

ภานุพล อันธรบุตร : การศึกษาบทบาทของการแทรกไฮโดรเจนในการเพิ่มประสิทธิภาพทางเคมีไฟฟ้าของแคลโนดวานเดียมเพนทอกไซด์ สำหรับแบตเตอรี่ชั้นนำแมกนีเซียมไอออน โดยวิธีเฟิร์สท์พรินซิเพล (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 วานเดียมเพนทอกไซด์ ทฤษฎีฟังก์ชันอลความหนาแน่น การคำนวนหลักการแรก แบตเตอรี่ชั้นนำแมกนีเซียมไอออน การแทรกไฮโดรเจน

วิทยานิพนธ์นี้ได้ดำเนินการคำนวนโดยวิธีหลักการแรก อาศัยระเบียบวิธีทฤษฎีฟังก์ชันอลความหนาแน่น เพื่อศึกษาผลกระทบของการแทรกไฮโดรเจน ต่อการนำไปใช้ จนศาสตร์การแรร์กระจาจของแมกนีเซียม และความเสถียรของโครงสร้างตามการแทรกสอดของแมกนีเซียม ในโครงสร้างข้าไฟฟ้าแคลโนดแบบวานเดียมเพนทอกไซด์ ผลลัพธ์แสดงให้เห็นว่าการแทรกไฮโดรเจน ที่ความเข้มข้นสูงในโครงสร้างวานเดียมเพนทอกไซด์ ทำให้ช่องว่างของແບพลังงานลดลงอย่างเห็นได้ชัด และค่าการนำไปใช้ทางอิเล็กทรอนิกส์ของวัสดุวานเดียมเพนทอกไซด์เพิ่มขึ้นอย่างมาก โดยไฮโดรเจนที่ใส่เข้าไปสามารถทำหน้าที่เป็นตัวพาประจุ ซึ่งช่วยเพิ่มความจุของแคลโนดได้อย่างมีประสิทธิภาพ จนผลศาสตร์ของการแรร์ของไฮโดรเจน นั้นเร็วว่ามากเมื่อเทียบกับแมกนีเซียม ในระหว่างการคายประจุ คาดว่าแคลโนดจะมีความเข้มข้นสูงของไฮโดรเจน ก่อนการแทรกแมกนีเซียม โครงสร้างไฮโดรเจนที่ใส่ไว้ล่วงหน้าจะช่วยเร่งการแรร์กระจาจของแมกนีเซียม โดยการลดอุปสรรคการแรร์จาก 0.93 เป็น 0.23 eV นอกจากนี้ แคลโนดวานเดียมเพนทอกไซด์ที่ถูกโปรตอนเติมเต็มจะยับยั้งการเปลี่ยนเฟสแอลฟ้าเป็นเฟสเดลตา ซึ่งเป็นเฟสที่ไม่สามารถย้อนกลับได้ อย่างมีประสิทธิภาพ ซึ่งถือเป็นสาเหตุหลักของความจุที่ลดลงในแบตเตอรี่ จนผลศาสตร์การขนส่งไอออนที่ดีขึ้นและการยับยั้งการเปลี่ยนเฟสเกิดขึ้นจากปฏิกิริยาระหว่างไฟฟ้าสถิตที่อ่อนลงระหว่างแมกนีเซียมไอออน และวานเดียมเพนทอกไซด์ เมื่อแทรกไฮโดรเจน การคันพบรที่สำคัญเหล่านี้ให้ข้อมูลเชิงลึกที่มีคุณค่า สำหรับการออกแบบกลยุทธ์เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพทางเคมีไฟฟ้าของแคลโนดวานเดียมเพนทอกไซด์ในแบตเตอรี่ชั้นนำแมกนีเซียมไอออน

สาขาวิชาฟิสิกส์  
ปีการศึกษา 2566

ลายมือชื่อนักศึกษา กานุน.  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา พงษ์พันธุ์ นุรักษ์กุล  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม อิทธิยาดา

PANUPOL UNTARABUT : UNRAVELING THE ROLE OF HYDROGEN INSERTION IN  
ENHANCING ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE OF VANADIUM PENTOXIDE  
CATHODE FOR MAGNESIUM-ION BATTERIES: A FIRST-PRINCIPLES STUDY.  
THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 111 PP.

Keyword: Aqueous electrolyte, Vanadium pentoxide, density functional theory, first principles calculation, Magnesium-ion batteries, Hydrogen insertion

In this thesis, we conducted first-principles computations to study the effects of hydrogen (H) insertion on electronic conductivity, magnesium (Mg) diffusion kinetics, and structural stability upon Mg intercalation. Our findings demonstrate that the insertion of H at high concentrations leads to a remarkable reduction in the band gap and a substantial increase in the electronic conductivity of the vanadium pentoxide ( $V_2O_5$ ) material. This inserted H can act as a charge carrier, effectively enhancing the cathode's capacity. Moreover, we observed that the transport kinetics of H are significantly faster compared to Mg. During discharge, it is expected that the cathode will contain a high concentration of H before Mg intercalation. The pre-inserted H structure accelerates the Mg diffusion by lowering the diffusion barrier from 0.93 to 0.23 eV. Additionally, a fully protonated  $V_2O_5$  cathode effectively suppresses the irreversible alpha to delta phase transition, which is considered the main cause of capacity fading in these batteries. The improved ion transport kinetics and the suppression of phase transformation arise from the weakened electrostatic interaction between the Mg-ion and the lattice oxygen upon H insertion. These significant findings provide valuable insights for the rational design of strategies to enhance the electrochemical performance of  $V_2O_5$  cathodes in Mg-ion batteries. By leveraging this knowledge, we can move closer to unlocking the full potential of Mg-ion batteries as a promising energy storage solution.

School of Physics  
Academic Year 2023

Student's Signature นิศา.  
Advisor's Signature สุวิท สุทธิรักun  
Co-Advisor's Signature ณัฐกานต์