaan energi molekul yang diperoleh dapat dipengaruhi oleh energi ikatan masing-masing molekul. Energi ikatan merupakan jumlah energi yang diperlukan untuk memutuskan molekul sebanyak satu mol menjadi atom-atom individual (Levine, 2008). Putri, dkk (2019) dalam penelitiannya menyatakan energi ikatan yang dihasilkan kuersetin dengan Caspase-3 lebih kecil dibandingkan dengan *native ligand* yang menandakan bahwa kuersetin lebih stabil jika berikatan dengan Caspase-3 dibandingkan dengan *native ligand*.

$$\Delta G = \sum G_{produk} - \sum G_{reaktan}$$

$$\Delta G = (G_{M(Solv)}^+_{n-1} + G_{Solv}) - G_{M(Solv)}^+_n$$

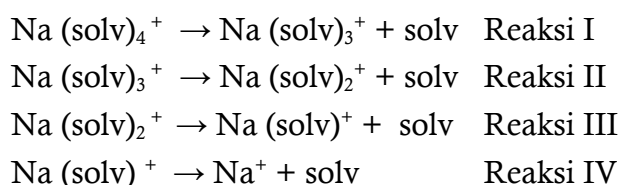
Berikut adalah reaksi antara pelarut organik (solvent) dengan Na^+ . Reaksi IV diambil dari penelitian Okoshi (2013) dan Okoshi (2016). Reaksi I, reaksi II, dan reaksi III merupakan reaksi yang mungkin bisa terjadi antara pelarut dengan Na^+ . Sehingga dari reaksi IV, kami melakukan modifikasi

Sehingga molekul yang memiliki energi lebih kecil atau rendah akan lebih stabil dibandingkan molekul yang memiliki energi lebih besar.

Energi Desolvasi

Adapun data hasil perhitungan Energi Desolvasi disajikan dalam Tabel 2 yang dihitung menggunakan energi elektronik dari masing-masing reaktan dan produk. Perhitungan energi elektronik dilakukan melalui dua tahapan kerja yaitu optimasi geometri dan optimasi frekuensi. Tahap optimasi geometri menghasilkan energi molekul sedangkan tahap optimasi frekuensi menghasilkan energi Gibbs koreksi dan energi zero. Energi Gibbs Koreksi dan Energi Zero merupakan energi yang digunakan sebagai energi koreksi pada energi molekul. Hal ini dilakukan karena pada perhitungan yang dilakukan mengabaikan suhu dan tekanan yang dapat mempengaruhi hasil dari energi molekul. Sehingga pada *script dfib.inp* tidak dicantumkan suhu dan tekanan dari sistem atau molekul. Energi bebas desolvasi dapat dihitung melalui rumus berikut (Petrucchi, dkk. 2016).

reaksi yang hasilnya adalah reaksi I, reaksi II, dan reaksi III.



Tabel 2. Energi Desolvasi Pelarut Elektrolit Organik [$\Delta G(kJ/mol)$]

Molekul	Reaksi I	Reaksi II	Reaksi III
<i>Adiponitrile</i> (APN)	-14,9653	46,9964	124,1861
<i>Acetonitrile</i> (ATN)	32,2936	60,9116	63,0120
<i>Butylene Carbonate</i> (BC)	29,1431	60,1240	103,1822
<i>Diethyl Carbonate</i> (DEC)	66,9502	23,3670	152,8041
<i>1,4-Dioxane</i> (DIO)	75,0893	63,2746	52,7726

Desolvasi merupakan pelepasan pelarut dari bahan yang ada dalam larutan. Dalam penelitian ini, pelarut yang akan lepas yaitu pelarut organik dari larutan yang terdiri dari pelarut dan ion Natrium. Kontribusi pelarut terhadap energi bebas ikatan muncul dari interaksi ikatan pelarut-pelarut dan pelarut-zat terlarut (Swain, 2022). Dalam baterai konvensional, ion yang terlarut mengalami proses desolvasi pada permukaan elektrolit padat dari elektrolit/elektroda sebelum proses interkalasi menjadi elektroda besar (bulk). Energi penghalang yang tinggi pada proses desolvasi akan menjadi penentu laju kinetik yang lambat (Chen, 2021).

Data hasil perhitungan energi desolvasi dapat dilihat pada Tabel 1. Berdasarkan data Tabel 1 dapat disimpulkan bahwa energi desolvasi masing-masing pelarut organik cenderung meningkat seiring dengan semakin banyaknya pelarut organik yang lepas ikatannya dengan Natrium. Berdasarkan hasil penelitian Okoshi (2013), energi desolvasi pelarut *adiponitrile* (APN), *acetonitrile* (ATN), *butylene carbonate* (BC), *diethyl carbonate* (DEC), dan *1,2-dioxane* (DIO) berurutan sebagai berikut 186,3 kJ/mol; 137,4 kJ/mol, 160,6 kJ/mol; 147,5 kJ/mol; dan 103,2 kJ/mol dan menggunakan reaksi yang keempat. Oleh karena itu, kecenderungan Reaksi I < Reaksi II < Reaksi III diperkuat dengan hasil dari penelitian Okoshi (2013) yang energi desolvasinya paling besar yang menggunakan Reaksi IV. Sehingga kecenderungannya akan menjadi Reaksi I < Reaksi II < Reaksi III < Reaksi IV. Energi desolvasi yang rendah menunjukkan bahwa ikatan antara Natrium dengan pelarut organik mudah lepas. Hal ini akan mempengaruhi laju terbentuknya ion-ion negatif (elektron) pada katoda. Selain itu, laju pengangkutan ion negatif (elektron)

akan lebih cepat. Elektron yang terbentuk akan menghasilkan energi listrik pada baterai dan kemudian akan mengalir ke sirkuit luar untuk digunakan pada proses *discharge* (Chen, 2021).

Berdasarkan hasil analisis data, energi desolvasi pada masing-masing pelarut organik menunjukkan adanya pengaruh yang sangat signifikan dimana berdasarkan perhitungan *two way* ANOVA pelarut elektrolit organik terhadap energi desolvasi didapatkan *rerata energi desolvasi* dengan nilai $\text{sig} < \alpha = 0,05$, maka hipotesis nol (H_0) tidak diterima, yang berarti bahwa ada pengaruh variasi reaksi pada terhadap energi desolvasi, ada pengaruh pelarut terhadap energi desolvasi, dan ada interaksi variasi reaksi dengan pelarut organik. Dari hasil uji *Post Hoc* menunjukkan terdapat pengaruh interaksi atau perlakuan pada variasi reaksi dan variasi pelarut organik. Sebelum melakukan uji *twoway* ANOVA, dilakukan uji prasyarat yaitu uji normalitas dan uji homogenitas. Hasil pada uji normalitas dengan signifikansi 5% terdistribusi normal dan pada uji homogenitas 5% menyatakan data homogen.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil dan pembahasan, jenis pelarut organik mempengaruhi energi desolvasi. Energi desolvasi masing-masing pelarut organik cenderung meningkat seiring dengan semakin banyaknya pelarut organik yang lepas ikatannya dengan Natrium. Energi desolvasi diperoleh melalui perhitungan energi elektronik dari reaktan dan produk. Energi elektronik dihitung melalui hasil optimasi geometri dan perhitungan frekuensi. Selain itu, analisis data menggunakan *Two Way* ANOVA menunjukkan bahwa masing-masing pelarut organik terdapat pengaruh yang signifikan terhadap energi desolvasi

dan diperjelas dengan uji *Post Hoc* yang menunjukkan adanya pengaruh variasi reaksi dan variasi pelarut organik.

UCAPAN TERIMA KASIH

Kami ucapkan terima kasih kepada Universitas Islam Negeri Mataram, Universitas Pertamina, dan Waseda University atas segala fasilitas yang diberikan selama melakukan penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

- Abe, T., Sagane, F., Ohtsuka, M., Iriyama, Y., & Ogumi, Z. (2005). Lithium-Ion Transfer at the Interface Between Lithium-Ion Conductive Ceramic Electrolyte and Liquid Electrolyte-A Key to Enhancing the Rate Capability of Lithium-Ion Batteries. *Journal of The Electrochemical Society*. 152(11). A2151-A2154.
- Abe, T., Fukuda, H., Iriyama, Y., & Ogumi, Z. (2004). Solvated Li-Ion Transfer at Interface Between Graphite and Electrolyte. *Journal of The Electrochemical Society*. 151(8). A1120-A1123.
- Bekaert, E., Buannic, L., Lassi, U., Llordes, A., & Salminen, J. (2017). *Emerging Nanotechnologies in Rechargeable Energy Storage System*. Boston: Elsevier.
- Chen, D. (2012). *Microscopic Investigations of Degradation in Lithium-Ion Batteries*. (Disertation). Karlsruher Institut für Technologie. German.
- Chen, J., Peng, Y., Yin, Y., Fang, Z., Cao, Y., Wang, Y., Dong, X., & Xia, Y. (2021). A Desolvation-Free Sodium Dual-Ion Chemistry for High Power Density and Extremely Low Temperature,” *Angew. Chem. Int.* 60(44). 23858-23862. <https://doi.org/10.1002/anie.202110501>
- Chou, C. P., Sakti, A. W., Nishimura, Y., & Nakai, H. (2018). Development of Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Method for Theoretical Research on Li-ion Battery. *The Chemical Record*. 18. 1-13. <https://doi.org/10.1002/tcr.201800141>
- Chris Swain., “Solvation and Desolvation,” dalam <https://www.cambridgemedchemconsulting.com/resources/solvation.html>, diakses tanggal 12 April 2022, pukul 20.20.
- Ein-Eli, Y., Mcdevitt, S. F., Aurbach, D., Markovsky, B., & Schechter, A. (1997). Methyl Propyl Carbonate: A Promising Single Solvent for Li-Ion Battery Electrolyte. *Journal of The Electrochemical Society*. 144(7). 181. <https://doi.org/10.1149/1.1837792>
- Huang, Y., Zhao, L., Li, L., Xie, M., Wu., F., & Chen, R. Electrolytes and Electrolyte/Electrode Interfaces in Sodium Ion Batteries: From Scientific Research to Practical Application. *Advanced Materials*. 31(21). 1-41. <https://doi.org/10.1002/adma.201808393>
- Levine, IN. (2008). *Physical Chemistry, Sixth Edition*. New York: McGraw-Hill.
- Mukaromah, I. (2021). *Analisis Elektrolit NaTFSA Pada Baterai Ion Natrium Dengan Metode DC-DFTB-MD*. (Skripsi). Insitut Pertanian Bogor. Bogor.
- Multazam. (2014). *Analisa Kinerja Charge/Discharge Membran Polimer Elektrolit Kitosan-Litium Pada Baterai Rechargeable*. (Tesis). Insitut Teknologi Bandung. Bandung.
- Nakai Group. (2019). *Divide and Conquer Density Functional Tight-Binding Molecular Dynamics User Manual*. Japan: Waseda University.

- Okoshi, M., Yamada, Y., Yamada, A., & Nakai, H. (2013). Theoretical Analysis on De-Solvation of Lithium, Sodium, and Magnesium Cations to Organic Electrolyte Solvents. *Journal of The Electrochemical Society*. 160 (11). A2160-A2165.
<https://doi.org/10.1149/2.074311jes>
- Okoshi, M., Yamada, Y., Komaba, S., Yamada, A., & Nakai, H. (2016). Theoretical Analysis of Interactions between Potassium Ions and Organic Electrolyte Solvents: A Comparison with Lithium, Sodium, and Magnesium Ions. *Journal of The Electrochemical Society*. 164(2). A54-A60.
<https://doi.org/10.1149/2.0211702jes>
- Oliveira, A. F., Seifert, G., Heine, T., & Duarte, H. A. (2009). Density-Functional Based Tight-Binding: An Approximate DFT Method. *Journal of the Brazilian Chemical Society*. 20 (7). 1193–1205.
<https://doi.org/10.1590/S0103-50532009000700002>
- Pranowo, HD. (2011). *Pengantar Kimia Komputasi*. Bandung: CV. Lubuk Agung.
- Putri, P. V. P., Susanti, N. M. P., & Laksmiani, N. P. L. (2019). Senyawa Kuersetin Sebagai Agen Antikanker Kolorektal Secara *in Silico*. *Jurnal Kimia (Journal of Chemistry)*. 13 (2). 166-171.
<https://doi.org/10.24843/JCHEM.2019.v13.i02.p07>
- Sakti, A. W., Nishimura, Y., Chou, C. P., & Nakai, H. (2018). Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations of Excess Proton Diffusion in Ice Ih, Ice Ic, Ice III, and Melted Ice VI Phases. *The Journal of Physical Chemistry*. 122(1). 33-40.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b10664>
- Sakti, A. W., Chou, C. P., & Nakai, H. (2020). Density-Functional Tight-Binding Study of Carbonaceous Species Diffusion on the (100)- γ -Al₂O₃ Surface. *ACS Omega*. 5(12). 6862-6871.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00203>
- Sugiyono. (2008). *Metode Penelitian Pendidikan Pendekatan Kuantitatif, Kualitatif, dan R&D*. Bandung: Alfabeta.
- Yamada, Y. (2020). Concentrated Battery Electrolytes: Developing New Functions by Manipulating the Coordination States. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*. 93(1). 109–118.
<https://doi.org/10.1246/bcsj.20190314>