

# First-Principles Study of Na Insertion in V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> for Sodium-Ion Based Battery Cathode = Studi Komputasi Na Insertion pada V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> untuk Katoda Baterai Padat Berbasis Ion Na

Ahmad Husnan Amri, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20521310&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Baterai natrium-ion merupakan alternatif yang menjanjikan dalam penyimpanan energi karena ketersediaan ion Na yang melimpah. Kinerja baterai secara keseluruhan dapat dipengaruhi oleh semua komponen baterai, termasuk pilihan bahan katoda. Penelitian ini berfokus pada vanadium pentoksida (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) sebagai bahan katoda. V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> berpotensi sebagai katoda untuk baterai sodium-ion. Dalam studi ini, kami menghitung potensi material menggunakan density functional theory (DFT) menggunakan self-consistent field (SCF) dan perhitungan optimasi struktur. Pada proses interkalasi ion Na, penambahan ion Na mengikuti rumus kimia Na<sub>x</sub>V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> dengan nilai  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) yang menyatakan banyaknya ion Na pada katoda V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Kami menyelidiki stabilitas struktur dengan menghitung energi formasi dan memeriksa deformasi kisi kristal di katoda di bawah variasi jumlah ion Na<sup>+</sup>. Dari penelitian kami, struktur NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> memiliki kapasitas optimal teoretis 147 mAh/g dan tegangan rangkaian terbuka 3.5 V. Spesifikasi ini menjanjikan sebagai katoda pada baterai ion natrium meskipun kapasitasnya tidak sebaik pada baterai lithium ion. Hal ini sesuai dengan ukuran atom dan massa Na<sup>+</sup> yang menyebabkan deformasi struktur.

.....Sodium-ion batteries are a promising alternative in energy storage due to the abundant availability of Na ions. The overall battery performance may be affected by all the battery components, including the choice of the cathode material. This study focuses on vanadium pentoxide (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) as the cathode material. V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> has the potential as the cathode for sodium-ion batteries. In this study, we compute the potential within the Density Functional Theory (DFT) using Self-Consistent Field (SCF) and structural optimization methods. In the intercalation process of Na ions, the addition of Na ions follows the chemical formula of Na<sub>x</sub>V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> with the value of  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) representing the number of Na ions at the V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> cathode. We investigate the structure's stability by calculating the formation energy and inspecting the crystal lattice's deformation at the cathode under the variation of the number of Na<sup>+</sup> ions. From our study, the structure NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> has a theoretical optimal capacity of 147 mAh/g and an open-circuit voltage of 3.5 V. These specifications are promising as a cathode in sodium-ion batteries even though the capacity is not as good as in lithium-ion batteries. It corresponds with the atomic size and mass of Na<sup>+</sup> that causes deformation of the structure.