

Studi Teoritis Interkalasi dan Difusi Ion Na pada Tin Disulfida (SnS₂) sebagai Anoda Baterai Natrium = Theoretical Study of Na-ion Intercalation and Diffusion in Tin Disulfide (SnS₂) as Sodium Battery Anodes

Sri Ratnaningsih, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20521333&lokasi=lokal>

Abstrak

Material berlapis, seperti logam dikalkogenida tin disulfida (SnS₂), merupakan material menjanjikan untuk penyimpanan ion Na pada anoda baterai natrium. Struktur yang dimiliki SnS₂ memberikan peluang untuk mengatur jarak antarlapisan agar semakin banyak ion Na yang dapat ditampung sekaligus meningkatkan laju difusi ion Na dalam material tersebut. Penelitian ini menggunakan density functional theory (DFT) untuk mempelajari pengaruh jarak antarlapisan terhadap energi ikat pada proses interkalasi ion Na. Selain itu, penelitian ini juga mempelajari jalur difusi yang mungkin dilalui ion Na dalam SnS₂ serta energi barrier dari setiap jalur menggunakan metode nudged elastic band (NEB). Hasil menunjukkan bahwa ekspansi jarak antarlapisan dapat meningkatkan kinetika interkalasi dan menurunkan energi barrier untuk difusi ion Na yang menjadi kendala utama pada kinerja baterai natrium. Studi ini memberikan gambaran interkalasi dan difusivitas ion untuk desain anoda dalam material berlapis.

.....Tin disulfide (SnS₂) as layered metal dichalcogenide is a promising material for Na-ion storage as sodium battery anodes. The structure of SnS₂ allows controlling the interlayer spacing to accommodate more Na-ion and increase the diffusion rate of Na-ion in materials. This research used a density functional theory (DFT) to study the effect of interlayer spacing on the binding energy of the Na ion intercalation process. In addition, this study observed the possible diffusion pathway for Na-ion in SnS₂ and the barrier energy of each pathway using the nudged elastic band (NEB) method. The result shows that interlayer expansion can improve intercalation kinetics and decrease the barrier energy of Na ion diffusion which is the main constraint on sodium batteries' performance. This study provides an overview of ion intercalation and diffusion for anode application in layered materials.