ลาภวัต งามวงศ์วาน : การศึกษาบทบาทของการเจือดีบุกต่อการเพิ่มความนำไฟฟ้าของขั้วแคโทดวาเนเดียมเพนทอกไซด์สำหรับแบตเตอรีชนิดลิเธียมไอออนโดยการจำลองระดับอะตอม (ROLE OF TIN DOPING ON THE IMPROVED CONDUCTIVITY OF VANADIUM PENTOXIDE CATHODE FOR LI-ION BATTERIES: AN ATOMISTIC MODEL) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 130 หน้า.

วิทยานิพนธ์นี้ใช้ระเบียบวิธีการคำนวณบนพื้นฐานของทฤษฎี DFT + U ร่วมกับระบบสมการทางสถิติในการศึกษาบทบาทของการเจือดีบุกต่อการเพิ่มความนำไฟฟ้าของขั้วแคโทดวาเนเดียมเพนทอกไซด์สำหรับแบตเตอรีชนิดลิเธียมไอออน โดยการเกิดของบกพร่องแบบจุดทั้งที่เกิดจากตัววัสดุเองและเกิดการเจือด้วยดีบุกได้ถูกศึกษาอย่างเป็นระบบ จากนั้นระบบสมการทางสถิติได้ถูกนำมาใช้เพื่อคาดคะเนความเข้มข้นของข้อบกพร่องแบบจุดและพาหะตัวกลาง ณ สภาวะสมดุลภายใต้เงื่อนไขความเป็นกลางทางไฟฟ้าของวัสดุ จากผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าเมื่อมีการเจือดีบุกนั้นการเกิดดีบุกแทนที่หมู่วาเนดิลนั้นเป็นข้อบกพร่องชนิดที่เกิดขึ้นมากที่สุด และการนำของอิเล็กตรอนถูกทำให้เกิดขึ้นได้ผ่านกระบวนการการเคลื่อนที่ของโพลารอนที่เกิดขึ้นพร้อมกับข้อบกพร่องดังกล่าวหากโพลารอนนั้นสามารถหนีออกจากแรงดึงดูดของข้อบกพร่องดังกล่าวได้ เมื่อเปรียบเทียบการเคลื่อนที่ของโพลารอนในวัสดุที่ไม่มีการเจือดีบุก พบว่าการเจือดีบุกมีบทบาทสำคัญในการเพิ่มความเข้มข้นของโพลารอนที่ถูกยึดไว้ในข้อบกพร่องผ่านการเกิดข้อบกพร่องดีบุกแทนที่หมู่วาเนดิล อีกทั้งดีบุกยังช่วยให้โพลารอนเหล่านั้นสามารถเคลื่อนที่ออกจากบริเวณศูนย์กลางของข้อบกพร่องได้ง่ายขึ้น หรือพูดอีกนัยหนึ่งว่าการที่อะตอมดีบุกเข้าไปแทนหมู่วาเนดิลนั้นช่วยลดอันตรกิริยาระหว่างศูนย์กลางของข้อบกพร่องแบบจุดกับโพราลอนที่ถูกยึดไว้ ส่งผลให้จำนวนพาหะตัวกลางในระบบเพิ่มขึ้นรวมถึงการนำไฟฟ้าของวัสดุที่ถูกเจือด้วยดีบุกดีขึ้นด้วย

สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2563

ลายมือชื่อนักศึกษา ลาภวัต งามวงศ์วาน
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม Sirichok

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 V_2O_5 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 (Sn_{VO}) is the most dominant in the presence of Sn doping. The electron conduction can occur by the transport of bound polarons in Sn_{VO}, 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 Sn_{VO}. 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 ลาภวัล งามวงศ์วาน

Advisor's Signature

Co-Advisor's Signature Sirichok