

Bình Định, ngày 10 tháng 3 năm 2022

**THÔNG TIN**  
**VỀ NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN TIẾN SĨ**

Tên luận án: *Nghiên cứu độ bền và bản chất tương tác của một số hợp chất hữu cơ có nhóm chức với CO<sub>2</sub> và H<sub>2</sub>O bằng phương pháp Hóa học lượng tử*

Chuyên ngành: Hóa lí thuyết và hóa lí ..... Mã số: 9440119.....

Nghiên cứu sinh: PHAN ĐẶNG CẨM TÚ .....

Khóa: 5 (2017-2021).....

Người hướng dẫn khoa học: PGS.TS. Nguyễn Tiến Trung.....

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Quy Nhơn**

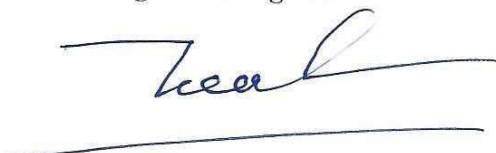
**CÁC ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN**

1. Luận án đã xác định được cấu trúc và độ bền của các phức giữa hợp chất hữu cơ có nhóm chức gồm (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>SO, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CS, CH<sub>3</sub>OCHX<sub>2</sub> (X = H, F, Cl, Br, H, CH<sub>3</sub>), (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>S, CH<sub>3</sub>OH, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>SH với các phân tử CO<sub>2</sub> khi có và không có mặt các phân tử H<sub>2</sub>O. Việc thêm một phân tử H<sub>2</sub>O hoặc CO<sub>2</sub> vào làm tăng độ bền của phức, trong đó phân tử H<sub>2</sub>O làm tăng độ bền của phức nhiều hơn so với phân tử CO<sub>2</sub>. Đây là một khảo sát có ý nghĩa cho các nghiên cứu thực nghiệm sau này nhằm mục đích phát triển các vật liệu ưa CO<sub>2</sub> và các ứng dụng liên quan đến CO<sub>2</sub>.

2. Vai trò và bản chất của tương tác không cộng hóa trị đóng vào việc làm bền các phức được làm rõ bằng các phương pháp hóa học lượng tử với độ chính xác cao. Phức giữa hợp chất hữu cơ và CO<sub>2</sub> được làm bền chính bởi liên kết tetrel C...O, và độ bền của phức có mặt H<sub>2</sub>O được quyết định bởi liên kết hydro O-H...O/S. Khả năng cộng kết của các tương tác hình thành trong các phức với 2H<sub>2</sub>O mạnh hơn so với phức với 1CO<sub>2</sub>+1H<sub>2</sub>O và mạnh hơn nhiều so với phức 2CO<sub>2</sub>.

3. Các kết quả tính toán trong nghiên cứu này cung cấp một cơ sở dữ liệu đáng tin cậy về xu hướng hình thành cấu trúc, độ bền, tính chất của các liên kết không cộng hóa trị. Đặc biệt, xu hướng thay đổi hình học bền trong phức chất của ethanol với 1-5 phân tử CO<sub>2</sub> đã được tìm ra và được hi vọng sẽ đóng góp vào việc tìm hiểu quá trình hòa tan ethanol trong scCO<sub>2</sub>.

Người hướng dẫn

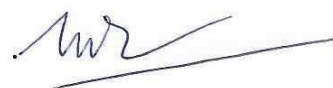


PGS.TS. Nguyễn Tiến Trung

Bình Định, ngày 10 tháng 3 năm 2022

Nghiên cứu sinh

(ký, ghi rõ họ, tên)



Phan Đặng Cẩm Tú