

UPM temui bahan elektrod bateri lebih efisien menerusi pengiraan teori fungsi ketumpatan



Oleh: Noor Eszereen Juferi

Foto Oleh: Saleha Haron

CAMERON HIGHLANDS, 26 Sept – Pensyarah Kanan, Jabatan Fizik, Fakulti Sains UPM, Dr. Chan Kar Tim, berjaya membuktikan potensi Teori Fungsi Ketumpatan (DFT) dalam mempercepatkan penemuan sistem bateri yang lebih efisien serta mesra alam, sekali gus menyokong agenda tenaga boleh diperbaharui dan kelestarian global.

Beliau berkata, kajian yang dijalankan menggunakan simulasi DFT memberi gambaran awal mengenai prestasi sesuatu bahan sebelum diuji secara eksperimen.

“DFT membolehkan kami meramalkan sama ada sesuatu bahan sesuai dijadikan elektrod bateri atau tidak. Sebagai contoh, dalam kajian kami terhadap bahan komposit $1T-VS_2$ /grafen, simulasi menunjukkan ia mampu menawarkan halangan resapan ion yang rendah untuk pergerakan ion litium dan natrium.

“Ini bermakna proses pengecasan dan nyahcas boleh berlaku dengan kadar lebih pantas,” katanya.



Beliau berkata demikian ketika membentangkan kertas bertajuk First-principles Calculation of $1T-VS_2$ /graphene Composite as a High-performance Anode Material for Lithium- and Sodium-ion Batteries pada 10th International Conference on Solid State Science and Technology 2025 (ICSSST2025).

Tambah beliau, pendekatan ini membolehkan penyelidik menilai konduktiviti elektrik, kadar pengecasan dan nyahcas serta kapasiti penyimpanan tenaga sesuatu bahan dengan lebih pantas dan kos efektif.

“Hasil kajian menunjukkan bahan komposit tersebut mampu menyimpan tenaga dengan kapasiti maksimum sehingga 1,156 mAh/g bagi litium dan 770 mAh/g bagi natrium.

“Selain itu, profil voltan litar terbuka menunjukkan storan ion yang stabil, dengan purata 0.75 volt untuk ion litium dan 0.77 volt untuk ion natrium. Keupayaan ini

menjadikannya calon bahan anod berpotensi untuk bateri generasi baharu,” katanya.

Dr. Chan yang mempunyai kepakaran dalam fizik teori berkata, penemuan ini amat penting kerana ia menggunakan bahan yang banyak terdapat di alam semula jadi dan menawarkan kos yang lebih kompetitif.

“Selain berpotensi merevolusikan teknologi bateri, penemuan ini juga memberi kesan positif terhadap kelestarian alam sekitar dan kesihatan planet.

“Bateri yang lebih baik bukan sahaja menyokong penggunaan tenaga boleh diperbaharui seperti solar malah membantu mengurangkan pelepasan karbon dan menjadikan sistem tenaga lebih ekonomik serta mampan,” katanya.



Dalam pada itu, kajian berasaskan teori DFT ini membuktikan bahawa pendekatan simulasi mampu mempercepatkan pembangunan teknologi bateri baharu yang bakal membuka ruang kepada inovasi penyimpanan tenaga lebih cekap selaras dengan Matlamat Pembangunan Mampan (SDG).