

ลาภวัต งามวงศ์วาน : การคัดกรองวัสดุเอ็มบีบีด้วยวิธีการคำนวณสำหรับใช้เป็นวัสดุแอโนดของแบตเตอรี่ชนิดโลหะไอออน (COMPUTATION TATIONAL SCREENING OF MBENES AS ANODE MATERIALS OF METAL-ION BATTERIES).

อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 126 หน้า.

คำสำคัญ: แบตเตอรี่ชนิดโลหะไอออน วัสดุสองมิติ โลหะทรานซิชันโบโรด์ ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น โลหะทรานซิชัน

โลหะทรานซิชันโบโรด์แบบสองมิติหรือเอ็มบีบีเป็นวัสดุที่มีศักยภาพสูงสำหรับใช้เป็นแอโนดในแบตเตอรี่ชนิดโลหะไอออน เนื่องจากมีคุณสมบัติในการนำไฟฟ้าที่ดีและโครงสร้างที่สามารถปรับแต่งได้ อย่างไรก็ตามงานวิจัยที่ผ่านมาเน้นเพียงองค์ประกอบ วัสดุภาค และโลหะไอออนบางกลุ่มเท่านั้น โดยขาดการเปรียบเทียบอย่างเป็นระบบและครอบคลุมกลุ่มโลหะทรานซิชันทั้งหมด งานวิจัยนี้จึงนำเสนอการศึกษาคัดกรองเชิงคำนวณอย่างเป็นระบบของวัสดุเอ็มบีบี M_2B_2 โดย M คือโลหะทรานซิชัน ภายใต้วัสดุภาค ได้แก่ ออร์โธโรมบิก เฮกซะโกนัล ไตรโกนัล และเตตระโกนัล โดยอาศัยทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น และแบบจำลองเชิงอธิบายด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง เพื่อวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างกับคุณสมบัติเชิงฟิสิกส์และเคมีไฟฟ้า โดยกระบวนการคัดกรองเบื้องต้นซึ่งพิจารณาความเสถียรทางโครงสร้าง การเคลื่อนที่ได้เร็วของอิเล็กตรอนและโลหะไอออนสามารถลดจำนวนวัสดุที่มีคุณสมบัติเหมาะสมไว้เพียงครึ่งหนึ่ง จากนั้นจึงประเมินคุณสมบัติเคมีไฟฟ้าเพิ่มเติม ได้แก่ ความจุจำเพาะและแรงดันไฟฟ้าเปิดวงจร ซึ่งนำไปสู่วัสดุที่มีศักยภาพ 2 กลุ่ม ได้แก่ (1) วัสดุออร์โธโรมบิกและเฮกซะโกนัลของ Sc, Ti และ Y ซึ่งให้ความจุสูงและแรงดันไฟต่ำ และ (2) วัสดุไตรโกนัลและเตตระโกนัลของ V, Cr, Mn และ Fe ซึ่งแม้มีความจุต่ำกว่าเล็กน้อย แต่โลหะไอออนเคลื่อนที่ได้เร็วเหมาะสำหรับการประจุไฟฟ้าเร็ว โดย Mn และ Fe ยังมีข้อได้เปรียบด้านต้นทุนราคาอีกด้วย นอกจากนี้ แบบจำลองเชิงอธิบายด้วยการเรียนรู้ของเครื่องยังช่วยให้เข้าใจความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างและสมบัติเชิงประสิทธิภาพได้มากขึ้น โดยเฉพาะในแง่ของพลังงานยึดเหนี่ยวและแรงดันไฟฟ้า ผลลัพธ์จากงานวิจัยนี้ชี้ให้เห็นถึงศักยภาพของวัสดุ M_2B_2 สำหรับการพัฒนาแอโนดแบตเตอรี่ชนิดโลหะไอออนในอนาคต และยังนำเสนอชุดข้อมูลและชุดความเข้าใจที่มีประโยชน์ต่อแนวทางการออกแบบวัสดุอย่างมีหลักการ

สาขาวิชาฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2568

ลายมือชื่อนักศึกษา ลาภวัต งามวงศ์วาน

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Dr. Suwit

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม Dr. Su.

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม M. Atrith

LAPPAWAT NGAMWONGWAN : COMPUTATIONTATIONAL SCREENING OF MBENES
AS ANODE MATERIALS OF METAL-ION BATTERIES.

THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 126 PP.

Keyword: Metal-ion batteries, 2D materials, Transition metal borides (MBenes),
Density functional theory (DFT), Transition metal

Two-dimensional transition metal borides (MBenes) have emerged as promising anode materials for metal-ion batteries due to their intrinsic conductivity and structural tunability. However, most existing studies focus on a limited set of compositions, phases, and charge carriers, lacking a systematic and comparable assessment across the full transition metal series. To address this gap, this thesis presents a comprehensive computational screening of M_2B_2 monolayers, where M spans 26 transition metals across four crystal phases, using density functional theory. A consistent computational framework, combined with interpretable machine learning, was employed to evaluate structural, electronic, and electrochemical properties. Pre-screening based on cohesive energy, phonon stability, electronic conductivity, and ion diffusion narrowed the candidate pool by half. Further electrochemical analysis identified two promising groups: (1) Sc-, Ti-, and Y-based phases with high gravimetric capacity and low open-circuit voltage (OCV); and (2) V-, Cr-, Mn-, and Fe-based phases with low diffusion barriers and moderate OCVs. Interpretable ML models were used to better understand the structure–property relationships governing cohesive energy and OCV, revealing key performance descriptors. These findings demonstrate the potential of M_2B_2 MBenes for next-generation battery anodes and provide data-driven guidelines for their rational design.

School of Physics
Academic Year 2025

Student's Signature ลพาวาท นงมวงวาน
Advisor's Signature Assoc. Prof. Suwit Suthirakun
Co-Advisor's Signature Dr. ...
Co-Advisor's Signature M. ...