

วงศ์ธร แก้วเรือง : การคัดกรองตัวเร่งปฏิกิริยาอะตอมเดี่ยวโลหะทรานซิชันบน $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ ด้วยวิธีเชิงคำนวณเพื่อใช้เป็นวัสดุแคโทดประสิทธิภาพสูงสำหรับแบตเตอรี่ลิเทียมซัลเฟอร์ (COMPUTATIONTATIONAL SCREENING FOR SINGLE ATOM CATALYSTS ON $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ FOR HIGH PERFORMANCE CATHODE MATERIALS OF LITHIUM-SULFUR BATTERIES)

อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 135 หน้า.

คำสำคัญ: แบตเตอรี่ลิเทียม-ซัลเฟอร์ตัวเร่งปฏิกิริยาอะตอมเดี่ยว โลหะทรานซิชันสองมิติ MBene ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น การคำนวณหลักการแรก

แบตเตอรี่ลิเทียม-ซัลเฟอร์นับว่าเป็นทางเลือกที่น่าสนใจแทนแบตเตอรี่ลิเทียม-ไอออนแบบดั้งเดิม เนื่องจากมีความหนาแน่นพลังงานในทางทฤษฎีสูงและต้นทุนการผลิตต่ำกว่า อย่างไรก็ตาม ประสิทธิภาพของแบตเตอรี่ชนิดนี้ยังถูกจำกัดด้วยปัญหาการลดลงของความจุ ซึ่งส่วนใหญ่เกิดจากปรากฏการณ์ที่เรียกว่า “shuttle effect” และการสลายตัวของลิเทียมโพลีซัลไฟด์ในสถานะของแข็งที่เป็นไปอย่างเชื่องช้า ในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ได้ใช้การคำนวณตามหลักการแรก เพื่อเสนอให้ใช้วัสดุ $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ ที่ตกแต่งด้วยอะตอมเดี่ยวเป็นวัสดุแคโทดที่มีศักยภาพสำหรับแบตเตอรี่ลิเทียม-ซัลเฟอร์ จากผลศึกษาพบว่า โลหะทรานซิชัน $3d$ และ $4d$ สามารถเพิ่มความสามารถในการดูดซับลิเทียมโพลีซัลไฟด์ได้อย่างมีนัยสำคัญผ่านการสร้างพันธะระหว่างโลหะทรานซิชันและซัลเฟอร์ ความแตกต่างของความแข็งแรงในการดูดซับ LiPSs ระหว่างโลหะทรานซิชัน $3d$ และ $4d$ นั้นมาจากความแตกต่างในโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ คุณสมบัติทางเรขาคณิต การเติมอิเล็กตรอนในไฮบริดเซชันระหว่าง d กับ p ออร์บิทัล และระดับพลังงานของสถานะ d ของแต่ละอะตอมเดี่ยว ซึ่งส่งผลให้เกิดรูปแบบการดูดซับที่แตกต่างกันในแต่ละกลุ่ม การเติมอะตอมเดี่ยวไม่เพียงแต่ช่วยเสริมความแข็งแรงของการดูดซับ แต่ยังช่วยส่งเสริมการเปลี่ยนแปลงลิเทียมโพลีซัลไฟด์ที่ละลายได้ให้กลายเป็นชนิดที่ไม่ละลายขนาดเล็ก ซึ่งช่วยลดปัญหาลิเทียมโพลีซัลไฟด์ละลายและ shuttle effect ได้อย่างมีประสิทธิภาพ ในบรรดาวัสดุทั้งหมด วัสดุ V- และ Nb- $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ แสดงความสามารถในการดูดซับลิเทียมโพลีซัลไฟด์ที่แข็งแกร่งที่สุดและมีการเร่งปฏิกิริยาในกระบวนการปฏิกิริยารีดักชันของกำมะถันที่ยอดเยียม การศึกษานี้จึงให้ข้อมูลเชิงลึกและแนวทางเชิงกลยุทธ์ในการออกแบบวัสดุที่มีประสิทธิภาพสูง ซึ่งช่วยเพิ่มความเสถียรและประสิทธิภาพของแบตเตอรี่ลิเทียม-ซัลเฟอร์อย่างก้าวหน้า

สาขาวิชาเคมี

ปีการศึกษา 2567

ลายมือชื่อนักศึกษา Wongsathorn

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา [Signature]

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม [Signature]

WONGSATHORN KAEWRAUNG : COMPUTATIONAL SCREENING FOR SINGLE ATOM CATALYSTS ON $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ FOR HIGH PERFORMANCE CATHODE MATERIALS OF LITHIUM-SULFUR BATTERIES.

THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 135 PP.

Keyword: Lithium-sulfur batteries, Single-atom catalysts, Transition metal borides (MBene), Density functional theory (DFT), First-principles method

Lithium-sulfur (Li-S) batteries offer a promising alternative to traditional lithium-ion batteries, boasting a high theoretical energy density and lower production costs. Nevertheless, their performance is hindered by capacity fading and poor cycling stability, mainly caused by the shuttle effect of soluble lithium polysulfides (LiPSs) and the sluggish decomposition of solid LiPSs. In this thesis, the first-principles calculations were employed to suggest single-atom (SA) decorated $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ (SA- $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$) as a potential cathode material for Li-S batteries. The results suggested that 3d- and 4d-transition metals significantly enhance LiPS adsorption through the formation of strong transition metal-sulfur (TM-S) bonds. Variations in LiPS adsorption strength between 3d- and 4d-transition metals are attributed to differences in their electronic structures, geometric properties, electron filling in d-p hybridization, and energy level of d states of each SA, leading to distinct adsorption patterns for each group. SA doping not only strengthens LiPS adsorption but also promotes the conversion of soluble LiPSs into smaller, insoluble species, effectively alleviating LiPSs dissolution. Among SA- $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$, V- and Nb- $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ show the strongest LiPS adsorption and exceptional catalytic activities in the sulfur reduction reaction (SRR), reducing the shuttle effect and enhancing charge-discharge efficiency. This study provides valuable insights and a strategic approach for designing high-performance SA- $\text{Mo}_2\text{B}_2\text{O}_2$ cathodes, advancing the stability and efficiency of Li-S batteries.

School of Chemistry
Academic Year 2024

Student's Signature Wongsathorn
Advisor's Signature [Signature]
Co-Advisor's Signature [Signature]