

## THÔNG TIN LUẬN ÁN TIẾN SĨ

Đề tài nghiên cứu: **Nanostructured materials based on Molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>) and carbon nanotubes (CNTs) for lithium-ion batteries (LIBs) and hydrogen evolution electrocatalysts**

Chuyên ngành: **Kỹ thuật Vật liệu**

Mã số chuyên ngành: **62520309**

Nghiên cứu sinh: **NGUYỄN THỊ MINH NGUYỆT**

Tập thể hướng dẫn: **PGS. TS. Lê Văn Thăng**  
**TS. Nguyễn Hữu Huy Phúc**

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Bách Khoa – ĐHQG – HCM**

### Tóm tắt luận án

Luận án này nghiên cứu về cấu trúc và tính chất của hai loại vật liệu nano MoS<sub>2</sub> và MoS<sub>2</sub>/CNTs đồng thời phân tích về mối tương quan giữa cấu trúc và hình thái vật liệu khác nhau đến sự thay đổi tính chất điện hóa của chúng, góp phần nêu bật được những tiềm năng cũng như thách thức của loại vật liệu này trong ứng dụng làm vật liệu điện cực pin lithium và xúc tác điện hóa cho phản ứng điện phân nước tạo H<sub>2</sub>.

Nghiên cứu đã chứng minh được hiệu quả của phương pháp sử dụng năng lượng vi sóng trong việc tổng hợp thành công vật liệu nano có cấu trúc lai hợp 1T/2H-MoS<sub>2</sub> và MoS<sub>2</sub>/CNTs nanocomposite thông qua các phương pháp phân tích tiên tiến như XPS, Raman, XRD, SEM, TEM. Điều này có ý nghĩa khoa học quan trọng trong việc lựa chọn phương pháp vi sóng để tạo ra vật liệu nano MoS<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>/CNTs nói riêng và nhiều loại vật liệu có cấu trúc nano khác nói chung với khả năng điều khiển đa dạng hình thái cấu trúc và kích thước hạt vật liệu.

Với phương pháp tổng hợp vật liệu bằng vi sóng được đề xuất và xây dựng, vật liệu MoS<sub>2</sub> tổng hợp được có cấu trúc lai hợp 1T/2H, trong đó tỉ lệ pha 1T/2H có thể thay đổi khi thay đổi dung môi phản ứng. Đáng chú ý rằng, phương pháp tổng hợp này có khả năng tạo ra hàm lượng pha kim loại 1T rất cao (đạt 84.5 % pha 1T so với pha 2H khi tổng hợp trong dung môi ethylene glycol). Pha 1T hay còn gọi là pha kim loại, có tính chất dẫn điện tốt hơn hẳn so với

pha 2H. Do đó, sự hình thành pha 1T trong vật liệu tổng hợp có ý nghĩa rất lớn trong việc ứng dụng loại vật liệu lai hợp này vào lĩnh vực lưu trữ và chuyển hóa năng lượng, đặc biệt là vật liệu xúc tác cho phản ứng điện phân nước tạo H<sub>2</sub> (HER) và ứng dụng làm vật liệu điện cực anode cho pin lithium.

Trong nghiên cứu này, vật liệu nanocomposite MoS<sub>2</sub>/CNTs cũng đã được tổng hợp thành công bằng phản ứng hóa học pha lỏng với sự hỗ trợ của vi sóng. Thông qua hai quy trình phân tán vật liệu f-CNTs tiền phản ứng: phân tán gián tiếp qua 2 bình phản ứng (I2PD) và phân tán trực tiếp qua 2 bình phản ứng (D2PD), hai loại cấu trúc vật liệu nanocomposite MoS<sub>2</sub>/CNTs tinh thể (crystalline-MoS<sub>2</sub>/CNTs) và vô định hình (amorphous-MoS<sub>2</sub>/CNTs) đã được hình thành. Các điều kiện tổng hợp tối ưu để tạo ra hai cấu trúc vật liệu nanocomposite MoS<sub>2</sub>/CNTs tinh thể và vô định hình đã được xác định bằng phương pháp quy hoạch thực nghiệm Taguchi. Cụ thể như sau:

Điều kiện tổng hợp vật liệu crystalline-MoS<sub>2</sub>/CNTs:

- Lượng f-CNTs (10g/L): 4 mL
- Thời gian phản ứng: 60 phút
- Thể tích dung môi: 240 mL
- Công suất vi sóng: 240 W
- Nhiệt độ siêu âm (giai đoạn tiền phản ứng): 60 °C

Điều kiện tổng hợp vật liệu amorphous-MoS<sub>2</sub>/CNTs:

- Công suất vi sóng: 560 W
- Thời gian phản ứng: 30 phút
- Nhiệt độ siêu âm (giai đoạn tiền phản ứng): 60 °C
- Lượng f-CNTs: 10 mg
- Tỷ lệ tác chất và dung môi  $\sum m_{(AMH+TU)}:V_{EG} = 0.06 \text{ g/mL}$

Phương pháp quy hoạch thực nghiệm Taguchi cũng xác định được mức độ ảnh hưởng của các thông số đến hiệu quả tổng hợp vật liệu MoS<sub>2</sub>/CNTs. Kết quả tính toán cho thấy công suất vi sóng có mức độ ảnh hưởng mạnh nhất đến độ tinh thể hóa của vật liệu MoS<sub>2</sub>/CNTs tổng hợp bằng quy trình I2PD và thời gian phản ứng có mức độ ảnh hưởng mạnh nhất đến hệ số Tafel của vật liệu vô định hình MoS<sub>2</sub>/CNTs tổng hợp bằng quy trình D2PD.

MoS<sub>2</sub>/CNTs cấu trúc tinh thể được chứng minh là vật liệu phù hợp làm điện cực anode cho LIB. Phương pháp quét thế vòng tuần hoàn của vật liệu này cho thấy khả năng đan cài và giải phóng ion Li<sup>+</sup> xảy ra tốt và vật liệu có độ bền sạc/xả cao. Đồ thị phóng nạp của vật liệu anode cũng cho thấy vật liệu có độ bền phóng nạp cao với dung lượng ổn định trong khoảng 1000 ÷ 1100 mAh/g sau 50 chu kỳ phóng-nạp và giảm còn 762 mAh/g sau 60 chu kỳ phóng-nạp. Nghiên cứu đã đánh giá được khả năng ứng dụng làm xúc tác cho phản ứng HER của vật liệu nanocomposite MoS<sub>2</sub>/CNTs bằng phương pháp quét thế tuyến tính và Tafel plot. Kết quả cho thấy vật liệu MoS<sub>2</sub>/CNTs cấu trúc vô định hình thể hiện khả năng xúc tác tốt và ổn định trong khoảng điện thế -220 mV đến -230 mV (so với NHE), mật độ dòng điện -8,94 mA/cm<sup>2</sup> (V = -350 mV so với NHE), độ dốc Tafel là 102 mV/dec.

### **Tính mới của luận án**

- Phương pháp tổng hợp một bước sử dụng năng lượng vi sóng để tạo ra vật liệu nano MoS<sub>2</sub> có cấu trúc lai hợp 1T/2H với các thông số được đề cập trong luận án này là một phương pháp mới. Vật liệu tạo ra từ quy trình này có tỷ lệ pha kim loại 1T-MoS<sub>2</sub> cao, có tiềm năng ứng dụng làm xúc tác cho phản ứng điện phân tạo H<sub>2</sub> (HER).
- Việc sử dụng năng lượng vi sóng để kiểm soát tỷ lệ pha 1T/2H trong các dung môi polyol, bao gồm ethylene glycol (EG), hỗn hợp ethylene glycol và glycerol, glycerol và ethylene glycol kết hợp một lượng nhỏ nước là nội dung mới chưa có báo cáo trước đây. Nghiên cứu này sẽ nghiên cứu và bàn luận về ảnh hưởng của các dung môi polyol khác nhau đến quá trình tổng hợp pha lai MoS<sub>2</sub> trong điều kiện gia nhiệt vi sóng.
- Một điểm mới nữa đáng chú ý là pha 1T-MoS<sub>2</sub> tinh khiết có trạng thái giả bền, điều này gây hạn chế lớn trong việc ứng dụng pha vật liệu này vào các ứng dụng năng lượng và xúc tác. Việc tổng hợp thành công cấu trúc lai hợp 1T/2H-MoS<sub>2</sub> giúp pha 1T trở nên bền vững và ổn định hơn bằng cách tương tác với pha 2H trong cấu trúc lai hợp 1T/2H, từ đó giúp làm tăng đáng kể hoạt tính xúc tác của chúng, tạo nền tảng cơ sở khoa học cho việc sử dụng loại vật liệu này thay thế Platin (Pt) trong phản ứng điện phân tạo H<sub>2</sub> (HER).
- Ngoài ra, việc tổng hợp các hợp chất nanocomposite MoS<sub>2</sub>/CNT cấu trúc tinh thể và vô định hình trong dung môi polyol sử dụng gia nhiệt vi sóng vẫn chưa được nghiên cứu rộng rãi. Vật liệu nanocomposite MoS<sub>2</sub>/CNTs với cấu trúc tinh thể thể hiện tính chất điện hóa vượt trội trong các ứng dụng pin lithium-ion (LIB) còn MoS<sub>2</sub>/CNTs cấu

trúc vô định hình thể hiện hoạt tính xúc tác trong ứng dụng điện phân H<sub>2</sub>O tạo H<sub>2</sub> (HER).

### **Đóng góp của luận án**

- Luận án này đặt nền móng quan trọng và mở ra một hướng nghiên cứu mới ứng dụng trong lĩnh vực xúc tác, lưu trữ và chuyển hóa năng lượng trên cơ sở vật liệu cấu trúc nano MoS<sub>2</sub> và ống nanocarbon ở Việt Nam nói chung và ĐHQG-HCM nói riêng, nhằm bắt kịp xu hướng nghiên cứu vật liệu tiên tiến đang được quan tâm hàng đầu trên thế giới.
- Hiệu quả của phương pháp sử dụng năng lượng vi sóng trong việc tổng hợp thành công vật liệu nano có cấu trúc lai hợp 1T/2H-MoS<sub>2</sub> và MoS<sub>2</sub>/CNTs nanocomposite có ý nghĩa khoa học quan trọng trong việc lựa chọn phương pháp này để tạo ra vật liệu nano MoS<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>/CNTs nói riêng và nhiều loại vật liệu có cấu trúc nano khác nói chung với khả năng điều khiển đa dạng hình thái cấu trúc và kích thước hạt vật liệu. Với các ưu điểm nổi trội của vi sóng như tiết kiệm rất nhiều thời gian và năng lượng, phản ứng ở điều kiện áp suất thường, có thể tạo ra lượng sản phẩm tổng hợp lớn hơn hẳn so với các phương pháp thủy nhiệt thường được sử dụng (hydro/solvothermal), có ý nghĩa lớn trong việc đẩy nhanh tiến độ nghiên cứu ở quy mô phòng thí nghiệm.
- Dữ liệu thực nghiệm có giá trị tham khảo cao, đóng góp vào cơ sở dữ liệu khoa học trong lĩnh vực vật liệu nano một chiều và hai chiều, mở ra các phương pháp nghiên cứu thay thế có giá trị trong lĩnh vực công nghệ vật liệu cho các ứng dụng lưu trữ và chuyển hóa năng lượng, như ứng dụng trong HER.

**Tập thể hướng dẫn**

**Nghiên cứu sinh**

PGS. TS Lê Văn Thăng

TS. Nguyễn Hữu Huy Phúc

Nguyễn Thị Minh Nguyệt