

ภาณุวัฒน์ วัคไชสง : การศึกษากลไกการสลายตัวของเอทิลีนคาร์บอเนตบนขั้วแอโนดที่เป็นคาร์บอนในโซเดียมไอออนแบตเตอรี่ (MECHANISTIC STUDY OF ETHYLENE CARBONATE DECOMPOSITION ON CARBON ANODE OF SODIUM-ION BATTERIES) อาจารย์ที่ปรึกษา: ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 87 หน้า.

วิทยานิพนธ์นี้ได้ใช้การคำนวณแบบเฟิร์สพริ้นซิเพิลโดยวิธี DFT ในการศึกษากลไกการสลายตัวของเอทิลีนคาร์บอเนตซึ่งเป็นอิเล็กโทรไลต์ที่ได้รับความนิยมอย่างแพร่หลายสำหรับโซเดียมไอออนแบตเตอรี่ โดยจะทำการศึกษานบนพื้นผิวของวัสดุประเภทคาร์บอน และมีการศึกษาผลของหมู่ฟังก์ชันของวัสดุต่อกลไกการสลายตัว ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่า การมีหมู่ฟังก์ชันอีพ็อกซีบนพื้นผิวของวัสดุคาร์บอนจะส่งผลกระทบต่อกลไกการสลายตัวของเอทิลีนคาร์บอเนต ซึ่งผลกระทบดังกล่าวจะมีความแตกต่างกันไปในแต่ละระบบที่ทำการศึกษา โดยหากทำการศึกษาในระบบที่มีโซเดียมในระบบเพียงหนึ่งอะตอม จะได้ผลลัพธ์ว่าการที่มีหมู่อีพ็อกซีจะทำให้การสลายตัวของเอทิลีนคาร์บอเนตในทุก ๆ เส้นทางของปฏิกิริยาเกิดได้ช้าลง แต่ถ้าหากจำนวนโซเดียมมีสองอะตอมในระบบ แนวโน้มการสลายตัวของเอทิลีนคาร์บอเนตจะมีการเปลี่ยนแปลงไป และถ้าหากทำการศึกษาผลของโมเลกุลอิเล็กโทรไลต์ที่ล้อมรอบโมเลกุลที่มีการสลายตัว จะพบว่าผลที่ได้ตรงกันข้าม โดยการมีอยู่ของหมู่ฟังก์ชันอีพ็อกซีในกรณีนี้จะทำหน้าที่ในการเร่งปฏิกิริยาการสลายตัวให้เกิดขึ้นได้ง่ายขึ้น

สาขาวิชาเคมี  
ปีการศึกษา 2563

ลายมือชื่อนักศึกษา Mun 1ms  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Dr. Suwit  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม Dr. Hirat

PANUWAT WATTHAISONG : MECHANISTIC STUDY OF ETHYLENE  
CARBONATE DECOMPOSITION ON CARBON ANODE OF SODIUM-  
ION BATTERIES. THESIS ADVISOR : ASST.PROF. SUWIT SUTHIRAKUN,  
Ph.D. 87 PP.

SOLID ELECTROLYTE INTERPHASE/SODIUM-ION BATTERY/EPOXY GROUP/  
DENSITY FUNCTIONAL THEORY//ELECTROLYTE DECOMPOSITION

In this thesis, we utilized first-principles calculations based on DFT method to study the decomposition mechanisms of ethylene carbonate (EC) which is one of the most common electrolytes used in sodium-ion batteries (SIBs). Our calculations were performed on carbon-based anode material with and without the presence of epoxy group in order to evaluate its role. Computations reveal that epoxy group has a significant role on decomposition mechanisms of EC depending on their local environment. With only one Na atom on the surface, the presence of epoxy group decreases the amount of EC decomposition due to an increase of reaction energies and reaction barriers. If we introduce one more Na atom onto the surface, the trend of energy for EC decomposition mechanism is changed. Furthermore, the effect of solvent environment was evaluated by adding four more EC molecules on the surfaces. In this case, the presence of epoxy group facilitates the EC decomposition through chemical interaction and might cause the formation of thicker solid-electrolyte interphase than that without epoxy group.

School of Chemistry

Academic Year 2020

Student's Signature panuwat

Advisor's Signature Suwit Suthirakun

Co-Advisor's Signature Ben Himat