

CỘNG HOÀ XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM
Độc lập - Tự do - Hạnh phúc

Bình Định, ngày 11 tháng 10 năm 2023

BÁO CÁO KẾT QUẢ TỰ ĐÁNH GIÁ
NHIỆM VỤ KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ CẤP QUỐC GIA

I. Thông tin chung về nhiệm vụ:

1. Tên nhiệm vụ, mã số:

Tổng hợp các chất bán dẫn mới cấu trúc lớp, ứng dụng làm vật liệu xúc tác quang và lưu trữ năng lượng, Mã số: NĐT.52.KR/19

Thuộc Chương trình KH&CN theo Nghị định thư

2. Mục tiêu nhiệm vụ:

- Phát triển các phương pháp và tổng hợp được 3 nhóm chất bán dẫn mới có cấu trúc lớp:

+ Vật liệu chứa nguyên tố nhóm IV (Si, Ge và Sn) hoặc nhóm V (P đen);

+ Vật liệu cấu trúc lớp g-C₃N₄;

+ Vật liệu cấu trúc lớp MoS₂ và WS₂.

- Đề xuất phương án ứng dụng các sản phẩm trên làm chất xúc tác quang và vật liệu lưu trữ năng lượng.

- Nâng cao năng lực nghiên cứu của cán bộ khoa học phía Việt Nam tham gia dự án;

- Tăng cường mối quan hệ hợp tác khoa học giữa Việt Nam và Hàn Quốc.

3. Chủ nhiệm nhiệm vụ: TS. Nguyễn Văn Thắng

4. Tổ chức chủ trì nhiệm vụ: Viện Nghiên cứu ứng dụng khoa học và công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn

5. Tổng kinh phí thực hiện: 4.399 triệu đồng

Trong đó, kinh phí từ ngân sách SNKH: 4.399 triệu đồng.

Kinh phí từ nguồn khác: 0 đồng.

6. Thời gian thực hiện theo Hợp đồng:

Bắt đầu: 9/2019, Kết thúc: 9/2022

Thời gian thực hiện theo văn bản điều chỉnh của cơ quan có thẩm quyền: Đã được gia hạn đến 9/2023.

7. Danh sách thành viên chính thực hiện nhiệm vụ nêu trên gồm:

Số TT	Họ và tên	Chức danh khoa học, học vị	Cơ quan công tác
1	Nguyễn Văn Thắng	GVC, TS	Trường Đại học Quy Nhơn
2	Võ Viễn	GVCC, PGS. TS	Trường Đại học Quy Nhơn
3	Trần Văn Mẫn	GVCC, PGS. TS	Trường Đại học Khoa học tự nhiên Tp. HCM
4	Nguyễn Tiến Trung	GVCC, PGS. TS	Trường Đại học Quy Nhơn
5	Phan Thị Thùy Trang	GVC, TS	Trường Đại học Quy Nhơn
6	Lê Thị Thanh Liễu	GVC, TS	Trường Đại học Quy Nhơn
7	Nguyễn Văn Kim	GVC, TS	Trường Đại học Quy Nhơn
8	Huỳnh Thị Miền Trung	GVC, TS	Trường Đại học Quy Nhơn
9	ThS. Nguyễn Ngọc Trí	GVC, ThS	Trường Đại học Quy Nhơn
10	ThS. Nguyễn Thị Thanh Hương	ThS, NCS	Trường Đại học Quy Nhơn

II. Nội dung tự đánh giá về kết quả thực hiện nhiệm vụ:

1. Về sản phẩm khoa học:

Danh mục sản phẩm đã hoàn thành:

Số TT	Tên sản phẩm	Số lượng			Khối lượng			Chất lượng		
		Xuất sắc	Đạt	Không đạt	Xuất sắc	Đạt	Không đạt	Xuất sắc	Đạt	Không đạt
1	Sản phẩm Dạng 1: Mẫu; sản phẩm (là hàng hóa có thể tiêu thụ trên thị trường); vật liệu; thiết bị; máy móc; dây chuyền công nghệ ; giống cây trồng; giống vật nuôi; các loại khác									
1.1	Hệ thiết bị phản ứng CVD (lắng đọng hóa học từ pha hơi) để tổng hợp vật liệu cấu trúc lớp quy mô phòng thí nghiệm		X			X			X	
1.2	Nhóm vật liệu: silic, gecmani, thiếc và photpho đen dạng lớp		X			X			X	
1.3	Vật liệu: g-C ₃ N ₄ không pha tạp và pha tạp một số nguyên tố phi kim như halogen, O và S		X			X			X	
1.4	Nhóm vật liệu: MS ₂ và X-MS ₂ với X là kim loại chuyển tiếp, M là Mo,W		X			X			X	
1.5	Điện cực anot dạng đồng xu (coin cell) được làm từ các vật liệu Si, Ge, Sn và P đen		X			X			X	

2	Sản phẩm Dạng 2: Nguyên lý ứng dụng; phương pháp; tiêu chuẩn; quy phạm; phần mềm máy tính; bản vẽ thiết kế; quy trình công nghệ; sơ đồ, bản đồ; số liệu, cơ sở dữ liệu; báo cáo phân tích; tài liệu dự báo (<i>phương pháp, quy trình, mô hình, ...</i>); đề án, quy hoạch; luận chứng kinh tế - kỹ thuật, báo cáo nghiên cứu khả thi; và các sản phẩm khác									
2.1	Bản thiết kế hệ thiết bị phản ứng CVD (lắng đọng hóa học từ pha hơi) để tổng hợp vật liệu cấu trúc lớp quy mô phòng thí nghiệm		X			X			X	
2.2	06 quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp bao gồm: (1) Quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp Si; (2) Quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp Ge; (3) Quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp Sn; (4) Quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp P đen; (5) Quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp g-C ₃ N ₄ và g-C ₃ N ₄ pha tạp một nguyên tố halogen, O và S; (6) Quy trình tổng hợp các vật liệu dạng lớp MS ₂		X			X			X	

	và MS ₂ pha tạp các kim loại Co, Cu và Fe (M = Mo, W).								
2.3	<p>06 báo cáo kết quả nghiên cứu cấu trúc (XRD, SEM, TEM), tính chất (quang, điện hóa) của các sản phẩm:</p> <p>(1) Vật liệu dạng lớp Si;</p> <p>(2) Vật liệu dạng lớp Ge;</p> <p>(3) Vật liệu dạng lớp Sn;</p> <p>(4) Vật liệu dạng lớp P đen;</p> <p>(5) Vật liệu dạng lớp g-C₃N₄ và g-C₃N₄ pha tạp một nguyên tố halogen, O và S;</p> <p>(6) Vật liệu dạng lớp MS₂ và MS₂ pha tạp một kim loại Co, Cu và Fe (M = Mo, W).</p>	X			X			X	
2.4	<p>04 báo cáo đánh giá khả năng lưu trữ ion Li⁺ của vật liệu cấu trúc lớp:</p> <p>(1) Vật liệu silic,</p> <p>(2) Vật liệu gecmani,</p> <p>(3) Vật liệu thiếc,</p>	X			X			X	

	(4) Vật liệu phốt pho đen.									
2.5	02 báo cáo đánh giá hoạt tính quang xúc tác của 02 nhóm vật liệu: (1) Vật liệu g-C ₃ N ₄ và biến tính bởi pha tạp một số nguyên tố phi kim (một nguyên tố halogen, O và S), (2) Vật liệu MS ₂ , MS ₂ pha tạp một kim loại chuyển tiếp Co, Cu và Fe (M = Mo, W).		X			X			X	
3	Sản phẩm Dạng 3: Bài báo; sách chuyên khảo									
3.1	Bài báo đăng trên tạp chí khoa học quốc tế thuộc danh mục ISI	X			X			X		
3.2	Bài báo đăng trên tạp chí khoa học trong nước		X			X			X	
3.3	Sách chuyên khảo	X			X			X		
4	Sản phẩm Dạng 4: Đào tạo nguồn nhân lực cho Việt Nam									
4.1	Đào tạo dài hạn									
	Tiến sỹ (góp phần đào tạo)		X			X			X	

	Thạc sĩ	X			X			X		
4.2	<i>Đào tạo/trao đổi cán bộ, chuyên gia</i>									
	Đào tạo/trao đổi cán bộ, chuyên gia		X			X			X	

2. Về những đóng góp mới của nhiệm vụ:

Đã chế tạo được các vật liệu có cấu trúc lớp điển hình, bao gồm các nguyên tố điển hình nhóm IVA (Si, Ge và Sn), một nguyên tố nhóm VA (P), hai muối họ dichalcogenide (MoS_2 và WS_2) và một polymer hữu cơ có cấu trúc kiểu graphite $\text{g-C}_3\text{N}_4$ dưới dạng các tấm nano. Đây là các vật liệu bán dẫn có rất nhiều ứng dụng trong việc chế tạo các linh kiện điện tử, điện cực cho các hệ thống lưu trữ, chuyển đổi năng lượng và chất xúc tác quang. Điểm mới của nhiệm vụ là đã tìm ra điều kiện chế tạo đơn giản, thân thiện môi trường và có khả năng điều chế lượng lớn cho mục đích thương mại.

Nhóm vật liệu $\text{g-C}_3\text{N}_4$, MoS_2 , WS_2 và các dạng biến tính của chúng thể hiện một năng lực xúc tác quang cao, đặc biệt trong đó, gây ấn tượng nhất là vật liệu $\text{g-C}_3\text{N}_4$ pha tạp oxy. Vật liệu này được tổng hợp đơn giản, giá thành thấp, thân thiện môi trường nhưng có hoạt tính xúc tác rất cao. Công trình công bố về phát hiện này được gây chú ý bằng chứng là lượt trích dẫn rất cao (Công bố năm 2021, <https://doi.org/10.1016/j.jpccs.2020.109900>, số lượt trích dẫn 66, tính đến ngày 11/10/2023 theo Google Scholar). Vật liệu này có thể được nghiên cứu thêm để ứng dụng thương mại. Việc chế tạo thành công các vật liệu xúc tác quang không chỉ dừng lại ứng dụng trong xử lý ô nhiễm môi trường, mà hiện tại nhóm đang nghiên cứu điều chế các vật liệu này dạng chấm lượng tử (quantum dot) ứng dụng trong nhiều lĩnh vực khác nhau bao gồm linh kiện điện tử và y sinh.

Đã chế tạo được bán pin dạng cúc áo (coin half-cell) từ các vật liệu Si, Ge, Sn và P để đánh giá năng lực lưu trữ ion Li^+ với mục đích làm vật liệu anode cho pin sạc ion Li^+ . Đóng góp mới của công việc này là tìm được vai trò của các cấu tử trong việc chế tạo anode, đặc biệt việc thẩm ướt electrolyte trong toàn bộ điện cực đóng một vai trò quan trọng.

Đã tìm được một mối quan hệ giữa cấu trúc và năng lực làm điện cực, ở đó các vật liệu ở dạng nano hoặc phân tán lên trên các chất nền đều có thể cải thiện năng lực làm điện cực.

3. Về hiệu quả của nhiệm vụ:

3.1. Hiệu quả kinh tế

Năng lượng và môi trường là những đang được đặt ra và thu hút nhiều sự chú ý của các nhà khoa học và thương mại. Nội dung của nhiệm vụ này sẽ góp phần thúc đẩy phát triển các vật liệu rẻ tiền, thân thiện môi trường ứng dụng trong xử lý ô nhiễm môi trường và lưu trữ năng lượng. Từ đó, có thể góp phần phát triển kinh tế thông qua giảm thiểu ô nhiễm môi trường, phát triển các nguồn năng lượng sạch nhờ có hệ thống lưu trữ tốt.

3.2. Hiệu quả xã hội

Như đã đề cập ở trên, năng lượng và môi trường là những thách thức được đặt ra cho sự phát triển kinh tế và chất lượng cuộc sống của con người. Vì thế, việc nghiên cứu tìm kiếm các giải pháp nhằm giảm thiểu ô nhiễm môi trường sẽ đóng góp một ý nghĩa rất lớn đến cộng đồng. Trong nhiệm vụ này, các chất xúc tác quang tiềm năng, đặc biệt g-C₃N₄ pha tạp oxy có thể được phát triển để góp phần xử lý ô nhiễm môi trường một cách hiệu quả. Ngoài ra, nhân loại đang đối mặt với cạn kiệt tài nguyên nhiên liệu hóa thạch và đang chạy đua với các nguồn năng lượng thân thiện môi trường và có tính bền vững. Các nghiên cứu của nhiệm vụ phần nào đóng góp chung cho giải pháp tìm hệ thống lưu trữ năng lượng hiệu quả, góp phần phát triển các nguồn năng lượng xanh nhưng phụ thuộc thời tiết, không gian, thời gian, như điện mặt trời, điện gió.

III. Tự đánh giá, xếp loại kết quả thực hiện nhiệm vụ

1. Về tiến độ thực hiện: (đánh dấu vào ô tương ứng):

- Nộp hồ sơ đúng hạn
- Nộp chậm từ trên 30 ngày đến 06 tháng
- Nộp hồ sơ chậm trên 06 tháng

2. Về kết quả thực hiện nhiệm vụ:

- Xuất sắc
- Đạt
- Không đạt

Cam đoan nội dung của Báo cáo là trung thực; Chủ nhiệm và các thành viên tham gia thực hiện nhiệm vụ không sử dụng kết quả nghiên cứu của người khác trái với quy định của pháp luật.

CHỦ NHIỆM NHIỆM VỤ



TS. Nguyễn Văn Thắng

**THỦ TRƯỞNG
TỔ CHỨC CHỦ TRÌ NHIỆM VỤ**



TS. Lê Thị Kim Nga