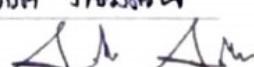


ลากวัด งานวิจัย : การศึกษาบทบาทของการเจือดีบุกต่อการเพิ่มความนำไฟฟ้าของข้าว
แคโทไดวนเดียมเพนทอกไซด์สำหรับแบตเตอรี่ชานิคอลิเชิญไฮอ่อน โดยการจำลองระดับ
อะตอม (ROLE OF TIN DOPING ON THE IMPROVED CONDUCTIVITY OF
VANADIUM PENTOXIDE CATHODE FOR LI-ION BATTERIES: AN ATOMISTIC
MODEL) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธิรากุล, 130 หน้า.

วิทยานิพนธ์นี้ใช้ระบบวิธีการคำนวณบนพื้นฐานของทฤษฎี DFT + U ร่วมกับระบบ
สมการทางสถิติในการศึกษาบทบาทของการเจือดีบุกต่อการเพิ่มความนำไฟฟ้าของข้าวแคโท
ไดวนเดียมเพนทอกไซด์สำหรับแบตเตอรี่ชานิคอลิเชิญไฮอ่อน โดยการเกิดของบวกพร่องแบบจุดทั้งที่
เกิดจากตัววัสดุเองและเกิดการเจือด้วยดีบุกได้ถูกศึกษาอย่างเป็นระบบ จากนั้นระบบสมการทาง
สถิติได้ถูกนำมาใช้เพื่อคาดคะเนความเข้มข้นของข้อบกพร่องแบบจุดและพาหะตัวกลาง ณ สถานะ
สมดุลภายในได้เงื่อนไขความเป็นกลางทางไฟฟ้าของวัสดุ จากผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าเมื่อมีการ
เจือดีบุกนั้นการเกิดดีบุกแทนที่หมู่ว่าแนวตั้งนั้นเป็นข้อบกพร่องชนิดที่เกิดขึ้นมากที่สุด และการนำ
ของอิเล็กตรอนถูกทำให้เกิดขึ้นได้ผ่านกระบวนการการเคลื่อนที่ของโพลารอนที่เกิดขึ้นพร้อมกับ
ข้อบกพร่องดังกล่าวหากโพลารอนนั้นสามารถถูกนักจากแรงดึงดูดของข้อบกพร่องดังกล่าวได้
เมื่อเปรียบเทียบการเคลื่อนที่ของโพลารอนในวัสดุที่ไม่มีการเจือดีบุก พบว่าการเจือดีบุกมีบทบาท
สำคัญในการเพิ่มความเข้มข้นของโพลารอนที่ถูกขัดไว้ในข้อบกพร่องผ่านการเกิดข้อบกพร่องดีบุก
แทนที่หมู่ว่าแนวตั้ง อีกทั้งดีบุกยังช่วยให้โพลารอนเหล่านั้นสามารถเคลื่อนที่ออกจากบริเวณ
ศูนย์กลางของข้อบกพร่องได้ง่ายขึ้น หรือพูดอีกนัยหนึ่งว่าการที่อะตอมดีบุกเข้าไปแทนหมู่ว่าแนวตั้ง
นั้นช่วยลดอันตรายร้ายแรงที่ศูนย์กลางของข้อบกพร่องแบบจุดกับโพลารอนที่ถูกขัดไว้ ส่งผลให้
จำนวนพาหะตัวกลางในระบบเพิ่มขึ้นรวมถึงการนำไฟฟ้าของวัสดุที่ถูกเจือด้วยดีบุกเด่น dav

สาขาวิชาพิสิกส์
ปีการศึกษา 2563

ลายมือชื่อนักศึกษา ลงที่ งานวิจัย
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา 
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม 

LAPPAWAT NGAMWONGWAN : ROLE OF TIN DOPING ON THE
IMPROVED CONDUCTIVITY OF VANADIUM PENTOXIDE CATHODE
FOR LI-ION BATTERIES: AN ATOMISTIC MODEL. THESIS ADVISOR :
ASST. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 130 PP.

VANADIUM PENTOXIDE/POLARON/ POINT DEFECTS/ TIN-DOPING

In this thesis, a computational tool based on DFT+U coupled with a statistical model was utilized to study the role of the Sn doping on the improved conductivity of V₂O₅ based cathode for Li-ion batteries. The formation of point defects, including intrinsic and Sn-related defects, were investigated systematically. The statistical model with electroneutrality was applied to estimate the defect and carrier concentration at equilibrium. The computations reveal that neutral Sn substitution for VO (SnVO) is the most dominant in the presence of Sn doping. The electron conduction can occur by the transport of bound polarons in SnVO, escaping the defect center. Compared to the material without doping, Sn doping plays a significant role in the increase in the concentration of bound polarons via the formation of neutral SnVO. In addition, these polarons can escape from the defect center more easily. In other words, Sn substitution slightly weakens the interaction between defect center and the bound polaron. As a result, the number of charge carriers increase as well as the conductivity of the Sn-doped material.

School of Physics

Academic Year 2020

Student's Signature ຄ່າງວິດ ພວກເຮົາ

Adviser's Signature

Cc. Advisor's Signature 