

ภาพปก อันทรบุตร : การศึกษาบทบาทของการแทรกไฮโดรเจนในการเพิ่มประสิทธิภาพทางเคมีไฟฟ้าของแคโทดวาเนเดียมเพนทอกไซด์ สำหรับแบตเตอรี่ชนิดแมกนีเซียมไอออน โดยวิธีเฟิร์สพริ้นซิเพิล (UNRAVELING THE ROLE OF HYDROGEN INSERTION IN ENHANCING ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE OF VANADIUM PENTOXIDE CATHODE FOR MAGNESIUM-ION BATTERIES: A FIRST-PRINCIPLES STUDY)

อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 111 หน้า.

คำสำคัญ: อิเล็กโทรไลต์ที่เป็นน้ำ วาเนเดียมเพนทอกไซด์ ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น การคำนวณหลักการแรก แบตเตอรี่ชนิดแมกนีเซียมไอออน การแทรกไฮโดรเจน

วิทยานิพนธ์นี้ได้ดำเนินการคำนวณโดยวิธีหลักการแรก อาศัยระเบียบวิธีทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น เพื่อศึกษาผลกระทบของการแทรกไฮโดรเจน ต่อการนำไฟฟ้า จลนศาสตร์การแพร่กระจายของแมกนีเซียม และความเสถียรของโครงสร้างตามการแทรกสอดของแมกนีเซียม ในโครงสร้างขั้วไฟฟ้าแคโทดแบบวาเนเดียมเพนทอกไซด์ ผลลัพธ์แสดงให้เห็นว่าการแทรกไฮโดรเจน ที่ความเข้มข้นสูงในโครงสร้างวาเนเดียมเพนทอกไซด์ ทำให้ช่องว่างของแถบพลังงานลดลงอย่างเห็นได้ชัด และค่าการนำไฟฟ้าทางอิเล็กทรอนิกส์ของวัสดุวาเนเดียมเพนทอกไซด์เพิ่มขึ้นอย่างมาก โดยไฮโดรเจนที่ใส่เข้าไปสามารถทำหน้าที่เป็นตัวพาประจุ ซึ่งช่วยเพิ่มความจุของแคโทดได้อย่างมีประสิทธิภาพ จลนพลศาสตร์ของการแพร่ของไฮโดรเจน นั้นเร็วกว่ามากเมื่อเทียบกับแมกนีเซียม ในระหว่างการคายประจุ คาดว่าแคโทดจะมีความเข้มข้นสูงของไฮโดรเจน ก่อนการแทรกแมกนีเซียม โครงสร้างไฮโดรเจนที่ใส่ไว้ล่วงหน้าจะช่วยเร่งการแพร่กระจายของแมกนีเซียม โดยการลดอุปสรรคการแพร่จาก 0.93 เป็น 0.23 eV นอกจากนี้ แคโทดวาเนเดียมเพนทอกไซด์ที่ถูกโปรตอนเติมเต็มจะยับยั้งการเปลี่ยนเฟสแอลฟาเป็นเฟสเดลตา ซึ่งเป็นเฟสที่ไม่สามารถย้อนกลับได้ อย่างมีประสิทธิภาพ ซึ่งถือเป็นสาเหตุหลักของความจุที่ลดลงในแบตเตอรี่ จลนพลศาสตร์การขนส่งไอออนที่ดีขึ้นและการยับยั้งการเปลี่ยนเฟสเกิดขึ้นจากปฏิกิริยาระหว่างไฟฟ้าสถิตที่อ่อนลงระหว่างแมกนีเซียมไอออน และวาเนเดียมเพนทอกไซด์ เมื่อแทรกไฮโดรเจน การค้นพบที่สำคัญเหล่านี้ให้ข้อมูลเชิงลึกที่มีคุณค่าสำหรับการออกแบบกลยุทธ์เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพทางเคมีไฟฟ้าของแคโทดวาเนเดียมเพนทอกไซด์ในแบตเตอรี่ชนิดแมกนีเซียมไอออน

สาขาวิชาฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2566

ลายมือชื่อนักศึกษา ภกษณว.

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา สุวิทย์ สุธีรากุล

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม อึ้งโง

