

باسمه تعالی



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مواد

سمینار دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد گرایش شناسایی و انتخاب مواد

طراحی و بررسی آندهای مبتنی بر گرافن در باتری‌های سدیم-یونی با استفاده از

شبیه‌سازی DFT

ارائه کننده: علی جعفری

مکان: سالن سمینار دانشکده مواد

زمان: یکشنبه ۲۱ تیر ساعت ۹ صبح

اعضای کمیته داوری:

اساتید راهنما: دکتر مسعود پنجه‌پور

اساتید داور: دکتر فتح اله کریم زاده - دکتر اسماعیل عبدالحسینی

چکیده:

در این پژوهش، به منظور توسعه مواد آندی کارآمد برای باتری‌های سدیم-یونی، رفتار ساختاری، الکترونی و الکتروشیمیایی انواع سامانه‌های مبتنی بر گرافن با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. ابتدا اثر عیوب ساختاری مختلف شامل نقص استون-والس، جای خالی یگانه و جای خالی دوگانه تحلیل شد و نتایج نشان داد که حضور عیوب می‌تواند جذب و نفوذ یون سدیم را بهبود دهد و گرافن دارای جای خالی یگانه بهترین عملکرد را از نظر ظرفیت نظری و مسیرهای نفوذ ارائه می‌دهد. سپس تأثیر دوپ‌سازی گرافن با نیتروژن، نیکل و دوپ همزمان آن‌ها ارزیابی شد که بر اساس نتایج، ساختار دوپ‌شده با نیکل و نیتروژن با ظرفیت نظری بالا و سد نفوذ پایین، کارآمدترین گزینه در میان ساختارهای دوپ‌شده است. در ادامه، یک ساختار کامپوزیتی گرافن-بوروفن مورد مطالعه قرار گرفت که نشان داد مهندسی سطح می‌تواند منجر به افزایش چشمگیر ظرفیت ذخیره‌سازی و بهبود مسیرهای نفوذ یون سدیم شود. در نهایت، اصلاح سطح گرافن با کلاسترهای فلزی Pd ، Ni ، Cu و Pt بررسی شد و نتایج آشکار ساخت که ساختار $\text{Pd}/\text{graphene}$ بیشترین پایداری و توانایی جذب سدیم را داراست. مجموعه این یافته‌ها چشم‌انداز روشنی برای طراحی مواد آندی مبتنی بر گرافن در نسل آینده باتری‌های سدیم-یونی ارائه می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: باتری‌های سدیم-یونی، نظریه تابعی چگالی، گرافن، عیوب ساختاری، دوپ نیکل و نیتروژن، ظرفیت ذخیره‌سازی سدیم