

مقایسه جذب لیتیوم و منیزیم بر روی اکسیدهای فلزی با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

آمنه گنجی راد^۱، مریم حیدری دوکوهکی^۲، امین رضا ذوالقدر^{۳*}

۱: دانشجوی دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم دانشگاه شیراز، (ameneh.ganjirad@gmail.com)

۲: دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم دانشگاه شیراز، (maryamhdi5844@gmail.com)

۳ و*: پروفیسور، شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم دانشگاه شیراز، (arzolghadr@shirazu.ac.ir)

واژگان کلیدی: شبیه سازی دینامیک مولکولی، جذب سطحی، لیتیوم، اکسید فلزی

۱- مقدمه

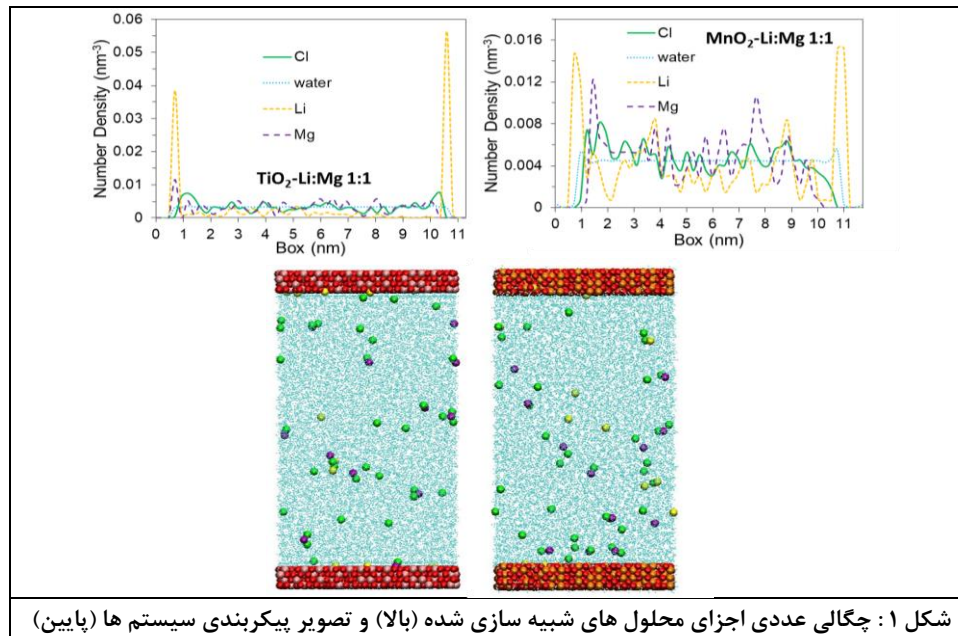
لیتیوم یک فلز ارزشمند است که به دلیل کاربرد فعلی آن در بخش ذخیره انرژی، باتری‌های لیتیوم یونی و استفاده بالقوه آن در همجوشی گرما هسته‌ای به طور گسترده شناخته شده است. لیتیوم می تواند به طور پایدار از آب تولید شده نفت و گاز با استفاده از فناوری های بازیابی لیتیوم مانند جاذب ها، فرآیندهای مبتنی بر غشاء و سیستم های مبتنی بر الکترولیز بازیابی شود (Martin, ۲۰۱۷). با توجه به اینکه در فرایند استخراج لیتیوم، یون های منیزیم بصورت یون مزاحم اثرگذار هستند مطالعات گذشته به دنبال روش هایی برای حذف این یون های مزاحم بوده اند.

۲- روش

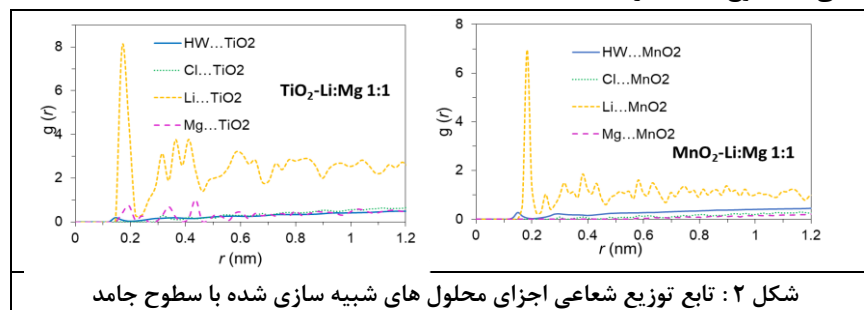
در مطالعه حاضر، بررسی مکانیزم جذب رقابتی لیتیوم نسبت به منیزیم بر روی سطوح جامد متشکل از اکسید های فلزی با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام گرفت. بدین منظور، محلول های آبی لیتیوم کلرید و منیزیم کلرید به نسبت یک به یک بین سطوح جامد MnO_2 و TiO_2 قرار گرفته و ساختار و دینامیک این سیستم ها با هم مقایسه گردید. شبیه سازی ها با استفاده از نرم افزار گرومکس و به کمک مجموعه NVT (مجموعه هم حجم- هم دما) صورت گرفت. در این مطالعات دمای سیستم ها ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع ۱,۲ نانومتر لحاظ گردید. مدت زمان شبیه سازی طی مراحل تعادل رسانی ۱۰ نانوثانیه و مراحل نهایی ۲۰ نانوثانیه بوده است.

۳- بحث

شکل ۱ (پایین) نحوه توزیع ذرات را در جعبه شبیه سازی را در پایان زمان شبیه سازی بصورت کیفی نشان می دهد. جهت مطالعه کمی نحوه چیدمان ملکول ها، از نمودارهای چگالی عددی استفاده نمودیم. همانطور که در شکل ۱ (بالا) نشان داده شده است، یون های لیتیوم به عنوان اولین لایه بر روی سطح قرار گرفته اند و سطوح جامد این یون ها را در رقابت با یون های منیزیم بیشتر جذب نموده اند.



شکل ۲ تابع توزیع شعاعی حاصل از شبیه سازی برای یون های لیتیوم، منیزیم، کلرید و آب را با سطوح نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود محتمل ترین پیک برای لیتیوم در فاصله ۰/۱۴ nm ظاهر می شود. طبق شکل یون های منیزیم برهمکنش بسیار ضعیفی با سطوح جامد دارند.



در این مطالعه جهت بررسی میزان حلالپوشی یون ها و اثر آن بر فرایند جذب، عدد کئوردیناسیون محاسبه گردید که که با توجه به جدول ۱، حلال پوشی لیتیوم از منیزیم کمتر است، یعنی لیتیوم آزاد تر از منیزیم است که نشان می دهد لیتیوم به خوبی توسط سطوح TiO_2 و MnO_2 جذب می شود.

جدول ۱: عدد کئوردیناسیون		
سیستم	Li-OW	Mg-OW
TiO_2 Li-Mg 1:1	2.6210	3.9220
MnO_2 Li-Mg 1:1	2.9959	5.9572

۴- نتیجه گیری

نتایج حاصل از شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب سطحی محلول های آبی حاوی یونهای لیتیوم و منیزیم بر روی سطوح جامد اکسید فلزی TiO_2 و MnO_2 نشان داد که در فرایند جذب سطحی یون های لیتیوم برهم کنش بیشتری با سطح جامد دارند و با توزیع بیشتری بر روی این سطوح قرار می گیرند. طی فرایند جذب یون های منیزیم به دلیل حلالپوشی بیشتر تمایل کمتری به قرارگیری روی سطح داشته و در رقابت با لیتیوم کمتر جذب سطح شدند.

منابع و مراجع

[۱] Martin, G., Rentsch, L., Höck, M., & Bertau, M. (2017). Lithium market research – global supply, future demand and price development. *Energy Storage Materials*, 6(1), 171–179.