

امکان استفاده از Calix[4]pyrrol بعنوان اند باتری های یون لیتیم، سدیم و پتاسیم

^۱ الهام گراوندتبار،^{۲*} حمیدرضا شاملویی، زینب بیگلری .

مشخصات نویسنده اول

^{۲*} نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه
لرستان نویسنده اول، حمیدرضا شاملویی shamlouei@gmail.com

مشخصات نویسنده دوم

۱- دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه لرستان الهام
گراوندتبار elhamtabar540@yahoo.com

مشخصات نویسنده سوم

۳- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه
لرستان زینب بیگلری، biglari@gmail.com

واژگان کلیدی: کالیکس [۴] پیرول، باتری های لیتیم، سدیم و پتاسیم

۱- مقدمه

باتری های یون سدیم بدلیل چگالی بالا، ایمنی بالا و هزینه پایین
توجه بسیاری را برای ذخیره انرژی به خود جلب کرده است. قابل پیش بینی
است که ممکن است جایگزین مناسبی برای باتری های یون لیتیمی
باشند [۱] مواد

اندی نانوساختارها که در قلب تحقیقات دستگاههای ذخیره کننده انرژی که
نیازمند سرعت و ایمنی بالا هستند قرار دارند. بنابراین شناسایی مواد مناسب
اند برای باتری های یون سدیم ضروری است. برای دستیابی به مواد مناسب
اند، نانوساختارهای سه بعدی مطلوب می باشند. مولکول هایی مانند کالیکس
ارن، کالیکس پیرول، ساختار سه بعدی و سخت دارند. حفره داخلی این مولکول
هابه راحتی می توانند اتم ها و یون ها را در خود نگه دارند که تبدیل به
گیرنده های مهم در نانوتکنولوژی، مولکول های زیستی می شوند [۲]. در این
تحقیق ما کاربرد احتمالی کالیکس [۴] پیرول را بعنوان انداتم فلزات قلیا
یی مانند لیتیم، سدیم و پتاسیم را از نظر خواص ساختاری، الکتریکی و ولتاژ
سلول بررسی می کنیم.

۲- روش

بهینه سازی ساختارها و محاسبات انرژی در سطح تئوری B3LYP/6-311G(d,p)
با محاسبات تابع دانسیته چگالی با استفاده از برنامه گوسین ۰۹ انجام
شد. اگر کالیکس [۴] پیرول را یک اندر باتری های یون لیتیم، سدیم و پتاسیم
فرض کنیم، واکنش ها در کاتد و اندر امی توان بصورت زیر نوشت:

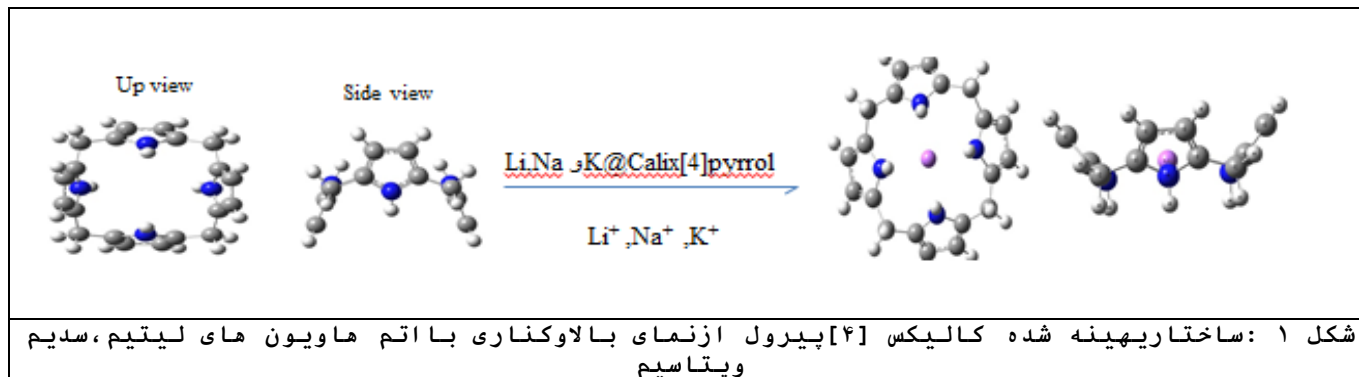
(۱) کاتد Li/Na,K

(2) کاتد

$$\text{Li/Na and K @ calix[4] pyrrol} \leftrightarrow \text{Li}^+/\text{Na}^+ \text{ and K}^+ \text{ @ calix[4]pyrrol} + \text{e}^-$$

همچنین ولتاژسلول رامیتوان با استفاده از معادله نرنست بصورت محاسبه کرد. (۳)

$$V_{Cell} = -\Delta G_{Cell}/ZF$$



جدول ۱: انرژی گپ و ولتاژسلول مولکول های طراحی شده		
Structures	Eg	Vcell(CAM-B3LYP)
Calix[4]pyridine	۸.۳۷	
Li@[4]calixpirol2	۳	۲.۶۵
Li ⁺ @calix[4]pyrrol	۶.۸۴	
Na@calix[4] pyrrol	۳.۴۲	۲.۴۹
Na ⁺ @calix[4] pyrrol	۷.۰۷	
K@calix[4] pyrrol	۲.۷۵	۱.۵۸
K ⁺ @calix[4] pyrrol	۶.۹۸	

نتایج جدول انشان میدهد که انرژی گپ در حضور اتم ها و یون ها نسبت به ساختار اولیه کاهش یافته است که موجب افزایش رسانایی می شود. باتوجه به مقدار بالای ولتاژسلول میتوان دریافت که ساختار کالیکس به خوبی می تواند نقش اندر ادبتری یون سدیمی ایفا کند.

نتیجه گری

در این تحقیق، محاسبات تابع دانسیته چگالی برای تایید امکان استفاده از کالیکس [4]پیرول انجام شد. نتایج نشان داد که انرژی گپ محاسبه شده برای گونه های اتمی و یونی فلزهای لیتیم، سدیم و پتاسیم نسبت به ساختار اولیه کاهش یافته است. این نشان میدهد که رسانای الکتریکی کالیکس [4]پیرول در حضور اتم های فلزات نامبرده بیشتر است. مقادیر ولتاژسلول بعنوان اندبتری های یون لیتیم، سدیم و پتاسیم با روش CAM-B3LY محاسبه شد. نتایج حاکی از آن است که سدیم بدلیل سمیت کم تر و در دسترس بودن در کنار کالیکس [4]پیرول میتواند بعنوان اندجایگزینی برای باتری های لیتیومی باشند.

[1] A. Soltani, A. Ahmadi Peyghan, Z. Bagheri, H2O2 adsorption on the BN and SiC

[2] S.B. Nimse, T. Kim, Biological applications of functionalized calixarenes, Chem. Soc. Rev. 42 (2013) 366–386.