

## THÔNG TIN LUẬN ÁN TIẾN SĨ

Đề tài nghiên cứu: **Nghiên cứu khả năng oxy hóa methanol của hệ vật liệu PtRuX (X = Fe, Co, Ni) trên chất nền hỗn hợp carbon - ống nano carbon ứng dụng làm anode trong pin nhiên liệu.**

Chuyên ngành: **Vật lý kỹ thuật** Mã số chuyên ngành: **9520401**

Họ và tên NCS: **Đặng Long Quân**

Tập thể hướng dẫn: **1. PGS.TS. Lê Hữu Phước**  
**2. PGS.TS. Đỗ Ngọc Sơn**

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Bách Khoa - ĐHQG TP. HCM**

### *Thông tin tóm tắt về những đóng góp mới về mặt học thuật và lý luận của luận án*

Phát triển công nghệ năng lượng mới là một trong những vấn đề cấp thiết hiện nay nhằm bảo vệ môi trường. Trong số các công nghệ năng lượng mới, pin nhiên liệu methanol (DMFC) là một trong những ứng viên đầy hứa hẹn vì có kích thước nhỏ gọn, nhiên liệu methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) dễ sản xuất và tồn trữ, có mật độ năng lượng cao và hoạt động ở nhiệt độ thấp. Tuy nhiên, việc thương mại hóa pin nhiên liệu DMFC còn khó khăn do một số rào cản, hai trong số đó là hiện tượng đầu độc carbon monoxide (CO) ở bề mặt điện cực anode làm hiệu suất pin suy giảm theo thời gian và việc sử dụng platinum (Pt) làm chất xúc tác ở điện cực làm pin có giá thành cao. Luận án này chế tạo, nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết về hệ xúc tác PtRuX (X = Fe, Co, Ni)/C-MWCNTs nhằm tìm ra chất xúc tác phù hợp nhất để sử dụng trong điện cực anode pin nhiên liệu DMFC có thể khắc phục được phần nào hai nhược điểm trên.

Trong phần nghiên cứu thực nghiệm, trước tiên, tỷ lệ giữa carbon Vulcan và ống nano carbon đa thành (C:MWCNTs) trong chất nền xúc tác được khảo sát nhằm tìm ra tỷ lệ phù hợp nhất. Tỷ lệ phần trăm khối lượng giữa C:MWCNTs trong thành phần chất nền được thay đổi lần lượt là: 100:0, 90:10, 80:20, 70:30, 60:40, 50:50, và 0:100. Kết quả khảo sát cho thấy, mẫu xúc tác với tỷ lệ khối lượng C:MWCNTs = 70:30 có khả năng oxy hóa methanol lớn nhất và giá trị trở kháng nhỏ nhất. Do đó, chất nền với tỷ lệ khối lượng này được sử dụng cho các nghiên cứu kế tiếp. Tiếp theo, vật liệu xúc tác PtRuX (X = Fe, Co,

Ni)/C-MWCNTs (tỷ lệ khối lượng C:MWCNTs = 70:30) được chế tạo và khảo sát nhằm tìm ra kim loại thứ ba (Fe/Co/Ni) phù hợp nhất. Với khả năng oxy hóa methanol lớn nhất và giá trị trở kháng nhỏ nhất, mẫu xúc tác PtRuCo/C-MWCNTs được đề xuất sử dụng cho điện cực pin nhiên liệu methanol. Cuối cùng, nhằm tối ưu hóa tỷ lệ giữa các kim loại trong hợp kim PtRuCo, các mẫu xúc tác  $Pt_1Ru_1Co_y$  ( $y = 0; 0,5; 1; 2; 3; 4$ )/C-MWCNTs (tỷ lệ khối lượng C:MWCNTs = 70:30) được chế tạo và khảo sát. Kết quả cho thấy, mẫu xúc tác với tỷ lệ Pt:Ru:Co = 1:1:2 là lựa chọn tối ưu. Như vậy, kết quả sau cùng là mẫu xúc tác  $Pt_1Ru_1Co_2/C_{70}MWCNTs_{30}$  được đề xuất sử dụng trong điện cực anode pin nhiên liệu methanol.

Ở phần nghiên cứu lý thuyết, lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) được sử dụng để tính toán và khảo sát hai chất xúc tác PtRuFe<sub>3</sub>/C-MWCNTs và PtRuCo<sub>3</sub>/C-MWCNTs. Chúng tôi lựa chọn hai chất xúc tác này, bởi vì trong phần nghiên cứu thực nghiệm của chúng tôi cho thấy, trong số các chất xúc tác đã được nghiên cứu, chất xúc tác thứ nhất có khả năng chống đầu độc CO tốt nhất, trong khi đó chất xúc tác thứ hai lại có hoạt độ phản ứng oxy hóa methanol cao nhất. Kết quả cho thấy, cường độ hấp phụ của CO trên bề mặt PtRuCo<sub>3</sub>/C-MWCNTs là cao hơn trên bề mặt PtRuFe<sub>3</sub>/C-MWCNTs. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với phần nghiên cứu thực nghiệm với khả năng kháng đầu độc CO của PtRuFe<sub>3</sub>/C-MWCNTs cao hơn so với PtRuCo<sub>3</sub>/C-MWCNTs. Mặt khác, chúng tôi cũng làm rõ cơ chế phản ứng của quá trình oxy hóa methanol trên bề mặt hai chất xúc tác kể trên. Tính toán năng lượng tự do Gibbs cho thấy, con đường oxy hóa methanol thuận lợi nhất cho cả hai chất nền là con đường phản ứng không đi qua quá trình hình thành CO trên bề mặt chất xúc tác:  $CH_3OH \rightarrow CH_3OH^* \rightarrow CH_2OH^* \rightarrow CH_2O^*/CHOH^* \rightarrow CHO^* \rightarrow CHOOH^* \rightarrow CHOO^*/COOH^* \rightarrow CO_2^*$ .

**Tập thể hướng dẫn**

**Nghiên cứu sinh**

**Lê Hữu Phước**

**Đỗ Ngọc Sơn**

**Đặng Long Quân**