**TRANG THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN**

Tên đề tài luận án: *“Tổng hợp vật liệu khung hữu cơ kim loại Zr-MOFs mới và ứng dụng trong dẫn proton”*

Chuyên ngành: Hóa lý thuyết – Hóa lý

Mã số: 62440119

Họ tên nghiên cứu sinh: Nguyễn Văn Mỷ

Khóa đào tạo: 2015 - 2018

Người hướng dẫn khoa học: GS-TSKH Lưu Cẩm Lộc

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG.HCM

1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN

Trong luận án này, chúng tôi đã tổng hợp thành công hai loại vật liệu Zr-MOFs mới (được đặt tên lần lượt là VNU-17 và VNU-23). Các vật liệu đều được phân tích cấu trúc và tính chất bằng các phép phân tích hiện đại như SXRD, PXRD, FTIR, TGA, BET, EA, 1H-NMR,…

VNU-17 và VNU-23 được tổng hợp dựa trên cơ sở các liên kết sulfonat của các cầu nối hữu cơ với các cụm kim loại Zr. Kết quả phân tích XRD đơn tinh thể và các tính chất lý hóa cho thấy VNU-17 và VNU-23 có cấu trúc hình học dạng bcu với sự phân bố dày đặc các nhóm SO3H dọc theo các kênh của MOFs với đường kính lỗ xốp 6 Å. Đặc điểm cấu trúc này cho phép cài chất mang proton như imidazole và histamine thông qua tương tác axit-bazơ (giữa nhóm SO3H và imidazole hay histamine) vào khoảng trống trong MOFs nhằm tăng cường độ dẫn của proton. Kết quả cho thấy, độ dẫn proton của các vật liệu HIm11⊂VNU-17 và His8,2⊂VNU-23 lần lượt đạt 5,93 × 10-3 S cm-1 (ở 70 oC, 85% RH) và 1,79 × 10-2 S cm-1 (ở 95 °C, 85% RH) cũng như không có bất kỳ sự giảm độ dẫn proton sau một thời gian dài hoạt động. Kết quả luận án chứng minh rằng MOFs đan cài (doping) chất mang proton là vật liệu tiềm năng trong ứng dụng làm màng trao đổi proton cho pin nhiêu liệu trong tương lai.

2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN

Đã tổng hợp thành công hai vật liệu Zr-MOFs mới với tên gọi lần lượt là VNU-17, VNU-23 và các vật liệu lai tạo ra thông qua việc đan cài các chất mang proton vào cấu trúc MOFs. Vật liệu Zr-MOFs mới có cấu trúc hình học dạng bcu chứa các nhóm SO3H với đường kính lỗ xốp là 6 Å, có độ bền nhiệt và bền nước, hóa học cao, phù hợp làm màng trao đổi proton cho pin nhiêu liệu.

Việc sử dụng vật liệu mang proton histamine thay cho imidazole làm tăng được nhiệt độ hoạt động của màng trao đổi proton từ 70 oC (đối với cài vật liệu imidazole), lên 95 oC (đối với vật liệu cài histamine). Tại độ ẩm tương đối 85% vật liệu His8,2⊂VNU-23 thể hiện độ dẫn proton đạt 1,00 × 10-2 S cm-1 ở 70 oC và 1,79 × 10-2 S cm-1 ở 95 oC, cao hơn hẳn so với các vật liệu HIm9⊂VNU-17 (1,53 × 10-4 S cm-1), HIm11⊂VNU-17 (5,93 × 10-3 S cm-1) và cao hơn độ dẫn của các MOFs khác ở độ ẩm 85%. Bên cạnh đó, vật liệu His8,2⊂VNU-23 có độ bền cao, hoạt động tốt tại nhiệt độ cao (95 oC) mà vẫn giữ nguyên cấu trúc sau 120 giờ hoạt động. Điều này còn giúp làm giảm sự đầu độc của CO (tạp chất khí hydrogen đầu vào trong pin nhiêu liệu) đối với xúc tác Pt ở điện cực. Như vậy, lần đầu tiên đã tạo ra vật liệu lai có độ dẫn và độ bền cao ở điều kiện thực tế của pin nhiên liệu.

3. CÁC ỨNG DỤNG/ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG TRONG THỰC TIỄN HAY NHỮNG VẤN ĐỀ CÒN BỎ NGỎ CẦN TIẾP TỤC NGHIÊN CỨU

Những kết quả mới này mở ra một hướng nghiên cứu mới trong việc thiết kế vật liệu MOFs mới phù hợp để làm tăng độ dẫn proton của pin nhiên liệu. Thiết kế và tổng hợp vật liệu MOFs có độ bền hóa học và độ bền nhiệt cao phù hợp trong nhiều ứng dụng khác nhau vẫn là một yếu tố quan trọng và đáng quan tâm.

Việc sử dụng những cầu nối hữu cơ chứa nhóm SO3H trong quá trình tổng hợp Zr-MOFs là một trong những định hướng ban đầu quan trọng cho sự tương tác với các chất mang proton hiệu quả hơn thông qua tương tác axit-bazơ. Độ dẫn proton của vật liệu His8,2⊂VNU-23 đạt giá trị cao khoảng 10-2 S cm-1 tại 95 oC và 85 % RH phù hợp với điều kiện thực tế sử dụng và vẫn duy trì sau nhiều giờ hoạt động.

|  |  |
| --- | --- |
| **CÁN BỘ HƯỚNG DẪN**  (Ký tên, họ tên)  **GS-TSKH Lưu Cẩm Lộc** | **NGHIÊN CỨU SINH**  (Ký tên, họ tên)  **Nguyễn Văn Mỷ** |

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**PHÓ HIỆU TRƯỞNG**

**Trần Lê Quan**