

اثر میدان الکتریکی بر عملکرد باتری یون سدیم بر مبنای آند بور - نیتريد با استفاده از نظریه تابع چگالی

علی معلی

گروه شیمی، واحد امیدیه، دانشگاه آزاد اسلامی، امیدیه، ایران

مازیار نوعی*

گروه شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، ماهشهر، ایران

فریدون خضعلی، افسانه مالکی

گروه شیمی، واحد امیدیه، دانشگاه آزاد اسلامی، امیدیه، ایران

چکیده: در سال‌های اخیر علاقه‌مندی به سنتز و به کارگیری ساختارهای بور-نیتريد (BN) به علت دارا بودن ویژگی‌های متمایز، افزایش یافته است. از جمله این ویژگی‌ها می‌توان به دانسیته ویژه پایین، پایداری دمایی بالا، مقاومت در برابر اکسید شدن، پایداری پراکندگی بالا، نیروی برشی بین لایه‌ای بالا (در مقایسه با ساختار همپای آن، گرافن)، ظرفیت جذب بالا و پهنای باند گسترده اشاره کرد. در این پژوهش هدف اصلی این می‌باشد که با استفاده از نظریه تابع چگالی (DFT)، اثر میدان الکتریکی (EF) بر جذب اتم Na و یون Na^+ بر روی نانو صفحه BN به عنوان آند در باتری‌های سدیمی مورد بررسی قرار گرفته گیرد. نتیجه‌ها نشان دادند که جذب Na^+ بسیار قوی‌تر از Na بوده و ولتاژ سلول (V_{cell}) با افزایش میدان الکتریکی به صورت توانی افزایش می‌یابد. به شکلی که در نبود حضور میدان $V_{cell}=1/13V$ بوده و با افزایش میدان تا $1/AV$ افزایش می‌یابد که سبب ذخیره‌سازی بالای انرژی در باتری با زمان تخلیه طولانی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: آند بور-نیتريد (BN)، نظریه تابع چگالی (DFT)، میدان الکتریکی (EF)، ولتاژ سلول (V_{cell})، باتری یون سدیم

KEYWORDS: Borne nitride (BN) nanosheets, aluminum nitride (AlN), anode, DFT density theory, electric field (EF), cell voltage (V_{cell}), sodium ion battery

مقدمه

استحکام در دمای بالا، ثابت دی الکتریک کم، رسانایی گرمایی بزرگ و مقاومت در برابر اکسایش منجر به کاربردهای نهفته این ترکیب‌ها به عنوان مواد الکترونیکی شده است. ساختار هگزاگونال بور - نیتريد (h-BN)،

با ظهور ساختار گرافن، ساختار هگزاگونال دوبعدی BN (h-BN) به علت ویژگی‌های استثنایی و پتانسیل بسیار زیاد برای کاربردهای گوناگون خود مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. ویژگی‌هایی مانند ثابت و

* عهده‌دار مکاتب

+E-mail: Maziar_noei@hotmail.com

$$E_{ad} = E_{complex} - E(BN) - E_{Na\ or\ Na^+} + E_{BSSE} \quad (1)$$

که منظور از کمپلکس، نانوساختار پایانی پس از جذب Na و یا Na^+ است. از سوی دیگر وقتی دو مولکول داریم، باید خطای انطباق تابع پایه E_{BSSE} محاسبه شود.

انرژی گپ (E_g) بین سطوح HOMO و LUMO از رابطه (۲) محاسبه شد.

$$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (2)$$

سپس میزان تغییرهای E_g بعد از جذب یونهای Na و یا Na^+ بر روی نانوصفحه با استفاده از مسیر معادله (۳) محاسبه شد.

$$\Delta E_g = [(E_{g2} - E_{g1})/E_{g1}] \times 100 \quad (3)$$

نتیجه‌ها و بحث

جذب Na و Na^+ بر روی آند BN

ساختار آند BN از ۷۸ اتم B و N ساخته شد. این آنداز حلقه‌های شش ضلعی تشکیل شده و اتم‌های دورتادور آند به منظور کاهش اثرهای مرزی، با اتم‌های هیدروژن اشباع شده‌اند. دیده شده که عملکرد نانو مواد آند با روش‌هایی مانند جایگزینی اتم‌ها و یا داپ کردن برخی اتم‌ها بهبود یافته است. از آنجا که در این پژوهش اثر داپینگ اتم Al در عملکرد آند مورد بررسی قرار گرفته، لازم است که در آند BN، یکی از اتم‌های B در ساختار با اتم Al جایگزین شود. به شکلی که اتم Al با سه اتم نیتروژن پیوند داده شده است. آند با استفاده از نرم افزار گوسین با روش B3LYP/6-31G(d) بهینه سازی شد.

در شکل ۱، ساختار بهینه شده آند دارای ۱۰۲ اتم بوده که شامل اتم‌های بور، نیتروژن و هیدروژن است. پیوندهای دیده شده در این ساختار شامل پیوند بین نیتروژن و بور در حلقه‌های شش ضلعی است که هر اتم نیتروژن به سه اتم بور و هر اتم بور نیز به سه اتم نیتروژن متصل است. موقعیت اتم‌های نیتروژن و بور در ساختار بهینه شده به تقریب یکسان است. فاصله بین این دو اتم به طور میانگین برابر با $1/44 \text{ \AA}$ است. ساختار به طور کامل مسطح و بدون خمیدگی و چین خوردگی است. در انجام مدل سازی به هنگام مطالعه‌ی اثر جذب سدیم بر روی آند، Na و Na^+ در بالای حفره حلقه شش ضلعی و در بالای اتم‌های B و N قرار داده شدند که یکی از اتم‌های B حلقه موردنظر با اتم Al دوپه شده است. پس از بهینه‌سازی ساختار دیده شد که فاصله بین دو اتم N و Al در حدود $1/7 \text{ \AA}$ است. از سوی دیگر این پیوند نسبت به پیوند B و N دارای

یک توده یا پودر سفید رنگ است که ساختاری لایه‌ای مشابه به گرافن را داراست و گاهی گرافن سفید نامیده می‌شود [۱، ۲]. این ساختار به شکل متناوب از اتم‌های B و N با اوربیتال‌های sp^2 در شبکه دوجبری هگزگونال تشکیل شده است. برخلاف پیوندهای C-C به طور کامل کوالانت در گرافن، پیوندهای شیمیایی در تک لایه h-BN از خود ویژگی یونی متمایز نشان می‌دهد که منجر به پایداری شیمیایی و دمایی برتر می‌شود [۳، ۴]. فناوری نانو به خوبی توانسته بر صنعت تولید و ذخیره انرژی اثر بگذارد به طور نمونه نانوساختارها با ارائه میزان بالای عملکرد الکترون سبب پیشرفت فناوری باتری‌های یون شده‌اند [۵، ۶]. استفاده از نانوساختارها به عنوان آند سبب تسهیل انتقال کاتیون، بهبود سطح در دسترس برای کاتیون میزان می‌شود [۱۰]. امروزه باتری‌های یون لیتیم بسیار تکامل یافته اند ولی با توجه به در دسترس بودن و ارزان تر بودن یون سدیم نسبت به یون لیتیم، تمایل به استفاده از باتری‌های یون سدیم نسبت به باتری‌های یون لیتیم افزایش یافته است. همچنین باتری‌های یون سدیم در دمای محیط عملکرد خوبی را داراست. با این حال، ذخیره انرژی الکتریکی با تکرار پذیری بالا، میزان ظرفیت، چگالی انرژی و میزان شارژ و تخلیه بالا، یک مشکل چالش برانگیز در مسیر توسعه باتری های یون سدیم است که با بهره‌گیری از فناوری نانو پیشرفت‌های زیادی به خود دیده است [۱۱، ۱۳].

در سال ۲۰۱۷ میلادی گزارش شده که ولتاژ باتری یون سدیم در حضور آندهای آلومینیوم نیتريد (AlN) و BN بیش تر از SiC و گرافن است [۱۴]. همچنین در سال ۲۰۱۸ میلادی دیده شد که ولتاژ باتری یون سدیم با آند AlN در میدان $0/01 -$ افزایش یافته است [۱۵].

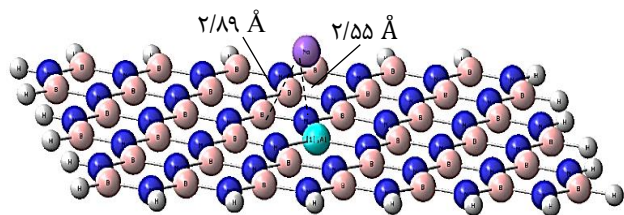
بخش نظری

در این پژوهش، کاربرد نانوصفحه Al-BN به عنوان آند در باتری یون سدیم مطالعه شده است. نخست به منظور رسم ساختارها از نرم افزار گوس و یو استفاده شده و سپس در هر بخش ساختار به وسیله نرم افزار گوسین با روش B3LYP/6-31G(d) بهینه شد. تابع پایه ۶-۳۱G(d) به منظور در نظر گرفتن اثرهای دوقطبی و برهم کنش‌های پراکنده به کار گرفته شد. در ادامه نمودارهای دانسیته حالات (DOS) انرژی، آنالیزهای اوربیتال مولکولی و محاسبه‌های انرژی توسط نرم‌افزار GaussSum به دست آمدند.

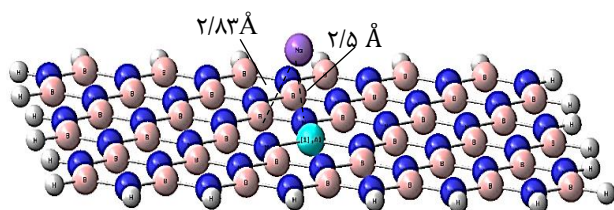
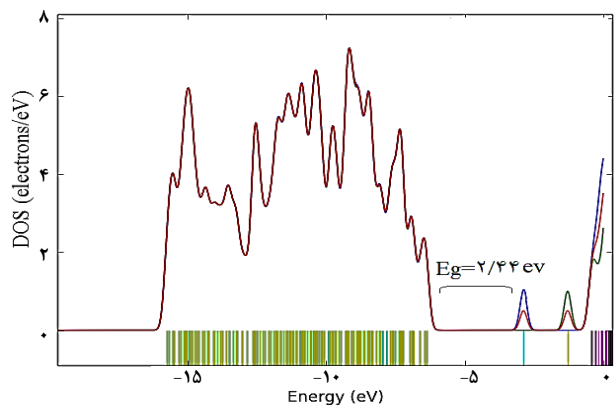
روش‌های محاسبه

انرژی جذب (E_{ad}) مربوط به Na و Na^+ از مسیر معادله (۱) محاسبه شد.

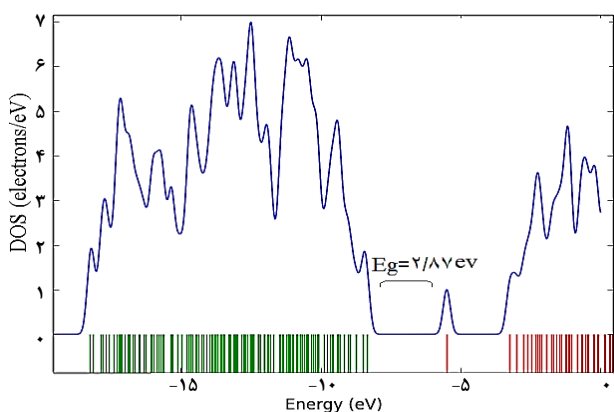
(۱) Basis set superposition error



(الف)

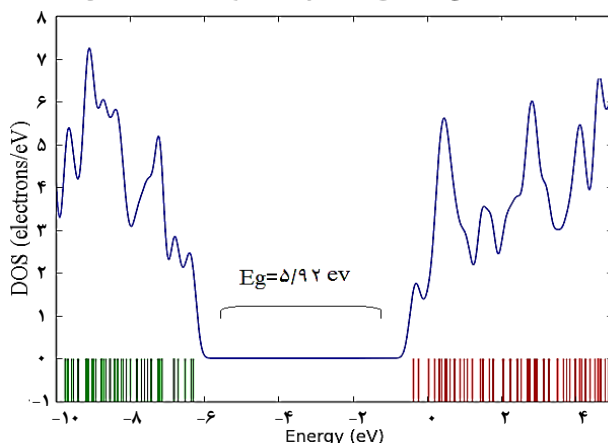
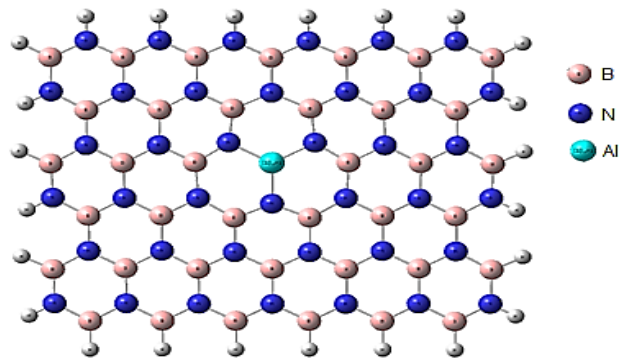


(ب)



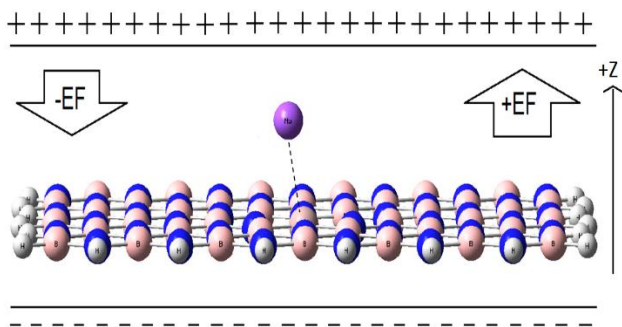
شکل ۲: ساختارهای بهینه شده و نمودارهای دانسیته حالات انرژی Al-BN بعد از جذب الف (Na) ب (Na⁺) در عدم حضور میدان

همان گونه که در شکل ۲ دیده می شود انرژی جذب Na⁺ در حدود ۱۱۲ kcal/mol و انرژی جذب Na در حدود ۲۵ kcal/mol بوده که مقدار آن نسبت به Na بزرگتر است و در نتیجه ساختار پایدارتری را به وجود آورده است. علت این پدیده می تواند این باشد که Na تمایل دارد که الکترون های ظرفیت خود را با Al و B که دارای کمبود الکترون



شکل ۱: ساختار بهینه شده و نمودار دانسیته حالت انرژی ساختار Al-BN در عدم حضور میدان

قطبیت بیشتری است که جایگاه دلخواهتری را برای برهمکنش ایجاد می کند. پس از محاسبه Na و Na⁺ جابه جا شدند و در بالای حلقه شش ضلعی قرار گرفتند. نتایج نشان می دهند که قرارگیری Na و Na⁺ در بالای حلقه شش ضلعی سبب تشکیل ساختار پایدارتری می شود که ساختار نهایی در شکل ۲ دیده می شود. فاصله ی بین اتم Na و اتم Al حلقه در حدود ۲/۵۵ Å و فاصله ی بین اتم Na و اتم N حلقه در حدود ۲/۸۹ Å بوده، فاصله بین یون Na⁺ و اتم Al حلقه در حدود ۲/۵ Å و همچنین فاصله بین یون Na⁺ و اتم N حلقه در حدود ۲/۸۳ Å می باشد. روشن است که هرچه قدر این فاصله کم تر باشد برهمکنش قوی تر بوده یا به عبارتی دیگر جذب اتم موردنظر بر روی ساختار Al-BN منجر به کمپلکس پایدارتری شده است. با توجه به این مقادیر دیده شد که جذب یون Na⁺ بر روی آند Al-BN نسبت به اتم Na بهتر صورت می گیرد. بر طبق جدول ۱، انرژی جذب Na⁺ بیش تر از Na است. در توجیه این مسئله می توان گفت که Na⁺ با جفت الکترون ناپیوندی نیتروژن وارد برهمکنش شده که سبب افزایش انرژی جذب و تشکیل ساختار پایدارتر می شود. در هر دو مورد، پس از جذب Na و Na⁺، میزان E_g آند کاهش یافته است.



شکل ۳: نمایش شماتیک از نحوه اعمال میدان

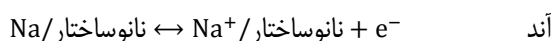
حال آن که جذب Na مکانیسم اثر متفاوتی بر ویژگی‌های الکترونیکی ساختار دارد. این مکانیسم شامل برانگیختگی الکترون جفت نشده در کمپلکس بوده و سبب ناپایداری سطح HOMO شده است.

بررسی اثر میدان

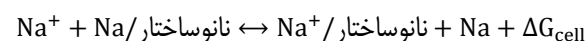
نخست میدان ± 0.1 au در راستای محور z بر ساختارها اعمال شد. این مقادارها سازگار با مقادارهای تجربی به دست آمده مربوط به جریان نشر زمینه برخی ساختارهای نانو است [۱۷]. در جدول ۱، مقادارهای انرژی جذب، سطوح HOMO و LUMO، E_g و ولتاژ باتری آورده شده است. در شکل ۳ شمایی از چگونگی اعمال میدان بر ساختار آورده شده است. از سوی دیگر با توجه به مقادارهای آورده شده در جدول ۱، می‌توان دید که جذب یون Na^+ سبب پایداری سطوح HOMO و LUMO می‌شود که این پایداری برای سطح LUMO بیش‌تر به چشم می‌آید. در سوی دیگر، جذب اتم Na رفتاری متفاوت داشته و به علت وجود تک الکترون سبب ناپایداری سطح HOMO شده است که در نتیجه آن مقدار E_g به مقدار چشمگیری کاهش داشته است. حال با بررسی انرژی‌ها می‌توان فهمید که اثر اتم Na بر روی ساختار در مسیری بوده که برای ولتاژ سل نادلخواه است. در واقع جذب قدرتمند Na^+ برای سل دلخواه‌تر است. با افزایش میدان الکتریکی، میزان انرژی جذب افزایش یافته و هم راستا با آن فاصله‌های جذب کاهش یافته اند.

در جذب Na^+ در میدان‌های منفی، مقدار عددی انرژی جذب از حدود 112 kcal/mol به حدود 162 kcal/mol افزایش یافته است. در این حالت بخشی از آند Al-BN که جذب بر روی آن صورت می‌گیرد، منفی شده و سطح مخالف بار مثبت پیدا می‌کند که در نتیجه جذب Na^+ به خوبی صورت می‌گیرد ولی در میدان مثبت سطح جذب دارای بار مثبت شده و بخش مخالف بار منفی پیدا می‌کند که در نتیجه جذب Na^+ به سختی صورت می‌گیرد و سبب کاهش مقدار عددی انرژی جذب از حدود 112 kcal/mol به حدود 99 kcal/mol شده است.

هستند، به اشتراک بگذارد ولی اتم‌های N همسایه آن‌ها نیز دارای جفت الکترون‌های غیر پیوندی بوده که مانع نزدیک شدن Na به نانوساختار می‌شوند در صورتی که Na^+ بدون هیچ مزاحمتی به سادگی با جفت الکترون‌های غیر پیوندی اتم N در نانوساختار برهم‌کنش می‌دهد. از سوی دیگر، همان‌گونه که پیش‌تر اشاره شد، به علت قطبیت و فاصله پیوند بیش‌تر بین دو اتم Al و N، جذب سدیم در فاصله‌ای نزدیک‌تر به این اتم‌ها صورت گرفته است. پارامتر مورد بررسی دیگر ولتاژ سلول است. فرض کلی در رابطه با باتری به شکل زیر است:



و معادله کلی سلول به شکل زیر است:



مقدار عددی ولتاژ سلول (V_{cell}) از معادله‌ی نرنست آورده شده که در معادله (۴) به دست می‌آید.

$$V_{\text{cell}} = -\Delta G_{\text{cell}} / zF$$

$$zF = 96/500 \text{ C/mol} \quad (4)$$

$$Z = \text{charge of } Na^+$$

که z و F ثابت‌های فارادی هستند و ΔG هم تغییرهای انرژی آزاد گیبس سلول است. در دمای ۰K، ΔG_{cell} از معادله (۵) بدست می‌آید.

$$\Delta E_{\text{cell}} = \Delta G_{\text{cell}} + P\Delta V - T\Delta S \quad (5)$$

$$\Delta E_{\text{cell}} = \Delta V_{\text{cell}}$$

و از آنجا که تنها یک الکترون از سدیم جدا می‌شود، سهم تغییرهای ΔV ، ΔS بسیار کوچک است (کم‌تر از ۰/۰۱۷)، و می‌توان سهم آن‌ها را نادیده گرفت، در نتیجه می‌توان معادله‌ی (۵) را به شکل معادله‌ی (۶) نوشت.

$$\Delta E_{\text{cell}} \approx \Delta G_{\text{cell}} = E(Na) + E(Na^+/BN) - E(Na^+) - E(Na/BN) \quad (6)$$

در شکل ۲، ساختار بهینه شده پس از جذب Na و Na^+ و نمودارهای دانسیته انرژی حالت‌ها آورده شدند که در آن انرژی‌های سطوح HOMO و LUMO نمایش داده شده است. دیده می‌شود که جذب Na و Na^+ سبب پایداری بیش‌تر سطوح HOMO و LUMO ساختار شده است که البته این پایداری در سطح LUMO بیش‌تر به چشم می‌آید.

جدول ۱: مقدارهای انرژی جذب Na و Na^+ (E_{ad} , kcal/mol) بر روی صفحه‌ی Al-BN در میدان‌های صفر و ± 0.1 au، انرژی‌های سطوح HOMO و LUMO و انرژی گپ (E_g) سطح‌های HOMO-LUMO (au)، تغییرهای E_g بعد از جذب Na/Na^+ بر روی آند Al-BN، تغییرهای انرژی درونی باتری (ΔE_{Cell} , kcal/mol) و ولتاژ باتری (V_{Cell} , V) یون سدیم در حضور آند Al-BN.

میدان (au)	ساختار	E_{ad}	E_{HOMO}	E_{LUMO}	E_g	$\% \Delta E_g$	ΔE	V_{cell}
۰	Al-BN	-	-۶/۳۰	-۰/۳۸	۵/۹۲	-	-۲۵/۹۳	۱/۱۳
	Na-Al-BN	-۲۵/۱۱	-۲/۸۸	-۰/۴۴	۲/۴۴	-۵۸/۷۸	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۱۱۲/۱۴	-۸/۳۶	-۵/۴۹	۲/۸۷	-۵۱/۵۲	-	-
-۰/۰۱	Al-BN	-	-۶/۲۰	-۰/۳۷	۵/۸۳	-	-۴۳/۰۲	۱/۸۷
	Na-Al-BN	-۸۹/۱۰	-۳/۱۸	-۲/۶۳	۰/۵۵	-۹۰/۵۷	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۱۶۲/۱۰	-۶/۰۹	-۵/۷۳	۰/۶۳	-۹۳/۸۳	-	-
+۰/۰۱	Al-BN	-	-۶/۲۰	-۰/۴۰	۵/۸۰	-	-۱۸/۹۰	۰/۸۲
	Na-Al-BN	-۳۶	-۲/۹۵	-۲/۵۶	۰/۳۹	-۹۳/۲۸	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۹۹/۱۶	-۶/۱۶	-۵/۴۵	۰/۷۱	-۸۷/۷۶	-	-

جدول ۲: مقدارهای انرژی جذب Na و Na^+ (E_{ad} , kcal/mol) بر روی آند Al-BN در میدان‌های الکتریکی منفی، انرژی‌های سطوح HOMO و LUMO و انرژی گپ (E_g) سطح‌های HOMO-LUMO (au)، تغییرهای E_g بعد از جذب Na/Na^+ بر روی آند Al-BN، تغییرهای انرژی درونی باتری (ΔE_{Cell} , kcal/mol) و ولتاژ باتری (V_{Cell} , V) یون سدیم در حضور آند Al-BN.

میدان (au)	ساختار	E_{ad}	E_{HOMO}	E_{LUMO}	E_g	$\% \Delta E_g$	ΔE	V_{cell}
۰/۰۰۲	Al-BN	-	-۶/۳۰	-۰/۳۹	۵/۹۱	-	-۲۳/۹۶	۱/۰۴
	Na-Al-BN	-۶۴/۱۴	-۲/۸۷	-۲/۱۱	۰/۷۶	-۸۷/۱۴	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۱۵۶/۱۴	-۶/۶۴	-۵/۴۴	۱/۲۰	-۷۹/۷۰	-	-
۰/۰۰۴	Al-BN	-	-۶/۲۷	-۰/۳۹	۵/۸۸	-	-۲۶/۹۶	۱/۰۰
	Na-Al-BN	-۵۴/۱۲	-۲/۸۵	-۱/۶۳	۱/۲۲	-۷۹/۲۵	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۱۴۹/۱۲	-۷/۱۲	-۵/۴۵	۱/۶۷	-۷۱/۶۰	-	-
۰/۰۰۶	Al-BN	-	-۶/۳۰	-۰/۳۸	۵/۹۲	-	-۲۸/۹۶	۱/۲۶
	Na-Al-BN	-۴۸/۱۱	-۲/۸۵	-۱/۱۵	۱/۷۰	-۷۱/۲۸	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۱۳۸/۱۱	-۷/۵۹	-۵/۴۶	۲/۱۳	-۶۴/۰۲	-	-
۰/۰۰۸	Al-BN	-	-۶/۳۰	-۰/۳۸	۵/۹۲	-	-۳۳/۹۶	۱/۴۸
	Na-Al-BN	-۳۹/۱۱	-۲/۸۵	-۰/۷۱	۲/۱۴	-۶۳/۸۵	-	-
	Na^+ -Al-BN	-۱۲۴/۱۱	-۸/۰۵	-۵/۴۷	۲/۵۸	-۵۶/۴۲	-	-

به حدود kcal/mol ۳۶- تغییر یافته است.

در جدول ۲، نتیجه‌های مربوط به بررسی ساختارها در میدان‌های منفی au ۰/۰۰۲، ۰/۰۰۴، ۰/۰۰۶ و ۰/۰۰۸ آورده شده است. دیده می‌شود که در میدان‌های قوی‌تر، جذب یون Na^+ به میزان زیادی افزایش یافته است. همچنین وجود میدان‌های قوی‌تر تا حدودی سبب قدرت بخشیدن به جذب اتم Na و کاهش فواصل جذب نیز شده است. به تبع افزایش قدرت جذب یون Na^+ ، مقدار ولتاژ باتری نیز افزایش یافته است. از آنجا که انرژی یون سدیم در آند منفی تر از کاتد است مقدارهای ولتاژ سلول، مثبت به دست آمده‌اند. همچنین با افزایش میدان الکتریکی (EF) منفی، مقدار ولتاژ سلول به صورت توانی افزایش یافته است.

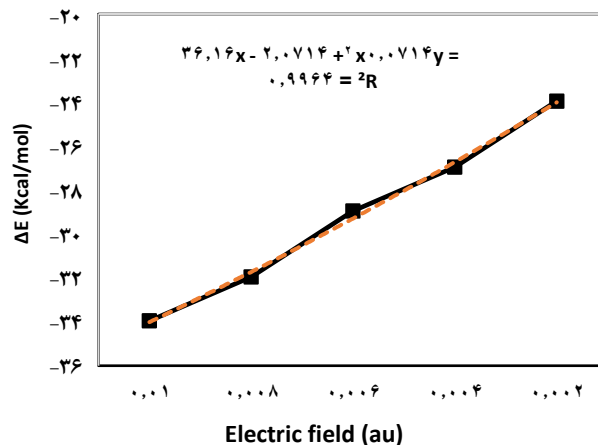
در سوی دیگر، به هنگام جذب Na، در میدان منفی بار روی سطح جذب افزایش می‌یابد. دو مسیر در هنگام جذب دنبال می‌شود، از یک سو انتقال بار از Na به آند انجام می‌گیرد، از سوی دیگر، اتم Na قطبی و جایگاه جذب مثبت شده و برهمکنش الکتروستاتیک بین آند و Na رخ می‌دهد. در میدان‌های گواگون برآیند عمل این دو مسیر متفاوت هستند. با نگاه به جدول ۲، می‌توان دید که در میدان‌های ضعیف‌تر انتقال بار بیش‌تر رخ داده و جذب ضعیف‌تر انجام می‌گیرد در حالی که در میدان‌های قوی‌تر با غلبه برهمکنش الکتروستاتیک بر انتقال بار، جذب قوی‌تر انجام می‌گیرد و در نتیجه دیده می‌شود که در میدان‌های منفی مقدار عددی انرژی جذب از حدود kcal/mol ۲۵- به حدود kcal/mol ۸۹- و در میدان‌های مثبت

باتوجه به نمودارهای ۴ و ۵، می‌توان گفت یک رابطه توانی بین افزایش میدان الکتریکی با ولتاژ سلول و تغییرهای انرژی درونی باتری وجود دارد.

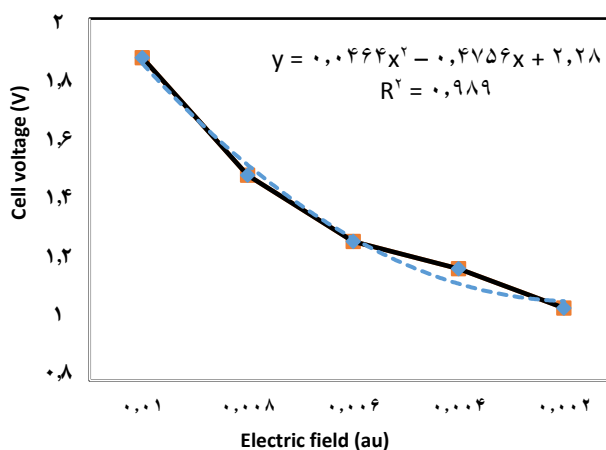
نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از محاسبات DFT، جذب Na و Na⁺ بر آند BN بررسی شد. در بخش اول کار بخست صفحه BN بهینه شد. سپس اتم Al بر روی آند دوپه شده و در سطح B3LYP/6-31G(d) بهینه سازی انجام شد. در مرحله بعد Na و Na⁺ در بالای آن قرار داده شد و مرحله بهینه سازی تکرار شد. در ادامه دیده شد که هر دو Na و Na⁺ در بالای اتم نیتروژن حلقه‌ی شش‌تایی جذب شدند. با توجه به جدول‌ها، جذب Na⁺ بسیار قوی‌تر از Na است. نتیجه‌ها نشان داد که با افزایش میدان، میزان قدرت جذب Na و Na⁺ بر روی Al-BN افزایش می‌یابد. این افزایش قدرت جذب در جذب Na⁺ بیش‌تر دیده می‌شود. می‌توان نتیجه گرفت که برهمکنش Na⁺ نسبت به Na بسیار دلخواه‌تر انجام شده است و همچنین ولتاژ سلول، با افزایش میدان به صورت توانی افزایش یافت به شکلی که در میدان الکتریکی ۰/۰۱ au - میزان ولتاژ سلول به میزان ۰/۷۴۷V افزایش یافته که کارایی بیش‌تر باتری را نشان می‌دهد. با استناد به نتیجه‌های این پژوهش می‌توان نانوصفحه‌های Al-BN را به عنوان گزینه‌ای مناسب برای آند باتری‌های سدیم پیشنهاد کرد.

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸، ۰۶، ۲۲ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸، ۰۹، ۱۱



شکل ۴: نمودار تغییرهای انرژی درونی باتری یون سدیم برحسب میدان‌های الکتریکی



شکل ۵: نمودار ولتاژ باتری یون سدیم برحسب میدان

مراجع

- [1] Mohajeri S., Noei M., Molaei N., Cyanogen, Methylacetylene, Hydroquinone, Ethylacetylene, Aniline, Pyrrole, and Ethanol Detection by Using BNNT: DFT Studies. *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCE)*, **36**(5): 89-98 (2017).
- [2] Mohajeri S., Noei M., Salari A., Hoseini Z., Ahmadaghaei N., Molaei N., Adsorption of Phosphine on a BN Nanosurface. *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCE)*, **37**(1): 39-45 (2018)
- [3] Yousefi N., Pazouki M., Alikhani H F., Alizadeh M., Statistical Evaluation of the Pertinent Parameters in Biosynthesis of Ag/MWf-CNT Composites Using Plackett-Burman Design and Response Surface Methodology, *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCE)*, **35**(2): 51-62 (2016).
- [4] Noei M., Different Electronic Sensitivity of BN and AlN Nanoclusters to SO₂ Gas: DFT Studies, *Vacuum*, **135**: 44-49 (2017).

- [5] Ahmadi R., Salmaniha M., Investigation of Chemical Properties in Fullerene Derivatives of Fluoxetine Drug: A DFT Study, *Int. J. New Chemistry. (IJNC)*, **1**(4):152-160 (2015).
- [6] Noei M., Arjmand M., Removal of Cyanogen Toxic Gas from Environmental Systems by Using BN Nanosheet, *Indian Journal of Fundamental and Applied Life Sciences(JLS)*, **5**(S1): 5074-5080 (2015).
- [7] Najafpour J., Salari A A., Zonouzi F., The Conformational Effect of 6-Mono-Substituted and 6,7-Di-Substituted Derivatives of 5,6,7,8-Tetrahydrodibenzo[a,c] Cyclo-octene on ¹³C Chemical Shift, *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **34**(4): 1-11 (2015).
- [8] Soltani A., Ahmadian N., Kanani Y., Dehnokhalaji A A., Mighani H., *Ab Initio* Investigation of the SCN⁻ Chemisorption of Single-Walled Boron Nitride Nanotubes, *Appl. Surf. Sci.*, **258**(24): 9536-9543 (2012).
- [9] Noei M., Ahmadaghaei N., Salari A A., Ethyl Benzene Detection by BN Nanotube: DFT Studies, *Journal of Saudi Chemical Society*, **21**: S12-S16 (2017).
- [10] Eid Kh.M., Ammar Y.H., Adsorption of SO₂ on Li Atoms Deposited on MgO (1 0 0) Surface: DFT Calculations, *Appl. Surf. Sci.*, **257**(14): 6049-6058 (2011).
- [11] Noei M., Different Electronic Sensitivity of BN and AlN Nanoclusters to SO₂ Gas: DFT Studies, *Vacuum*, **135**: 44-49 (2017).
- [12] Hongmei J., Shuqin W., Wenfang D., Youming Z., Youming T., Qingji X., Ming Ma., Graphene-Like Carbon Nanosheets as a New Electrode Material for Electrochemical Determination of Hydroquinone and Catechol, *Talanta*, **164**:300-306 (2017).
- [13] Noei M., Asadi H., Salari A A., Mahjoob M R., Adsorption of Pyridine by Using BN Nanotube: A DFT study, *Indian Journal of Fundamental and Applied Life Sciences*, **4**(2): 679-685 (2014).
- [14] Lin X S., Chen D Q., Zhong B., Yang J L., Purification of Yard-Glass Shaped Boron Nitride Nanotubes, *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **33**(1): 29-36 (2014).
- [15] Sarma J.V.N., Rahman A., Jayaganthan R ., Rjab C ., Haranath D., Al-Doped ZnO Nanostructured Thin Films: Density Functional Theory and Experiment, *Int. J. Nanosci.*, **14**(4): 1550015-1550028 (2015).
- [16] Peygan A.A., Hadipour N L., Bagheri Z., Effects of Al Doping and Double-Antisite Defect on the Adsorption of HCN on a BC₂N Nanotube: Density Functional Theory Studies, *J. Phys. Chem. C*, **117**(5): 2427-2432 (2013).
- [17] Shokuhi Rad A., First Principles Study of Al-Doped Graphene as Nanostructure Adsorbent for NO₂ and N₂O:DFT Calculations, *Applied Surface Science*, **357**(A): 1217-1224 (2015).
- [18] Eid Kh.M., Ammar Y H., A Density Functional Study of NO₂ Adsorption on Perfect and Defective MgO (1 0 0) and Li/MgO (1 0 0) Surfaces, *Appl. Surf. Sci.*, **258**(19): 7689-7698 (2012).

- [19] Eid Kh.M., Taha H O., Kamal M A., Ashour A E., Abdel Halim W S., [DFT Calculations of the CO Adsorption on Mn, Fe, Co, and Au Deposited at MgO \(1 0 0\) and CdO \(1 0 0\)](#), *Appl. Surf. Sci.*, **258**(24): 9876-9890 (2012).
- [20] Peyghan A.A., Noei M., Yourdkhani S., [Al-Doped Graphene-Like BN Nanosheet as a Sensor for Para-Nitrophenol: DFT Study](#), *Superlattices and Microstructures*, **59**: 115-122 (2013).
- [21] Naseri A., Barati R., Rasoulzadeh F., Bahram M., [Studies on Adsorption of Some Organic Dyes from Aqueous Solution onto Graphene Nanosheets](#), *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **34** (2): 51-60 (2015)
- [22] Karimi P., [Effects of Structure and Partially Localization of the \$\pi\$ Electron Clouds of Single-Walled Carbon Nanotubes on the Cation- \$\pi\$ Interactions](#), *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **35**(3): 35-43 (2016).
- [23] Peyghan A.A., Noei M., [Electronic Response of nano-Sized Cages of ZnO and MgO to Presence of Nitric Oxide](#), *Chinese Journal of Chemical Physics*, **26**(2): 231-236 (2013).