ธนวัฏ สวัสดี : การศึกษาคุณสมบัติเชิงโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ การเคลื่อนที่ของลิเธียมไอออน และการแทรกชั้นด้วยโลหะในโลหะแทรนซิชันคาร์ไบด์โดยวิธีเฟิร์สพรินซิเพิล (FIRST PRINCIPLES STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES, Li–ION MOBILITY AND METALS INTERCALATION OF TRANSITION METAL CARBIDES). อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สิริโชค จึงถาวรรณ, 165 หน้า

คำสำคัญ: วัสดุโครงสร้างสองมิติ, ลิเธียมไอออนแบตเตอร์รี่, โลหะแทรนซิชันคาร์ไบด์

วิทยานิพนธ์นี้ศึกษาคุณสมบัติโครงสร้างของโลหะแทรนซิชันคาร์ไบด์ (MXenes) เช่น M_2CT_2 โดยที่ *M* ประกอบด้วย Sc, Ti, V, Nb และ Cr และ *T* ประกอบด้วย O และ F โดยใช้วิธีการคำนวณแบบเฟิร์สพรินซิเพิล การศึกษานี้ให้ข้อมูลที่ครอบคลุมเกี่ยวกับคุณสมบัติเชิงโครงสร้างสำหรับโครงสร้างแบบเลเยอร์เดี่ยวและเลเยอร์คู่ของสารประกอบ M_2CT_2 โดยจะเน้นไปที่คุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ความเสถียรของโครงสร้าง การแพร่กระจายและการเลือกของลิเธียมไอออน และการแพร่กระจายในโครงสร้างแบบชั้นคู่ร่วมกับการแทรกชั้นด้วยธาตุอื่น ๆ (co-intercalations) ในขั้นตอนแรกเราได้ศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการปรับเปลี่ยนลักษณะโครงสร้างแบบชั้นเดี่ยวในวัสดุ M_2CT_2 นอกจากนี้การเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างที่เพิ่มเติมจากชั้นเดี่ยวอาจส่งผลต่อคุณสมบัติของ MXenes แบบหลายชั้น ซึ่งจากขั้นตอนนี้โครงสร้างที่มีความเสถียรสูงซึ่งได้มาจากการคำนวณพลังงานของระบบ เช่นสารประกอบ Ti_2CO_2 ได้ถูกนำไปใช้เพื่อตรวจสอบเพิ่มเติมสำหรับการแพร่กระจายของลิเธียมอะตอมและการแทรกชั้นร่วมของโลหะอื่น ๆ ในการศึกษาเราใช้วิธี climbing image-nudged elastic band (CI-NEB) และ static potential energy (SPES) เพื่อทดสอบคุณสมบัติการแพร่กระจายของลิเธียมอะตอมในวัสดุ ซึ่งผลการคำนวณของการแพร่กระจายของธาตุลิเธียมในวัสดุ Ti_2CO_2 แบบชั้นคู่มีค่าการขวางกั้นการแพร่ (diffusion barrier) ประมาณ 0.363 eV และพบว่ามีค่าต่ำมากที่ประมาณ 0.01 eV เมื่อระยะห่างระหว่างชั้น (interlayer spacing) มีค่าอยู่ในช่วงระหว่าง 3.40 Å และ 4.10 Å ซึ่งค่านี้มีความสัมพันธ์กับระยะห่างระหว่างชั้นของการแทรกชั้นร่วมกับโพแทสเซียมอะตอม โดยเราสามารถตีความได้ว่าที่ระยะห่างระหว่างชั้นที่มีค่าเหมาะสมค่าหนึ่ง ลิเธียมอะตอมจะถูกละเลยจากแต่ละชั้นของ Ti_2CO_2 นอกจากนี้ความรู้ที่จำเป็นสำหรับการทำความเข้าใจคุณลักษณะของลิเธียมไอออนแบตเตอรีในวัสดุ MXenes แบบชั้นคู่ จะถูกนำเสนอในลำดับสุดท้าย

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา ______

ปีการศึกษา 2564 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ______

TANAWAT SAWASDEE : FIRST PRINCIPLES STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES, Li–ION MOBILITY AND METALS INTERCALATION OF TRANSITION METAL CARBIDES. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SIRICHOK JUNGTHAWAN, Ph.D. 165 PP.

Keyword: 2D material, Li-ion battery, MXenes, Transition metal carbide

The properties of two-dimensional transition metal carbides (MXenes) of M_2CT_2 (where M = Sc, Ti, V, Nb, and Cr; and T = O and F) have been studied utilizing first-principles calculations based on the density functional theory (DFT). Our calculation provides an extensive information of the structural properties of monolayer and bilayer M_2CT_2 focusing characteristics, stability, diffusion and selectivity of Lithium-ion, and co-intercalation in bilayer M_2CT_2. The electronic properties of the distinct structural configurations of the monolayer M_2CT_2 have been investigated. Altering the structural configurations in addition to the monolayer can affect the properties of the multilayer M_2CT_2 MXenes. The energetically favorable monolayer and bilayer (Ti_2CT_2 MXenes) have been further investigated for Li-ion diffusion and metal intercalations. The diffusion properties have been performed by using climbing image-nudged elastic band (CI-NEB) and static potential energy (SPES) methods. The Li-ion diffusion barrier for the intrinsic Ti_2CO_2 bilayer is 0.363 eV and found to be significantly low (~0.01 eV) with interlayer spacings between 3.40 Å and 4.10 Å (corresponding to potassium co-intercalation). At a certain interlayer distance, Li atom is neglected by both Ti_2CO_2 layers at the bilayer interface. The essential knowledge for comprehending the lithium-ion battery characteristics of the MXenes bilayer have been discussed.

School of Physics

Academic Year 2021

Student's Signature ______________

Advisor's Signature ______________