ปคุณา ปานโบว์ : การศึกษาประสิทธิภาพของ V_2CO_2 ที่เสริมด้วยโลหะทรานซิสชันเพื่อเป็นวัสดุแคโทดของแบตเตอรีชนิดอลูมิเนียมซัลเฟอร์ด้วยวิธีคำนวณเฟิร์สต์พรินซิเพิล (FIRST-PRINCIPLES STUDY ON THE PERFORMANCE OF TRANSITION METAL DECORATED V_2CO_2 AS CATHODE MATERIALS OF ALUMINUM-SULFUR BATTERIES).
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 120 หน้า

คำสำคัญ : แบตเตอรี่อลูมิเนียม-ซัลเฟอร์ตัวเร่งปฏิกิริยาอะตอมเดี่ยว โลหะทรานซิชันสองมิติ MXene ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น การคำนวณหลักการแรก

แบตเตอรี่อะลูมิเนียม-ซัลเฟอร์ (Al-S) กำลังได้รับความสนใจในฐานะระบบกักเก็บพลังงานยุคใหม่ที่มีความจุสูงและคุ้มค่า จากปริมาณที่พบได้มากของอะลูมิเนียมและซัลเฟอร์ อย่างไรก็ตาม ความท้าทายที่สำคัญ โดยเฉพาะอย่างยิ่งปรากฏการณ์โพลีซัลไฟด์ชัตเติล (polysulfide shuttle effects) และศักย์ไฟฟ้าเกิน (overpotential) เป็นอุปสรรคต่อการประยุกต์ใช้งานจริงในวงกว้างและความเป็นไปได้ในเชิงพาณิชย์ ในการศึกษานี้ศักยภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาโลหะแทรนซิชันแบบอะตอมเดี่ยว (SA) และอะตอมคู่ (DA) ที่รองรับบน V_2CO_2 MXenes ถูกศึกษาเพื่อใช้เป็นวัสดุแคโทดสำหรับแบตเตอรี่ Al-S โดยใช้การคำนวณทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (DFT) บนพื้นฐานหลักการแรกอย่างละเอียด มีการวิเคราะห์พลังงานการจับและพลังงานอันตรกิริยาของ S_8 และสปีชีส์ Al_2S_n ต่าง ๆ (Al_2S_{18}, Al_2S_{12}, Al_2S_6, Al_2S_3) อย่างเป็นระบบ และสร้างแผนภาพพลังงานอิสระกิ๊บส์ของปฏิกิริยารีดักชันซัลเฟอร์ (SRR) เพื่อทำแผนที่เส้นทางของปฏิกิริยาทั้งหมด และการวิเคราะห์การสลายตัวของอะลูมิเนียมซัลไฟด์ (Al_2S_3) ผลการศึกษาแสดงให้เห็นว่า DA@V_2CO_2 โดยเฉพาะอย่างยิ่ง d-Cr- และ d-Cr-V_O สามารถลดกำแพงพลังงานสำหรับขั้นตอนทางอิเล็กทรอนิกส์ที่สำคัญของ SRR ได้ ซึ่งช่วยเพิ่มประสิทธิภาพการเร่งปฏิกิริยาโดยรวม เมื่อเทียบกับ V_2CO_2, SA@V_2CO_2 และ DA@V_2CO_2 ซึ่งเป็นปัจจัยที่ส่งผลกระทบอย่างยิ่งต่อความแรงในการดูดซับและกลไกของปฏิกิริยา ผลการวิจัยนี้ชี้ให้เห็นว่า V_2CO_2 MXenes ที่ปรับปรุงด้วยโลหะแทรนซิชันเหล่านี้มีแนวโน้มที่ดีในการเป็นวัสดุกักเก็บซัลเฟอร์ (Sulfur hosts) ที่มีประสิทธิภาพในแบตเตอรี่ Al-S โดยช่วยปรับปรุงการรีดักชันของซัลเฟอร์และมีศักยภาพในการยับยั้งปรากฏการณ์ชัตเติล ซึ่งท้ายที่สุดจะช่วยเพิ่มประสิทธิภาพของแบตเตอรี่และอายุการใช้งานในระยะยาว

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2568

ลายมือชื่อนักศึกษา ปคุณา ปานโบว์
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

PAKUNA PANBO : FIRST-PRINCIPLES STUDY ON THE PERFORMANCE OF TRANSITION METAL DECORATED V_2CO_2 AS CATHODE MATERIALS OF ALUMINUM-SULFUR BATTERIES. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 120 PP.

Keywords : Aluminum-sulfur batteries, Single-atom catalysts, MXene, Density functional theory (DFT), First-principles study

Aluminum-sulfur (Al-S) batteries are gaining significant attention as next-generation, high-capacity, cost-effective energy storage systems. However, critical challenges, most notably polysulfide shuttle effects, and high sulfur reduction energy barriers, hinder their widespread practical application and commercial viability. In this study, The potential of single-atom (SA) and dual-atom (DA) transition metal catalysts supported on V_2CO_2 MXenes were investigated as cathode materials for Al-S batteries, using density functional theory (DFT) calculations. The study systematically analyzed the adsorption and interaction energy of S_8 and Al_2S_n species (Al_2S_{18}, Al_2S_{12}, Al_2S_6, Al_2S_3), constructed Gibbs free energy profiles of sulfur reduction reactions (SRR) to map the complete reaction pathway and the decomposition of Al_2S_3. The results demonstrate that DA@V_2CO_2, especially d-Cr- and d-Cn-V_O, significantly reduce the energy barriers for the crucial electronic step of SRR, enhancing the overall catalytic performance compared to bare, SA@V_2CO_2, DA@V_2CO_2. Our findings suggest that these 3d-transition metal decorated V_2CO_2 MXenes hold promise as good cathode materials in Al-S batteries, offering improved sulfur reduction and the adsorption strength to suppress the shuttle effect, enhancing long-term battery performance and cycle life.

School of Chemistry
Academic Year 2025

Student's Signature ปคุณา ปานโบว์
Advisor's Signature