

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM HÀ NỘI

ĐỀ TÀI

**Nghiên cứu tổng hợp, xác định các đặc trưng
và tính chất một số polythiophene mới,
ứng dụng trong siêu tụ điện**

(Đề tài thuộc chương trình 562)

Mã số: B2019-SPH.562 - 05

Chủ nhiệm đề tài: PGS. TS Vũ Quốc Trung
Cơ quan chủ trì: Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Hà Nội, 2019

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM HÀ NỘI**

ĐỀ TÀI

**Nghiên cứu tổng hợp, xác định các đặc trưng
và tính chất một số polythiophene mới,
ứng dụng trong siêu tụ điện**

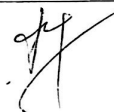
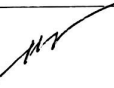
(Đề tài thuộc chương trình 562)

Mã số: B2019-SPH.562-05

**Chủ nhiệm đề tài: PGS. TS Vũ Quốc Trung
Cơ quan chủ trì: Trường Đại học Sư phạm Hà Nội**

Hà Nội, 2019

THUYẾT MINH ĐỀ TÀI KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ CẤP BỘ
THUỘC CHƯƠNG TRÌNH PHÁT TRIỂN KHOA HỌC CƠ BẢN TRONG LĨNH VỰC
HÓA HỌC, KHOA HỌC SỰ SỐNG, KHOA HỌC TRÁI ĐẤT VÀ KHOA HỌC BIỂN

1. TÊN ĐỀ TÀI Nghiên cứu tổng hợp, xác định các đặc trưng và tính chất một số polythiophene mới, ứng dụng trong siêu tụ điện		2. MÃ SỐ B2019-SPH- 662 - 05		
3. LĨNH VỰC NGHIÊN CỨU Hóa học ☒ Khoa học trái đất ☐ Khoa học sự sống ☐ Khoa học biển ☐		4. LOẠI HÌNH NGHIÊN CỨU Cơ bản ☒		
5. THỜI GIAN THỰC HIỆN 24 tháng Từ tháng 1 năm 2019 đến tháng 12 năm 2020				
6. TỔ CHỨC CHỦ TRÌ ĐỀ TÀI Tên tổ chức chủ trì: Trường Đại học Sư phạm Hà Nội Điện thoại: 04-37547823 E-mail: p.hcth@hnue.edu.vn Địa chỉ: 136 Xuân Thủy, Cầu Giấy, Hà Nội Họ và tên thủ trưởng tổ chức chủ trì: GS. TS. Nguyễn Văn Minh				
7. CHỦ NHIỆM ĐỀ TÀI Họ và tên: Vũ Quốc Trung Học vị: TS Chức danh khoa học: PGS/GVCC Năm sinh: 1972 Địa chỉ cơ quan: 136 Xuân Thủy, Cầu Giấy, Hà Nội Điện thoại di động: 0904518801 Điện thoại cơ quan: 04-37547823 Fax: E-mail: trungvq@hnue.edu.vn				
8. NHỮNG THÀNH VIÊN THAM GIA NGHIÊN CỨU ĐỀ TÀI				
TT	Họ và tên	Đơn vị công tác và lĩnh vực chuyên môn	Nội dung nghiên cứu cụ thể được giao	Chữ ký
1	PGS.TS Vũ Quốc Trung	Trường Đại học Sư phạm Hà Nội – Hóa hữu cơ/polyme	- Chủ nhiệm đề tài - Quyết định hướng nghiên cứu, tổ chức thực hiện, đăng báo trong nước và quốc tế	
2	TS Đường Khánh Linh	Trường Đại học Sư phạm Hà Nội – Hóa hữu cơ/polyme	- Thư kí đề tài - Mua hóa chất - Tham gia tổng hợp monome và polyme	
3	TS. Ngô Tuấn Cường	Trường Đại học Sư phạm Hà Nội – Hóa vô cơ/Hóa lý thuyết	- Thành viên chính - Xác định đặc trưng và nghiên cứu tính chất của polythiophene tổng hợp được	
4	TS. Vũ Thị Hương	Trường Đại học Sư phạm Hà Nội – Hóa phân tích	- Thành viên chính - Phân tích cấu trúc, nghiên cứu tính chất monome và polyme	

5	TS. Nguyễn Thiên Vương	Viện Kỹ thuật nhiệt đới - Polyme	- Thành viên chính - Lựa chọn polyme tổng hợp được chế tạo siêu tụ điện	
6	TS. Lê Trọng Lư	Viện Kỹ thuật nhiệt đới - Khoa học vật liệu	- Thành viên chính - Lựa chọn vật liệu phối hợp, chế tạo và xác định đặc trưng của siêu tụ điện	
7	TS. Nguyễn Thúy Chinh	Viện Kỹ thuật nhiệt đới - Hóa lý/Polyme	- Thành viên chính - Nghiên cứu các đặc trưng và tính chất của polythiophene	
8	TS Hà Mạnh Hùng	Trường Đại học Mô địa chất - Hóa hữu cơ/polyme	- Thành viên chính - Tham gia tổng hợp monome và polyme	
9	TS. Đoàn Thị Yên Oanh	Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam - Polyme	- Thành viên chính - Xử lý, phân tích số liệu, lên chế bản các bài báo	
10	Cử nhân/Nghiên cứu sinh Trần Thị Thủy Dương	Trường Chuyên Biên Hòa, Hà Nam - Hóa hữu cơ	- Kỹ thuật viên - Tổng hợp monome và polyme, - Nghiên cứu các đặc trưng và tính chất của polythiophene	
9. ĐƠN VỊ PHỐI HỢP CHÍNH				
Tên đơn vị trong và ngoài nước		Nội dung phối hợp nghiên cứu		Họ và tên người đại diện đơn vị
Viện Kỹ thuật nhiệt đới		- Chế tạo siêu tụ điện - Xác định các đặc trưng của siêu tụ		GS.TS Thái Hoàng - Viện trưởng



10. TỔNG QUAN TÌNH HÌNH NGHIÊN CỨU THUỘC LĨNH VỰC CỦA ĐỀ TÀI Ở TRONG VÀ NGOÀI NƯỚC

Có hai phương pháp cơ bản để tổng hợp polythiophene là phương pháp hóa học và phương pháp điện hóa:

- Phương pháp điện hóa có một số ưu điểm như: sản phẩm tạo thành có độ tinh khiết cao, quá trình pha tạp và độ dày của màng có thể điều khiển được dễ dàng bằng thay đổi điện áp, khả năng bám tốt lên bề mặt điện cực nên thường được ứng dụng trong chế tạo các linh kiện điện tử. Tuy nhiên, việc tổng hợp bằng phương pháp điện hóa đòi hỏi thiết bị tổng hợp tương đối phức tạp và hiệu quả không cao.
- Phương pháp hóa học thường cho polyme có độ dẫn điện ở mức độ trung bình nhưng vẫn được sử dụng rộng rãi trong công nghiệp và trong phòng thí nghiệm do có những ưu điểm vượt trội như: điều kiện phản ứng đơn giản, dễ thực hiện, dễ tách thu sản phẩm và có thể sản xuất lượng lớn trong quy mô công nghiệp. Bởi vậy, nội dung của phần tổng hợp các dẫn xuất của polythiophene sẽ tập trung đề cập tới phương pháp polyme hóa học do những ưu điểm đưa ra rất phù hợp với việc nghiên cứu tổng hợp trong quy mô phòng thí nghiệm.

10.1. Trong nước *(phân tích, đánh giá tình hình nghiên cứu thuộc lĩnh vực của đề tài ở Việt Nam, liệt kê danh mục các công trình nghiên cứu, tài liệu có liên quan đến đề tài được trích dẫn khi đánh giá tổng quan)*

Trong những năm gần đây, tại Việt Nam, có một số nhóm đã nghiên cứu về tổng hợp, chế tạo polyme dẫn, cũng như định hướng ứng dụng vào thực tế.

- Nhóm nghiên cứu của GS.TS. Nguyễn Đức Nghĩa (Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam) đã có rất nhiều công trình nghiên cứu về các polyme như poly(phenylvinylene), polypyrrole và polyaniline, copolyme và ứng dụng của chúng trong điốt phát quang và pin mặt trời hữu cơ [1-4].
- Nhóm nghiên cứu của GS.TS. Trần Đại Lâm (Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam) đã nghiên cứu tổng hợp, đặc trưng vật lý và hóa học một số vật liệu tổ hợp cấu trúc nano trên nền polyme thiên nhiên chitosan và polyme dẫn polyaniline, polypyrrole với $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Ag}$: nano chitosan, $\text{Ag}/\text{chitosan}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{chitosan}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{polypyrrole}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{polyaniline}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{polyaniline}/\text{PSA}$. Nghiên cứu làm vật liệu chế tạo cảm biến sinh học để xác định nồng độ glucose và cholesterol [5-6].
- Nhóm nghiên cứu của PGS.TS. Mai Anh Tuấn (Trường Đại học Bách khoa Hà Nội), GS.TS Trần Trung, TS Chu Văn Tuấn (Trường Sư phạm Kỹ thuật Hưng Yên) đã nghiên cứu tổng hợp dây nano polyaniline bằng phương pháp điện hóa lên vi điện cực Pt, khảo sát các đặc tính, cấu trúc và ứng dụng trong cảm biến khí và cảm biến sinh học [7-10].
- Về tổng hợp dẫn xuất polythiophene của nhóm nghiên cứu TS. Nguyễn Trần Hà (Trường Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh): Tổng hợp nghiên cứu tiềm năng của regioregular star-shaped poly(3-hexylthiophene) cho ứng dụng pin năng lượng mặt trời có sử dụng nền chất polyme [11].

Tại Trường Đại học Sư phạm Hà Nội, nhóm nghiên cứu của chúng tôi có một số nghiên cứu tổng hợp dẫn xuất của thiophene và polythiophene. Chúng tôi tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc, tính chất của 3-(benzothiazol-2-yl)thiophene, 4-amino-3-(thiophen-3-yl-methyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione, *N*-(4-oxo-2-sulfanylidene-1,3-thiazolidin-3-yl)-2-(thiophen-3-yl)acetamide, 4-phenyl-3-(thiophen-3-yl-methyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione [12-15] và một số dẫn xuất polythiophene như chứa dị vòng 1,2,4-triazole, dị vòng 2-thioxo-1,3-thiazolidin-4-one hay nhóm hydrazine ở vị trí số 3 của vòng thiophene [16-18].

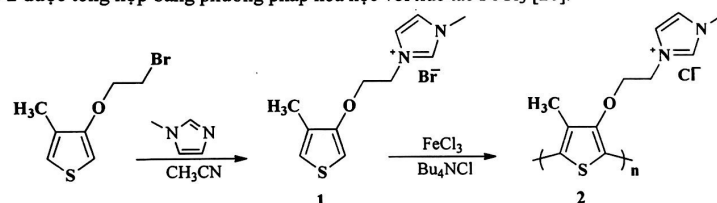
Tài liệu tham khảo

- [1] Nguyễn Thị Luyến, Nguyễn Đức Nghĩa và Ngô Trịnh Tùng (2007), Nghiên cứu quá trình tổng hợp và tính chất dẫn điện của polypyrrol, *Tạp chí Hoá học*, 45, pp. 123-127.
- [2] Nguyễn Đức Nghĩa, Ngô Trịnh Tùng và Jung-Il Jin (2007), Tổng hợp và nghiên cứu tính chất quang điện của poly(phenylvinylene) (PPV) và copolyme của nó bằng phương pháp lắng đọng pha hơi hoá học, *Tạp chí khoa học và công nghệ*, 45, pp. 225-231.
- [3] Nguyen Duc Nghia and Ngo Trinh Tung (2008), Preparation and characterization of nanostructured conducting polymers and conducting polymer nanocomposites, *Advances in Natural Sciences*, 9(2), pp. 171-190.
- [4] Nguyen Duc Nghia and Ngo Trinh Tung (2009), Study on Synthesis and Anticorrosion Properties of Polymer Nanocomposite based on Super Paramagnetic Fe_2O_3 .NiO Nanoparticles and Polyaniline, *Synthetic Metals*, 159, pp. 831-834.
- [5] Nguyễn Hải Bình, Đặng Thị Thu Huyền, Lê Trọng Huyền, Nguyễn Ngọc Thịnh, Nguyễn Lê Huy, Vũ Thị Hải Yến, Vũ Như Quỳnh, Đỗ Phúc Quân, Nguyễn Tuấn Dung và Trần Đại Lâm (2013), Điện trùng hợp màng polypyrrol pha tạp hạt nano oxit sắt từ ứng dụng chế tạo cảm biến sinh học điện hóa xác định glucose, *Tuyển tập báo cáo hội nghị Hóa học toàn quốc*, pp. 312-319.
- [6] Nguyen H. B., Van Chuc Nguyen, Van Tu Nguyen, Thi Thanh Tam Ngo, Ngoc Thinh Nguyen, Thi Thu Huyen Dang, Tran Dai Lam, Do Phuc Quan, Nguyen Xuan Nghia, Phan Hong Khoi and Phan Ngoc Minh (2012), Graphene patterned, polyaniline - based biosensor for glucose detecton, *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.*, 3(2), 025011 (5pp).
- [7] Chu Văn Tuấn (2013), *Nghiên cứu tổng hợp dây nano polyaniline bằng phương pháp điện hoá ứng dụng trong chế tạo cảm biến*, Luận án Tiến sĩ, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội.
- [8] Chu Văn Tuấn, Nguyễn Thị Nguyệt, Ngô Đức Tùng và Trần Trung (2011), Ảnh hưởng của tốc độ quét thế tuần hoàn đến cấu trúc mạng các dây nano polyaniline lên vi điện cực platin, *Tạp chí Nghiên cứu khoa học và Công nghệ quân sự*, 16, pp. 130-135.
- [9] Chu Văn Tuấn, Mai Anh Tuấn và Trần Trung (2011), Nghiên cứu tính chất nhạy khí của dây nano polymer dẫn ở nhiệt độ phòng, *Hội nghị Vật lý chất rắn & KHVLT toàn quốc lần thứ 7 (SPMS-2011)*, TP.Hồ Chí Minh, 7-9/11/2011.
- [10] Chu Văn Tuấn, Mai Anh Tuấn và Trần Trung (2012), Nghiên cứu chế tạo cảm biến nhạy hơi ethanol trên cơ sở vật liệu polymer dẫn điện, *Tạp chí Hóa học*, 50(1), pp. 63-67.
- [11] Nguyễn Trần Hà (2016), Nghiên cứu tổng hợp và phân tích Regioregular Star-shaped Poly(3-hexylthiophene) cho ứng dụng pin năng lượng mặt trời dựa trên nền chất Polymer, Đề tài nghiên cứu NAFOSTED, Trường Đại học Bách khoa, TP Hồ Chí Minh.
- [12] Trung Vu Quoc, Linh Nguyen Ngoc, Dai Do Ba, Thang Pham Chien, Hung Nguyen Huy and Luc Van Meervelt, Crystal structure and Hirshfield surface analysis of 4-phenyl-3-(thiophen-3-yl-methyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione, *Acta Crystallographica Section E*, 2018. E74, 812-815.
- [13] Linh Nguyen Ngoc, Trung Vu Quoc, Hoan Duong Quoc, Manh Vu Quoc, Luong Truong Minh, Chien Thang Pham and Luc Van Meervelt, Green synthesis and crystal structure of 3-(benzothiazol-2-yl)thiophene, *Acta Crystallographica Section E*, 2017. E73, 1647-1651.
- [14] Trung Vu Quoc, Linh Nguyen Ngoc, Vy Do Truc, Linh Duong Khanh, Hung Ha Manh, Chien Thang Pham and Luc Van Meervelt, Crystal structure of 4-amino-3-(thiophen-3-yl-methyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione, *Acta Crystallographica Section E*, 2017. E73, 1389-1392.

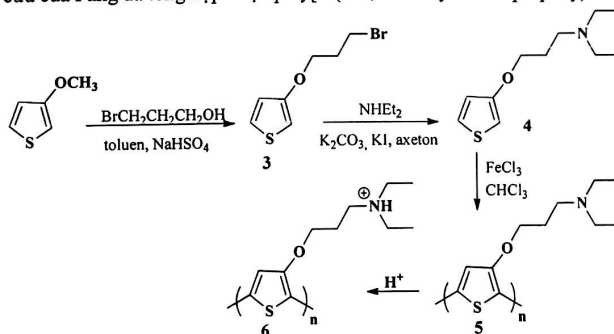
- [15] Trung Vu Quoc, Linh Nguyen Ngoc, Cong Nguyen Tien, Chien Thang Pham and Luc Van Meervelt, Crystal structure of *N*-(4-oxo-2-sulfanylidene-1,3-thiazolidin-3-yl)-2-(thiophen-3-yl)acetamide, Acta Crystallographica Section E, 2017. E73, 901–904.
- [16]. Vũ Quốc Trung, Nguyễn Ngọc Linh, Vi Thị Hòa, Trần Thị Thùy Dương và Đường Khánh Linh (2015). Tổng hợp polythiophen chứa dị vòng 5 cạnh 1,2,4-triazol, Tạp chí Hóa học, 53(6e1,2), 5-9.
- [17] Vu Quoc Trung, Nguyen Ngoc Linh, Duong Khanh Linh and Jiri Pflieger (2016). *Synthesis and characterization of polythiophenes from hydrazone derivatives sidegroups*, Vietnam Journal of Chemistry, 54(6).
- [18] Nguyen Ngoc Linh, Tran Thi Doan, Nguyen Tien Cong, Duong Khanh Linh, Jiri Pflieger and Vu Quoc Trung (2016). *Synthesis of polythiophene containing 2-thioxo-1,3-thiazolidin-4-one heterocycle*, Vietnam Journal of Chemistry, 54(6e1), 259-263.

10.2. Ngoài nước (phân tích, đánh giá tình hình nghiên cứu thuộc lĩnh vực của đề tài trên thế giới, liệt kê danh mục các công trình nghiên cứu, tài liệu có liên quan đến đề tài được trích dẫn khi đánh giá tổng quan)

Năm 2001, nhóm nghiên cứu của Lukkari đã tổng hợp được poly-3-(3'-thienyloxy)propyltriethylammonium) tan tốt trong nước sử dụng monome tương ứng từ 3-(3-bromo)-propoxythiophene, triethylamine trong ethanol, và trùng hợp monome này bằng phương pháp hóa học với xúc tác FeCl_3 [19]. Sau đó, năm 2002, Ho và cộng sự đã tổng hợp monome **1** bằng cách cho 3-(3-bromo)-propoxythiophene tác dụng với 1-methyl imidazole trong acetonitrile ở 70°C (hiệu suất 88%). Polyme **2** được tổng hợp bằng phương pháp hóa học với xúc tác FeCl_3 [20].

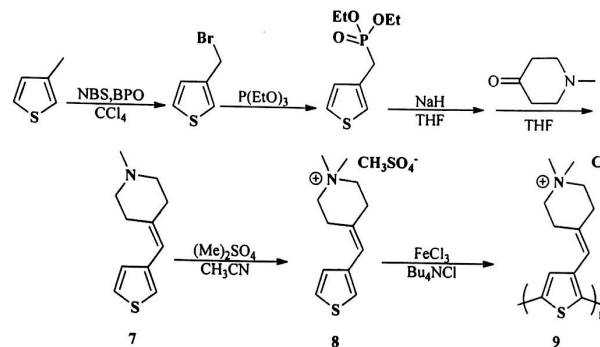


Nhóm nghiên cứu của Pang đã tổng hợp được poly[3-(3-*N,N*-diethyl aminopropoxy)thiophene] [21].

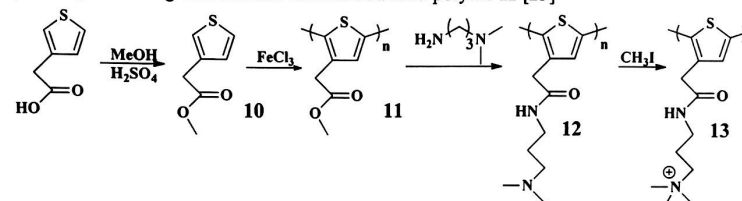


Năm 2012, nhóm nghiên cứu của Li đã tổng hợp dẫn xuất của thiophene **8** bằng cách cho **7** tác dụng với Me_2SO_4 trong acetonitrile, sau đó polyme hóa thu được poly[3-(1,10-dimethyl-4-

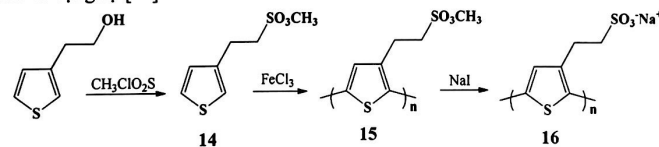
piperidinemethylene)thiophene-2,5-diyl chloride] 9 [22].



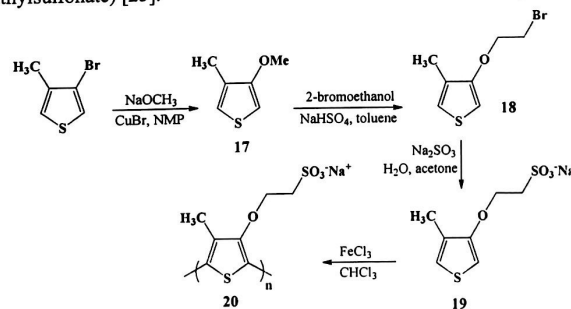
Bên cạnh đó, sơ đồ tổng hợp poly(*N,N,N*-trimethyl-3-(2-(thiophen-3-yl)acetamido)propan-1-aminium iodide) 13 được nhóm nghiên cứu của Carroen đưa ra từ polyme 11 [23]



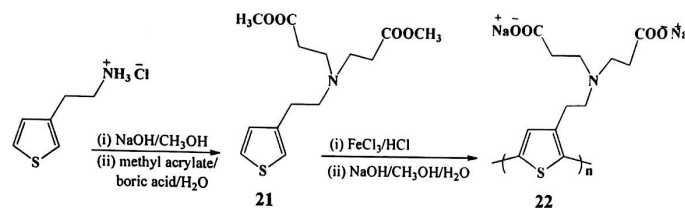
Năm 1987, polythiophene sulfonate lần đầu tiên được tổng hợp thành công sử dụng phương pháp gián tiếp bởi Patil và cộng sự [24].



Quy trình trên cũng được nhóm nghiên cứu dùng để tổng hợp dẫn xuất sodium poly(3-thiophene-δ-buthylsulfonate) [25].

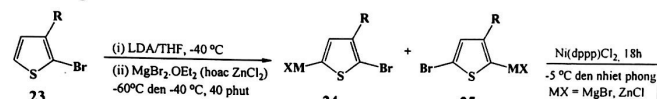


Wang và các cộng sự đã tổng hợp được polythiophene carboxylate **22** [26].

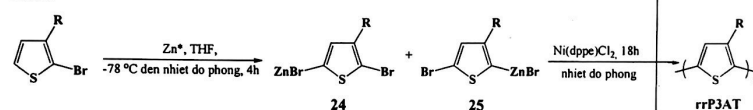


Ngoài ra, các dẫn xuất của polythiophene với cấu trúc điều hòa thường được tổng hợp qua ba phương pháp phổ biến với xúc tác ghép cặp chéo Nikel: McCullough [27], Rieke [28] và GRIM (Grignard metathesis) [29].

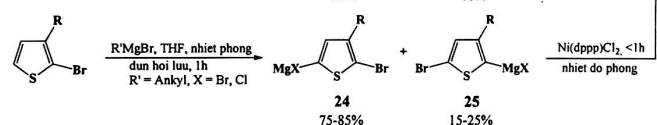
McCullough



Rieke



GRIM



Tài liệu tham khảo

- [19] Lukkari J., Salomalki M., Viinikanoja A., Aaritalo T., Paukkunen J., Kocharova N. and Kankare J. (2001), Polyelectrolyte Multilayers Prepared from Water-Soluble Poly(alkoxythiophene) Derivatives, *J. Am. Chem. Soc.*, 123, pp. 6083-6091.
- [20] Ho H. A., Boissinot M., Bergeron M. G., Corbeil G., Dore K., Boudreau D. and Leclerc M. (2002), Colorimetric and fluorometric detection of nucleic acids using cationic polythiophene derivatives, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 41(9), pp. 1548-1551.
- [21] Pang X., Imin P., Zhitomirsky I. and Adronov A. (2010), Amperometric Detection of Glucose Using a Conjugated Polyelectrolyte Complex with Single-Walled Carbon Nanotubes, *Macromolecules*, 43(24), pp. 10376-10381.
- [22] Li E., Lin L., Wang L., Pei M., Xu J. and Zhang G. (2012), Synthesis of a New Cationic Polythiophene Derivative and Its Application for Colorimetric and Fluorometric Detection of Iodide Ion and Anionic Surfactants in Water, *Macromol. Chem. Phys.*, 213(9), pp. 887-892.
- [23] Carreon A. C., Santos W. L., Matson J. B. and So R. C. (2014), Cationic polythiophenes as responsive DNA-binding polymers, *Polym. Chem.*, 5(2), pp. 314-317.
- [24] Patil A. O., Basescu Y. I. N., Colaneri N., Chen J., Wudl F. and Heeger A. J. (1987), Self-doped

conducting polymers, *Synth. Met.*, 20(2), pp. 151-159.

[25] Patil A. O., Ikenoue Y., Wudl F. and Heeger A. J. (1987), Water soluble conducting polymers. *J. Am. Chem. Soc.*, 109(6), pp. 1858-1859.

[26] Wang Y. Z., Gebler D. D., Fu D. K., Swager T. M. and Epstein A. J. (1997), Color variable bipolarac light-emitting devices based on conjugated polymers, *Appl. Phys. Lett.*, 70(24), pp. 3212-3217.

[27] McCullough R. D. and Lowe R. D. (1992), Enhanced electrical conductivity in regioselectively synthesized poly(3-alkylthiophenes), *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, pp. 70-72.

[28] Chen T. A. and Rieke R. D. (1992), The first regioregular head-to-tail poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl) and a regiorandom isopolymerr: Ni vs Pd catalysis of 2(5)-bromo-5(2)-(bromozincio)-3-hexylthiophene polymerrization, *J. Am. Chem. Soc.*, 114, pp. 10087.

[29] Loewe R. S., Khersonsky S. M. and McCullough R. D. (1999), A simple method to prepare head-to-tail coupled, regioregular poly(3-alkylthiophenes) using Grignard metathesis, *Adv. Mater.*, 11(3), pp. 250-253.

10.3. Danh mục các công trình đã công bố thuộc lĩnh vực của đề tài của chủ nhiệm và những thành viên tham gia nghiên cứu (họ và tên tác giả; bài báo; ấn phẩm; các yếu tố về xuất bản)

a) Của chủ nhiệm đề tài (các bài báo ISI và các công trình tiêu biểu khác trong 5 năm gần nhất)

1. Vu Quoc Trung, Trinh Hong Hanh, Tran Hong Quang, Ha Manh Hung, Duong Khanh Linh, Hoang Thi Tuyen Lan & Le Minh Duc (2018) Corrosion protection of molybdate doped polypyrrole film prepared in succinic acid solution, *Corrosion Engineering, Science and Technology*, 53:sup1, 59-66.

2. Thi-Xuan Chu, Van-Vu-Quan Trieu, Quang-Thinh Tran, Duc-Thanh Pham, Quoc-Trung Vu, Hong-Thuy Tran, and Tuan Mai Anh, Possible Monitoring and Removal of As(III) by an Integrated System of Electrochemical Sensor and Nanocomposite Materials, *Journal of Nanomaterials*, 2018, Article ID 9250463.

3. Cong Nguyen Tien, Thinh Nguyen Van, Giang Le Duc, Manh Vu Quoc, Trung Vu Quoc, Thang Pham Chien, Hung Nguyen Huy, Anh Dang Thi Tuyen, Tuyen Nguyen Van and Luc Van Meervelt, Synthesis, structure and in vitro cytotoxicity testing of some 1,3,4-oxadiazoline derivatives from 2-hydroxy-5-iodobenzoic acid, *Crystallographica Section C*, 2018, C74, 839-846.

4. Vu Q. Trung, Nguyen T. H. Trang, Tran M. Thi, Khongvilay Vorayuth, Nguyen M. Nghia and Mai A. Tuan, Synthesis and Properties of Fe₃O₄/Polyaniline Nanomaterial and Its Ability of Removing Arsenic in Wastewater, *Materials Transactions*, Vol. 59, No. 7 (2018) pp. 1095-1100.

5. Nguyen Ngoc Ha, Ngo Tuan Cuong, Hoang Van Hung, Ha Manh Hung, Vu Quoc Trung, Electronic properties of the polypyrrole-dopant anions ClO₄⁻ and MoO₄²⁻: a density functional theory study. *J. Mol. Model.*, (2017) 23:336, <https://doi.org/10.1007/s00894-017-3509-3>

6. Thien Vuong Nguyen, Phi Hung Dao, Khanh Linh Duong, Quoc Hoan Duong, Quoc Trung Vu, Anh Hiep Nguyen, Van Phuc Mac and Trong Lu Le, *Effect of R-TiO₂ and ZnO nanoparticales on the UV-shielding efficiency of water – borne carylic coating*, *Progress in Organic Coatings*, 2017, 110, 114-121.

7. Minh Thi Tran, Thi Huyen Trang Nguyen, Quoc Trung Vu, and Minh Vuong Nguyen, *Properties of poly(1-naphthylamine)/Fe₃O₄ composites and arsenic adsorption capacity in wastewater*, *Front. Mater. Sci.* 2016, 10(1), 56–65.

8. Dang Xuan Thu, Vu Quoc Trung, Nguyen Manh Nghia, Nguyen Cao Khang & Tran Dai Lam. *Effects of Fe Doping on the Structural, Optical, and Magnetic Properties of TiO₂ Nanoparticles*. Journal of Electronic Materials, 2016, 45 (11), 6033–6037.
 9. Vu Quoc Trung, Pham Van Hoan, Duong Quang Phung, Le Minh Duc, Le Thi Thu Hang. *Double corrosion protection mechanism of molipdate doped polypyrrole/montmorillonite nanocomposites*. J. of Experimental Nanoscience, 2014, 9(3), 282-292.
 10. Tran Minh Thi, Nguyen Thi Hien, Dang Xuan Thu, Vu Quoc Trung. *Thin films containing Mn-doped ZnS nanocrystalline synthesised by chemical method and some optical properties*. J. of Experimental Nanoscience, 2013, Vol. 8(2013), No.5, pp. 530-538.
 11. Trung Vu Quoc, Linh Nguyen Ngoc, Dai Do Ba, Thang Pham Chien, Hung Nguyen Huy and Luc Van Meervelt, Crystal structure and Hirshfield surface analysis of 4-phenyl-3-(thiophen-3-yl-methyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione, Acta Crystallographica Section E, 2018. E74, 812-815.
 12. Linh Nguyen Ngoc, Trung Vu Quoc, Hoan Duong Quoc, Manh Vu Quoc, Luong Truong Minh. Chien Thang Pham and Luc Van Meervelt, Green synthesis and crystal structure of 3-(benzothiazol-2-yl)thiophene, Acta Crystallographica Section E, 2017. E73, 1647–1651.
 13. Trung Vu Quoc, Linh Nguyen Ngoc, Vy Do Truc, Linh Duong Khanh, Hung Ha Manh, Chien Thang Pham and Luc Van Meervelt, Crystal structure of 4-amino-3-(thiophen-3-yl-methyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione, Acta Crystallographica Section E, 2017. E73, 1389–1392.
 14. Trung Vu Quoc, Linh Nguyen Ngoc, Cong Nguyen Tien, Chien Thang Pham and Luc Van Meervelt, Crystal structure of *N*-(4-oxo-2-sulfanylidene-1,3-thiazolidin-3-yl)-2-(thiophen-3-yl)acetamide, Acta Crystallographica Section E, 2017. E73, 901–904.
- b) Của các thành viên tham gia nghiên cứu (các bài báo ISI và công trình tiêu biểu khác trong 5 năm gần nhất)
1. Vu Thi Huong, Toshinori Shimanouchi, Naoya Shimauchi, Hisashi Yagi, Hiroshi Umakoshi, Yuji Goto, Ryoichi Kuboi, The Effect of Liposome Membrane on Kinetic of Dopamine Disaggregate A β Fibril, Biochemical Engineering Journal, 71, 15 February 2013, Pages 118–126
 2. Toshinori Shimanouchi, Keiichi Nishiyama, Azusa Hiroiwa, Huong Thi Vu, Nachi Kitaura, Hiroshi Umakoshi, Ryoichi Kuboi, Growth Behavior of A β Protofibrils on Liposome Membranes and their membrane perturbation effect, Biochemical Engineering Journal, Volume 71, 15 February 2013, Pages 81-88
 3. Vu Thi Huong, Hiroyuki Yoshikawa, Le Quynh Hoa, Hitoshi Toake, Toshiyuki Shibata, Eiichi Tamiya, Comprehensive interrogation of electrochemical reaction and energy conversion of a direct fucose fuel cell, Journal of Solid State Electrochemistry, May 2016, Volume 20, Issue 5, pp 1481–1488
 4. Nur Syakimah Ismail, Le Quynh Hoa, Vu Thi Huong, Yuki Inoue, Hiroyuki Yoshikawa, Masato Saito, Eiichi Tamiya, Electrochemiluminescence Based Enzymatic Urea Sensor Using Nanohybrid of Isoluminol-gold Nanoparticle-graphene Oxide Nanoribbons, Electroanalysis, 2017, Volume 29, Issue 4, pp 938 – 943.
 5. Nguyen Thuy Chinh, Trinh Anh Truc, Dinh Thi Mai Thanh, Nguyen Thi Thu Trang, Thai Hoang, Tran Dai Lam, Nguyen Van Khoi, Study on preparation, morphology, and some properties of EVA/silica nanocomposites, International Journal of Nanotechnology, Vol. 10, No 3/4, 351- 362, 2013.
 6. Thai Hoang, Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Thi Thu Trang, To Thi Xuan Hang, Dinh Thi Mai

- Thanh, Dang Viet Hung, Chang-Sik Ha, Maclene Aufray, Effects of maleic anhydride grafted ethylene/vinyl acetate copolymer (EVA) on properties of EVA/silica nanocomposites, *Macromolecular Research*, Vol 21 (11), 2092-7673, 2013.
7. Thai Hoang, Trinh Anh Truc, Dinh Thi Mai Thanh, Nguyen Thuy Chinh, Do Quang Tham, Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Vu Giang and Vu Dinh Lam, Tensile, rheological properties, thermal stability, and morphology of ethylene vinyl acetate copolymer/silica nanocomposites using EVA-g-maleic anhydride, *Journal of Composite Materials*, Vol. 48, 505-511, 2014.
 8. Vu Minh Trong, Vu Manh Tuan, Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Vu Giang, Nguyen Thi Thu Trang, Dinh Thi Mai Thanh, To Thi Xuan Hang, Thai Hoang, Characterization of fly ash modified with vinyltriethoxysilane, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Volume 15, Number 8, August, 5905-5909, 2015.
 9. Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Thi Thu Trang, Dinh Thi Mai Thanh, To Thi Xuan Hang, Nguyen Vu Giang, Thai Hoang, Nguyen Tien Dung, Pham Minh Quan, Thermal property, morphology and hydrolysis ability of poly(lactic acid)/chitosan nanocomposites using polyethylene oxide, *Journal of Applied Polymer Science*, Vol 132 (12), 3934-3939, 2015.
 10. Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Vu Giang, Dinh Thi Mai Thanh, Tran Dai Lam, Thai Hoang, PLA/CS/Nifedipine nanocomposite films: Properties and the in-vitro release of nifedipine, *Journal of Electronic Materials*, Vol. 45 (7), 3581–3590, 2016.
 11. Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Vu Giang, Dinh Thi Mai Thanh, To Thi Xuan Hang, Nguyen Quang Tung, Chu Quang Truyen, Pham Minh Quan, Pham Quoc Long, Thai Hoang, In vitro nifedipine release from poly(lactic acid)/chitosan nanoparticles loaded with nifedipine, *Journal of Applied Polymer Science*, 132 (12), 3934-3939, 2016.
 12. Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Thuy Chinh, Dinh Thi Mai Thanh, To Thi Xuan Hang, Nguyen Vu Giang, Thai Hoang, Pham Minh Quan, Le Duc Giang, Nguyen Viet Thai, and Geoffrey Lawrence, Investigating the Properties and Hydrolysis Ability of Poly-Lactic acid/Chitosan Nanocomposites using Polycaprolactone, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 15 (12), 9585– 9590, 2015.
 13. Do Quang Tham, Vu Manh Tuan, Dinh Thi Mai Thanh, Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Vu Giang, Nguyen Thi Thu Trang, To Thi Xuan Hang, Ho Thu Huong, Nguyen Thi Kim Dung, Thai Hoang, Preparation and properties of EVA/silica nanocomposites in presence of EVA-g-acrylic acid, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Apr;15(4):2777-84, 2015.
 14. Do Van Cong, Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Vu Giang, Tran Huu Trung, Nguyen Thuy Chinh, Mai Duc Huynh, Thai Hoang, and Jun Seo Park, Preparation and Characterization of Nanocomposites Based on Poly(ethylene-co-vinyl acetate), Polylactic Acid, and TiO₂ Nanoparticles, *Polymer(Korea)*, Vol. 40, No. 3, pp. 355-364, 2016.
 15. Do Van Cong, Nguyen Vu Giang, Nguyen Thi Thu Trang, Tran Huu Trung, Nguyen Thuy Chinh, Geoffrey Lawrence, Thai Hoang, Studies on the degradation of EVA/PLA/TiO₂ nanocomposites under accelerated weathering, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 16 (9) 9612-962, 2016.
 16. Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Vu Giang, Dinh Thi Mai Thanh, Tran Dai Lam, Ngo Dai Quang, Thai Hoang, Study on hydrolysis of green nanocomposites based on Poly(lactic acid), chitosan and Polyethylene glycole in acid solution, *Green Processing and Synthesis*, 5 (5), 443-449, 2016.
 17. Do Quang Tham, Nguyen Thi Thu Trang, Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Vu Giang, Tran Dai Lam, Thai Hoang, Sustainable composite materials based on ethylene – vinylacetate copolymer and organo-

- modified silica, *Green Processing and Synthesis*, 5(6), 557-566, 2016.
18. Pham Gia Vu, Trinh Anh Truc, Nguyen Thuy Chinh, Do Quang Tham, Tran Huu Trung, Vu Ke Oanh, To Thi Xuan Hang, Marjorie Olivier, Thai Hoang, Improvement of mechanical and dielectric properties of epoxy resin by using CNTs/ZnO nanocomposite, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 18(4), 2830-2837, 2017.
19. Nguyen Thuy Chinh, Nguyen Thi Thu Trang, Tran Thi Mai, Dinh Thi Mai Thanh, Tran Huu Trung, Trinh Hoang Trung, Le Van Quan, Nguyen Thi Hoa, Can Van Mao, Nguyen Trong Nghia, Nguyen Thanh Hai, Tran Hong Anh, Tran Viet Hung, Jin-Ho Choy, Baskaran Rajesh, Nguyen Van Loi, and Thai Hoang, Polylactic acid/chitosan nanoparticles loading nifedipine: Characterization findings and *in vivo* investigation in animal, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2018 Apr 1;18(4):2294-2303, 2018.
20. Ho Ngoc Minh, Nguyen Thuy Chinh, Tran Thi Thanh Van, Dam Xuan Thang, and Thai Hoang, Characteristics And Morphology Of Nanosilica Modified With Isopropyl Tri (Dioctyl Phosphate) Titanate Coupling Agent, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 18(5), 3624-3630, 2018.
21. Tran Thi Mai, Nguyen Thuy Chinh, Rajesh Baskaran, Nguyen Thi Thu Trang, Vu Viet Thang, Dang Thi Thanh Le, Do Quang Minh, and Thai Hoang, Tensile, thermal, dielectric and morphological properties of Polyoxymethylene/Silica nanocomposites, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 18, 4963-4970, 2018.
22. Nguyen Thi Thu Trang, Tran Thi Mai, Nguyen Vu Giang, Tran Huu Trung, Do Van Cong, Nguyen Thuy Chinh, Trinh Hoang Trung, Tran Dai Lam and Thai Hoang, Study on characteristics, properties, and morphology of poly(lactic acid)/chitosan/hydroquinin green nanoparticles, *Green Process Synth* 2018; <https://doi.org/10.1515/gps-2018-0025>, 2018.
23. Thai Hoang, Kavitha Ramadass, Thach Thi Loc, Tran Thi Mai, Le Duc Giang, Vu Viet Thang, Tran Minh Tuan and Nguyen Thuy Chinh, Novel drug delivery system based on ginsenoside Rb1 loaded to chitosan/alginate nanocomposite films, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. Accepted 05/2018.
24. Tuan Anh Nguyen, The Huyen Nguyen, Thien Vuong Nguyen, Hoang Thai and Xianming Shi. "Effect of Nanoparticles on the Thermal and Mechanical Properties of Epoxy Coatings" *Nanosci. Nanotech.*, 16, 9874-9881 (2016).
25. Thien Vuong Nguyen, Phuong Nguyen Tri, Tuan Dung Nguyen, Rachid El Aidani, Van Thanh Trinh, Christian Decker. Accelerated degradation of water borne acrylic nanocomposites used outdoor protective coatings. *Polymer Degradation and Stability* (2016); 128: 65-76.
26. Thanh Dung Ngo, Thi My Hanh Le, The Huu Nguyen, Thien Vuong Nguyen, Tuan Anh Nguyen. Trong Lu Le, Thi Thai Nguyen, Thi Thanh Van Tran, Thi Bich Thao Le. Antibacterial nanocomposites based on Fe₃O₄-Ag hybrid nanoparticles and natural rubber-polyethylene blends. *International Journal of Polymer Science* (2016); Vol. 2016, Article ID 7478161, 9 pages.
27. Thien Vuong Nguyen, Xuan Hien Le, Phi Hung Dao, Christian Deckerc, Phuong Nguyen-Tri. Stability of acrylic polyurethane coatings under accelerated aging tests and natural outdoor exposure: The critical role of the used photo-stabilizers. *Progress in Organic Coatings* (2018); 124: 137-146.
28. Thien Vuong Nguyen, Tuan Anh Nguyen, Phi Hung Dao, Van Phuc Mac, Anh Hiep Nguyen, Minh Thanh Do and The Huu Nguyen. Effect of rutile titania dioxide nanoparticles on the mechanical property, thermal stability, weathering resistance and antibacterial property of styrene acrylic polyurethane coating. *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology* (2016); 7(4):

045015-045024.

29. X. Meng, H. Seton, L.T. Lu, I. Prior, N.T.K. Thanh, B. Song. "Tracking transplanted neural progenitor cells in spinal cord slices by MRI using CoPt nanoparticles as a contrast agent". *Nanoscale*, (2011) 3, 977.
30. C. T. Thanh, N. V. Chuc, N. T. T. Tam, L. T. Lu, N. T. Loc, T. D. Lam, E. D. Obrastova and P. N. Minh, "Effects of ferrite catalyst concentration and water vapor on growth of vertically aligned carbon nanotube". *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.* (2014) 045009 (6pp). doi:10.1088/2043-6262.
31. T. K. O.Vuong, D. L. Tran, T. L. Le, D. V. Pham, H. N. Pham, T. H. L. Ngo, H. M. Do, X. P. Nguyen. " Synthesis of high-magnetization and uniform Fe_3O_4 nanoparticles by thermal decomposition method". *Mater. Chem. & Phys.* (2015) 163, 537-544.
32. L. T. Lu, N. T. Dung, L. D. Tung, C. T. Thanh, O. K. Quy, N. V. Chuc, Shinya Maenosono, N. T. K. Thanh. "Synthesis of magnetic cobalt ferrite nanoparticles with controlled morphology, monodispersity and composition: The influence of solvent, surfactant, reductive agent and synthetic condition", *Nanoscale* (2015) 7, 19596-19610. (FRONT COVER)
33. T. V. Thu, P. J. Ko and L. T. Lu, "Green synthesis of rGO/ Fe_3O_4 /Ag ternary nanohybrid and its application as magnetically recoverable catalyst in the reduction of 4-nitrophenol", *Applied Organometallic Chemistry*, (2017), 31 (11), 1-9..
34. N. T. Dung, Nguyen V. Long, Le T. T. Tam, Le D. Tung, Pham H. Nam, Nguyen X. Phuc, Nguyen T. K. Thanh and Le T. Lu "High magnetisation, monodisperse and water-dispersible CoFe@Pt core/shell nanoparticles", *Nanoscale* (2017) 9, 8952-8961. (FRONT COVER)
35. D. T. Nguyen, L. T. Pham, H. T. T. Le, M. V. Xuan, H. T. M. Le, H. T. M. Le, N. H. Pham and L. T. Lu, "Synthesis and antibacterial properties of a novel magnetic nanocomposite prepared from spent pickling liquors and polyguanidine", *RSC Advances* (2018) 8, 19707-19712.
36. P. H. Nam, L. T. Lu, P. H. Linh, D. H. Manh, P. T. Phong and In-Ja Lee, "Polymer coated- CoFe_2O_4 NPs: Synthesis, Characterisation and Toxicity for Hyperthermia Applications", *New J. Chem.* (2018), (doi.10.1039/C8NJ01701H).
37. H. T. Dung, N. T. Dung, T. Q. Dung, D. T. Tung, N. T. Yen, L. T. T. Tam, T. V. Thu, P. N. Hong and L. T. Lu "Fabrication and Characterisation of Supercapacitor Electrode by 3D printing" *VN JSC* (2018) (accepted).
38. L. T. T. Tam, D. V. Hung, D. T. Tung, H. T. Dung, N. T. Dung, N. T. Dung, P. N. Minh, P. N. Hong and L. T. Lu "Synthesis and Electrochemical properties of CNTs-ferrite hybrid Nanostructures for Supercapacitor" *VN JSC* (2018) (accepted).
39. P. H. Nam, N. X. Phuc, B. T. Huy, b, In-Ja Lee L. T. Lu and P. T. Phong. " Effect of zinc concentration on the structural, optical and magnetic properties of mixed Co-Zn ferrites nanoparticles synthesized by low temperature hydrothermal method", *Journal of Alloys and Compounds*. 2018 (under reviewing).
40. D. T. Tung, L. T. T. Tam, H. T. Dung, N. T. Dung, P. N. Hong, T. V. Thu and L. T. Lu "Preparation and electrochemical Property of 3D printed graphene/ferritebased supercapacitor electrodes", *RSC Advances* (2018) (submitted).

11. TÍNH CẤP THIẾT CỦA ĐỀ TÀI

Sự phát triển của công nghệ thông tin và khoa học kỹ thuật cùng ứng dụng trong các thiết bị điện và quang điện tử, các polyme dẫn điện đang trở thành đối tượng nghiên cứu của các nhà khoa học trên toàn thế giới. Do tính ưu việt của polyme dẫn điện về mặt vật lý, hóa học, quang học và đặc biệt thân thiện với môi trường nên loại vật liệu này ngày càng được sử dụng rộng rãi trong các lĩnh vực như điốt phát quang polyme (PLEDs), tế bào quang điện hữu cơ (OPVs), pin mặt trời, transistor hiệu ứng trường hữu cơ (OFETs), cửa sổ thông minh, che chắn tia UV, bảo vệ chống ăn mòn kim loại, vật liệu hấp thụ sóng điện từ và đặc biệt là siêu tụ điện... Trong những năm gần đây, ứng dụng của polyme dẫn điện như polyaniline, polypyrrole, polythiophene,... trong cảm biến hóa học và sinh học cũng đang bùng nổ. Sự phát triển ngày càng hoàn thiện trong việc kiểm soát tính chất lý hóa của polyme thông qua quá trình tổng hợp, cũng như những nghiên cứu rõ ràng hơn về đặc tính điện và quang điện của polyme đã tạo điều kiện thuận lợi trong việc thiết kế, ứng dụng chúng vào thực tiễn.

So với các polyme dẫn điện khác, các polythiophene được chú trọng nghiên cứu do các đặc tính nổi bật của nó như phạm vi hoạt động điện hóa rộng, độ bền nhiệt cao, độ dẫn điện tốt, độ bền môi trường và cấu trúc linh hoạt vì có thể điều chỉnh bởi các nhóm thế khác nhau tại vị trí số 3 và 4 của vòng thiophene. Do vậy, tổng hợp polythiophene và các dẫn xuất của nó và khảo sát các tính chất của vật liệu để ứng dụng vào cuộc sống là một trong những hướng nghiên cứu được các nhà khoa học trong và ngoài nước quan tâm. Về cơ bản, polythiophene có thể được xem như là một chuỗi liên hợp gồm các nguyên tử cacbon sp^2 có cấu trúc tương tự với polyacetylene và được ổn định bởi các nguyên tử lưu huỳnh. Các polythiophene được tổng hợp bằng phương pháp polyme hóa hóa học với xúc tác $FeCl_3$ ở điều kiện phản ứng đơn giản, dễ tách thu sản phẩm và có thể sản xuất với lượng lớn. Đồng thời, cấu trúc polyme không điều hòa có thể được cải thiện bằng cách sử dụng monome liên hợp với dị vòng, các nhóm thế ankyl và ankoxi,... Nhờ đó, độ tan của các polythiophene được cải thiện đáng kể, mở ra các ứng dụng mới cho polyme này. Các polythiophene mới được các nhà khoa học trên thế giới và trong nước tổng hợp được bằng phương pháp polyme hóa hóa học chủ yếu là các polythiophene có chứa các nhóm alkyl, alkoxi, este, alcolat ở vị trí số 3 hoặc số 4, hoặc chứa các nhóm thế dị vòng được liên kết với vòng thiophene,... [1-4]. Các polythiophene này có độ tan khá tốt và độ bền nhiệt cao. Việc nghiên cứu tổng hợp các polythiophene mới bằng một số phương pháp mới và các polythiophene này có chứa các nhóm dị vòng mang điện hoặc các nhóm dị vòng liên hợp có chứa S, N là khá mới mẻ và chưa được tập trung nghiên cứu.

Ở Việt Nam, việc nghiên cứu tổng hợp và ứng dụng của các polyme dẫn, cụ thể là polyaniline và polypyrrole đang được phát triển rộng rãi chủ yếu cho các ứng dụng làm sensor điện hóa. Các nghiên cứu tổng hợp polythiophene và các dẫn xuất của nó để từ đó làm tiền đề cho các ứng dụng vào thực tiễn vẫn chưa được quan tâm nghiên cứu nhiều.

Những năm gần đây, một loại linh kiện lưu trữ năng lượng mới là siêu tụ điện đã thu hút sự quan tâm đặc biệt từ các nhà khoa học cũng như cả giới công nghiệp do những tính chất ưu việt như: thời gian nạp/phóng siêu nhanh (vài phút đến mili giây), tuổi thọ dài (có thể đạt tới > 100.000 lần phóng/nạp), và có mật độ công suất cao (kW/kg)[8]. Những đặc điểm này làm cho siêu tụ điện trở thành linh kiện có thể bổ sung hoặc thay thế cho pin/ắc quy trong các ứng dụng đòi hỏi thời gian nạp

nhận, cấp điện hoặc tiêu thụ điện với công suất cao biến thiên liên tục, hoặc trong các ứng dụng đòi hỏi độ ổn định phóng/nạp cao.

So với các pin hoặc ắc quy truyền thống, siêu tụ điện vẫn chưa được đưa vào ứng dụng rộng rãi trong thực tế do mật độ năng lượng riêng (specific energy density) còn rất thấp. Hiện nay, các siêu tụ điện có mật độ năng lượng riêng nằm trong khoảng 5-80 Wh/kg (các sản phẩm thương mại ≤ 10 Wh/kg), nhỏ hơn rất nhiều so với các pin/ắc quy truyền thống hiện đang sử dụng phổ biến (≈ 170 Wh/kg), dẫn tới kích thước của các siêu tụ điện lớn hơn nhiều so với các pin/ắc quy ở cùng mức năng lượng tích trữ [8, 9]. Việc phát triển các siêu tụ điện với mật độ năng lượng cao hơn để tiệm cận với pin sạc hiện hành, trong khi vẫn giữ được những đặc điểm riêng vượt trội của chúng hiện tại đang là xu hướng nghiên cứu trên thế giới. Ngoài ra, chi phí chế tạo các vật liệu dùng làm điện cực cần phải giảm sâu để giảm giá thành siêu tụ điện.

Để tăng mật độ năng lượng của các siêu tụ điện, cách phổ biến nhất là tăng điện dung riêng của vật liệu điện cực. Xu hướng hiện nay trên thế giới là tạo ra các vật liệu điện cực mới có thành phần hóa học hoặc có kết cấu đặc biệt với diện tích bề mặt riêng lớn dẫn tới tăng khả năng tích trữ điện tích (tăng điện dung của tụ điện). Với mục đích này, các nghiên cứu được tiến hành chủ yếu theo các hướng sau:

i) chế tạo các vật liệu điện cực có diện tích bề mặt riêng lớn (dựa trên cơ chế điện dung lớp điện tích kép).

ii) tổng hợp ra các vật liệu có khả năng tích trữ điện tích cao dựa trên cơ chế giả điện dung liên quan đến các phản ứng oxy hóa khử.

iii) tạo ra vật liệu tích trữ điện tích kết hợp đồng thời cả cơ chế bề mặt và cơ chế giả điện dung.

Theo xu thế này, các polyme dẫn sử dụng làm điện cực cho siêu tụ điện rất được quan tâm nghiên cứu do độ dẫn điện cao, khả năng tích trữ năng lượng cao liên quan đến cơ chế chuyển dời điện tử kiểu Faraday với các phản ứng oxy hóa khử đan xen, và đặc biệt là gia công điện cực đơn giản (có thể chế tạo ở dạng màng mỏng) và có giá thành chế tạo thấp [10-12].

Cho đến nay, một số polyme dẫn điển hình thường được sử dụng chế tạo điện cực siêu tụ điện là polyaniline, polypyrrole, hoặc poly(3,4-ethylenedioxythiophene). Điện dung riêng của các điện cực siêu tụ điện làm từ các polyme loại này có giá trị nằm trong khoảng 200-1200 F/g. Các nghiên cứu về tổng hợp polythiophene và các dẫn suất của nó cho các ứng dụng làm điện cực siêu tụ điện còn rất hạn chế. So với polyaniline và polypyrrole, điện cực làm từ polythiophene thường có độ dẫn điện và độ bền điện hóa tốt hơn. Điều này giúp giảm điện trở nội của siêu tụ điện và đặc biệt là kéo dài tuổi thọ của linh kiện.

Mục tiêu của đề tài là tổng hợp ra một số dẫn xuất của polythiophene mới, kết hợp với những vật liệu tiên tiến khác (như graphene...) ứng dụng làm điện cực, từ đó tạo ra siêu tụ điện dung cao, có sự ổn định.

Tài liệu tham khảo

[1]. Lin Wang, Xian Wu, Xiangyong Wang, Qilong Feng, Meishan Pei & Guangyou Zhang. Designed Monomers and Polymers, 16:4, 2013, 39-348.

- 2]. Jorge Dircio, Adriana Gelover-Santiago, Carolina Caicedo, Maria del Pilar Carreón-Castro, Yazmín Valdez-Hernández & Ernesto Rivera, *Designed Monomers and Polymers*, 15:2, 2012, 175-95.
- 3]. L. Qi, M. Sun, S. Dong, *Journal of Applied Polymer Science*, 102(2), 2006, 1803-1808.
- 4]. Valderrama-García, B., Rodríguez-Alba, E., Morales-Espinoza, E., Moineau Chane-Ching, K., & Rivera, E., *Molecules*, 21(2), 2016, 172.
- 5]. Alexis Laforgue, Patrice Simon, Christian Sarrazin, Jean-Francois Fauvarque, *Journal of Power Sources* 80, 1999, 142-148.
- 6]. J. P. Melo, E. N. Schulz, C. Morales-Verdejo, S. L. Horswell, M. B. Camarada, *Int. J. Electrochem. Sci.* 12, 2017, 2933 – 2948.
- 7]. Akram Alabadi, Shumaila Razzaque, Zehua Dong, Weixing Wang, Bien Tan, *Journal of Power Sources*, 306, 2016, 241-247.
- 8]. Simon, P. and Gogotsi, Y. *Nat. Mater.* **2008**, 7, 845-854.
- 9]. Wang, G.; Zhang, L. and Zhang, J. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, 41, 797-828.
- 10]. Mastragostino, M.; Arbizzani, C. and Soavi, F. J. *Power Source.* **2011**, 77, 812815.
- 11]. Shown, I.; Ganguly, A.; Chen, L. C. and Chen, K. H. *Energy Science & Engineer.* **2015**, 3, 2-26.
- 12]. Snook, G. A. Kao, P, and Best, A. S. J. *Power Source.* **2011**, 196, 1-12.

12. MỤC TIÊU ĐỀ TÀI

Mục tiêu của đề tài là tổng hợp được một số dẫn xuất mới của polythiophene, kết hợp chúng với vật liệu tiên tiến khác (như graphene...) ứng dụng làm điện cực, từ đó tạo ra siêu tụ điện dung cao có khả năng ứng dụng trong lĩnh vực điện, điện tử.

13. ĐỐI TƯỢNG, PHẠM VI NGHIÊN CỨU

13.1. Đối tượng nghiên cứu

Tổng hợp 15 polythiophene mới, nghiên cứu đặc trưng, tính chất và ứng dụng trong siêu tụ điện

13.2. Phạm vi nghiên cứu

- Tổng hợp toàn phần polythiophene mới xuất phát từ các dẫn xuất đơn giản của thiophene như 3-thiophenecarbaldehyde, 3-thiopheneacetic acid...
- Nghiên cứu cấu trúc của monome và polyme bằng phương pháp IR, Raman, NMR, X-ray đơn tinh thể
- Nghiên cứu đặc trưng, tính chất của polyme bằng phương pháp TGA, đo độ dẫn điện, huỳnh quang, phương pháp điện hóa CV, EIS...
- Lựa chọn 2 polyme, phối trộn với vật liệu graphene và chế tạo siêu tụ

14. CÁCH TIẾP CẬN, PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

14.1. Cách tiếp cận

- Từ các tài liệu tổng quan về tổng hợp polythiophene ở Việt Nam và trên thế giới.
- Từ các kết quả nghiên cứu trước của nhóm nghiên cứu.
- Từ nhu cầu thực tế về ứng dụng các polythiophene, đặc biệt là ứng dụng làm vật liệu điện cực siêu tụ điện.

14.2. Phương pháp nghiên cứu

- Phương pháp tổng hợp monome và polyme:

+ Các monome và dẫn xuất polythiophene được chế tạo bằng phương pháp hóa học xuất phát từ các dẫn xuất đơn giản, dễ kiếm của thiophene như 3-thiophenecarbaldehyde, 3-thiopheneacetic acid... Các nhóm chức của các hợp chất này được chuyển hóa bằng các phản ứng ngưng tụ, bằng cách đun hồi lưu hoặc thực hiện dưới sự hỗ trợ của lò vi sóng.

+ Các monome và polythiophene mới dự kiến được tổng hợp theo 3 sơ đồ đề xuất trong mục 15.1 (phía dưới), trong đó có quy trình tổng hợp 13 monome (sơ đồ 1: 6 monome, sơ đồ 2: 6 monome và sơ đồ 3: 1 monome).

+ Phản ứng polyme hóa được thực hiện trong môi trường nitơ (để tránh các phản ứng oxi hóa không mong muốn) dưới sự có mặt của hệ oxi hóa FeCl_3 hoặc $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ hoặc phối kết hợp hai tác nhân này. Trong đó 15 polythiophene mới dự kiến được tổng hợp từ 13 monome trên.

- Phương pháp đặc trưng tính chất, hình thái cấu trúc của monome và polyme:

+ Phương pháp phổ hồng ngoại (IR): dùng để định tính và định lượng các nhóm đặc trưng trong vật liệu, xác định các tương tác giữa các thành phần trong vật liệu và là cơ sở để xác định cấu trúc của vật liệu. Các monome và polyme được tiến hành đo phổ hồng ngoại ở dạng bột hoặc dạng màng mỏng với các điều kiện sau: độ phân giải 16 cm^{-1} , số lần quét 8 lần trong dải bước sóng từ $4000\text{ cm}^{-1} - 400\text{ cm}^{-1}$.

+ Phương pháp cộng hưởng từ hạt nhân (NMR): là phương pháp hiện đại và hữu hiệu nhất được dùng để nghiên cứu cấu trúc của các hợp chất hữu cơ. Nguyên lý chung của phương pháp phổ NMR là sự cộng hưởng các tần số khác nhau của hạt nhân từ (^1H hoặc ^{13}C) dưới tác dụng của từ trường. Các tần số cộng hưởng khác nhau này được biểu diễn bằng độ chuyển dịch hóa học. Các monome sẽ được xác định cấu trúc bằng phổ $^1\text{H-NMR}$.

+ Phương pháp quang phổ Raman: Quang phổ Raman là kỹ thuật tán xạ ánh sáng. Sự tương tác giữa ánh sáng laser với các phân tử của mẫu tạo ra đồ thị phổ Raman sẽ cho biết nhiều thông tin của mẫu như thành phần hóa học và sự phân bố, cấu trúc phân tử. Các polyme sẽ được xác định cấu trúc bằng phổ Raman.

+ Phương pháp khối phổ (MS): là một kỹ thuật phân tích hóa học giúp xác định hàm lượng nguyên tố và xác định phân tử khối của chất nguyên cứu bằng cách đo tỷ lệ khối lượng trên điện tích và số lượng của các ion pha khí. Ngoài ra, MS còn hỗ trợ xác định cấu tạo của các monome tổng hợp được. Một số monome sẽ được xác định cấu trúc bằng phương pháp MS.

+ Phương pháp nhiễu xạ tia X đơn tinh thể: cho phép xác định cấu trúc tinh thể một cách trực quan, thông qua đó xác định được các thông số cơ bản của tinh thể như: độ dài liên kết, góc liên kết, nhóm tinh thể... Một số monome có khả năng kết tinh cho tinh thể tốt sẽ được xác định cấu trúc bằng phương pháp đo X-ray đơn tinh thể.

+ Phương pháp phân tích nhiệt khối lượng (TGA): là phương pháp xác định sự thay đổi khối lượng mẫu phân tích vào nhiệt độ, xác định nhiệt phân hủy và nhiệt nóng chảy của chất cần đo; là một trong những phép đo quan trọng để xác định độ bền nhiệt của các polyme đã được tổng hợp. Phân tích nhiệt

vi sai (Differential Thermal Analysis – DTA) là phương pháp phát hiện sự chênh lệch nhiệt độ của mẫu đo và mẫu chuẩn để xác định những biến đổi về nhiệt bên trong mẫu đang diễn ra sự thay đổi vật lý hoặc hóa học gia nhiệt hoặc làm lạnh. Dùng để khảo sát định tính các phản ứng tỏa nhiệt và thu nhiệt, nhiệt độ bắt đầu và kết thúc của phản ứng. Môi trường sử dụng trong phép đo TGA là môi trường khí trơ hoặc không khí. Độ bền nhiệt của các polyme sẽ được xác định bằng phương pháp TGA.

+ Phương pháp hiển vi điện tử quét (SEM): Kính hiển vi điện tử quét là thiết bị dùng để chụp ảnh vi cấu trúc bề mặt với độ phóng đại lớn gấp nhiều lần so với kính hiển vi quang học, vì bước sóng của chùm tia điện tử nhỏ hơn rất nhiều so với bước sóng của ánh sáng vùng khả kiến. Phương pháp SEM cho ta biết đặc trưng bề mặt và cấu trúc vật liệu cần nghiên cứu. Mẫu ở dạng tấm phẳng được phủ một lớp vàng mỏng hoặc platin để dẫn điện. Mẫu được chụp trong môi trường khí nitơ.

+ Phương pháp đo độ dẫn điện: Độ dẫn điện của các mẫu được đo ở trạng thái rắn. Mẫu thường được ép ở dạng viên nén với đường kính 0,5 cm. Phương pháp đo độ dẫn điện nhằm đánh giá khả năng dẫn điện của các polyme.

+ Phương pháp đo phổ huỳnh quang: Phổ huỳnh quang biểu thị mối liên hệ giữa cường độ huỳnh quang với bước sóng phát quang khi có ánh sáng kích thích. Nguyên lý của phép đo là khi vật liệu bị kích thích bởi ánh sáng, các điện tử ở mức HOMO nhận năng lượng kích thích sẽ chuyển lên mức LUMO, tạo ra các cặp điện tử - lỗ trống. Sau khoảng thời gian rất ngắn, các cặp điện tử - lỗ trống tái hợp và bức xạ, tạo ra huỳnh quang. Một số polyme sẽ được xác định tính chất quang bằng phép đo phổ huỳnh quang.

+ Phương pháp đo Von-Ampe vòng: Đường cong dòng thế tuần hoàn của polyme được xác định bằng phương pháp Von-Ampe vòng trong dung dịch điện li và khoảng thế thích hợp với từng mẫu. Lựa chọn 1 polyme trong dãy Poly_03 để nghiên cứu tính chất Von-Ampe vòng.

+ Phương pháp đo tổng trở điện hóa: xác định tính chất điện hóa của 1 polyme trong dãy poly_03.

- Phương pháp chế tạo vật liệu điện cực siêu tụ điện: Vật liệu điện cực siêu tụ điện được chế tạo bằng thiết bị in 3D.

- Phương pháp xác định các đặc trưng và khả năng duy trì phóng nạp của siêu tụ điện:

+ Phương pháp đo quét thế vòng: để đánh giá điện dung, điện áp làm việc, phản ứng oxi hóa khử, tuổi thọ nạp-xả của điện cực siêu tụ điện.

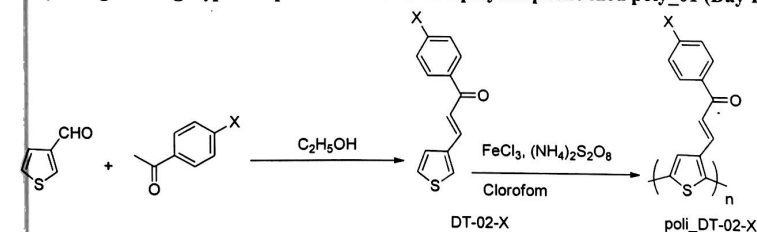
+ Phương pháp hiển vi điện tử quét (SEM): để xác định bề mặt, cấu trúc của vật liệu điện cực.

15. NỘI DUNG NGHIÊN CỨU VÀ TIẾN ĐỘ THỰC HIỆN

15.1. Nội dung nghiên cứu (Mô tả chi tiết những nội dung nghiên cứu của đề tài)

Để thực hiện được mục tiêu của đề tài, nhóm nghiên cứu dự kiến thực hiện các nội dung chính sau:

- Nội dung 1: Tổng hợp toàn phần 6 monome và 6 polythiophene kiểu poly_01 (Dãy Poly_01):



X: H, OH, OCH₃, OC₂H₅, Cl, Br, CH₃, ...

- Nội dung 2: Tổng hợp toàn phần 6 monome và 6 polythiophene kiểu poly_02 (Dãy Poly_02):

phương pháp IR, NMR, Raman, SEM, NMR, TGA, đo độ dẫn điện, đo huỳnh quang, tính toán lý thuyết...

Nội dung 4: Xác định một số tính chất, đặc trưng của một số monome kết tinh cho cấu trúc tinh thể tốt

+ Xác định phổ MS của 5 monome thiophene đại diện để góp phần xác định cấu trúc của monome tổng hợp được.

+ Xác định cấu trúc đơn tinh thể của 4 monome kết tinh cho tinh thể tốt để góp phần khẳng định cấu trúc monome tổng hợp được.

Nội dung 5: Xác định tính chất điện hóa của 01 polyme trong dãy poly_03:

+ Xác định tính chất von -ampe vòng của 1 polyme dãy poly_03

+ Xác định phổ tổng trở điện hóa của 1 polyme dãy poly_03

Nội dung 6: Chế tạo và đặc trưng tính chất của siêu tụ điện trên cơ sở 2 polythiophene tổng hợp được

+ Lựa chọn 2 polythiophene tổng hợp được, nghiên cứu chế tạo các điện cực siêu tụ điện.

+ Chế tạo graphene

+ Chế tạo siêu tụ điện bằng công nghệ in 3D và khảo sát đặc trưng phóng nạp của chúng

15.2. Tiến độ thực hiện

STT	Các nội dung, công việc thực hiện	Sản phẩm	Thời gian (bắt đầu-kết thúc)	Người thực hiện
I	Nội dung 1: Tổng hợp toàn phần 6 polythiophene kiểu poly_01 theo (dãy poly_01)	Quy trình tổng hợp toàn phần 6 polythiophene kiểu poly_01 theo sơ đồ 1	1/2019-6/2019	Vũ Quốc Trung, Hà Mạnh Hùng, Trần Thị Thủy Dương, Nguyễn Thiên Vương, Nguyễn Thúy Chinh, Đoàn Thị Yến Oanh
I.1	Công việc 1: Tổng hợp polythiophene poly_01_01		1/2019-3/2019	
1.1.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_01_01	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	1/2019-2/2019	Trần Thị Thủy Dương
1.1.2	Tổng hợp polythiophene poly_01_01	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	2/2019-3/2019	Nguyễn Thiên Vương
I.2	Công việc 2: Tổng hợp polythiophene poly_01_02		1/2019-3/2019	
1.2.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_01_02	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	1/2019-2/2019	Hà Mạnh Hùng
1.2.2	Tổng hợp polythiophene poly_01_02	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện, phổ huỳnh quang	2/2019-3/2019	Vũ Quốc Trung
I.3	Công việc 3: Tổng hợp polythiophene poly_01_03		1/2019-3/2019	
1.3.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_01_03	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	1/2019-2/2019	Hà Mạnh Hùng

1.3.2	Tổng hợp polythiophene poly_01_03	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện, phổ huỳnh quang	2/2019-3/2019	Vũ Quốc Trung
1.4	Công việc 4: Tổng hợp polythiophene poly_01_04		4/2019-6/2019	
1.4.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_01_04	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	4/2019-5/2019	Trần Thị Thùy Dương
1.4.2	Tổng hợp polythiophene poly_01_04	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	5/2019-6/2019	Hà Mạnh Hùng
1.5	Công việc 5: Tổng hợp polythiophene poly_01_05		4/2019-6/2019	
1.5.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_01_05	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	4/2019-5/2019	Trần Thị Thùy Dương
1.5.2	Tổng hợp polythiophene poly_01_05	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	5/2019-6/2019	Nguyễn Thúy Chinh
1.6	Công việc 6: Tổng hợp polythiophene poly_01_06		4/2019-6/2019	
1.6.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_01_06	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	4/2019-5/2019	Trần Thị Thùy Dương
1.6.2	Tổng hợp polythiophene poly_01_06	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	5/2019-6/2019	Đoàn Thị Yến Oanh
II	Nội dung 2: Tổng hợp toàn phần 6 polythiophene kiểu poly_02 (dãy poly_02)	Quy trình tổng hợp toàn phần 6 polythiophene kiểu poly_02 theo sơ đồ 2	7/2019-9/2020	Vũ Quốc Trung, Đường Khánh Linh, Nguyễn Thiên Vương, Nguyễn Thúy Chinh, Đoàn Thị Yến Oanh, Vũ Thị Hương, Ngô Tuấn Cường
2.1	Công việc 1: Tổng hợp polythiophene poly_02_01		7/2019-9/2019	
2.1.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_02_01	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	7/2019-8/2019	Đường Khánh Linh
2.1.2	Tổng hợp polythiophene poly_02_01	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	8/2019-9/2019	Nguyễn Thiên Vương
2.2	Công việc 2: Tổng hợp polythiophene poly_02_02		7/2019-9/2019	
2.2.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_02_02	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	7/2019-8/2019	Nguyễn Thúy Chinh
2.2.2	Tổng hợp polythiophene poly_02_02	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện, phổ huỳnh quang	8/2019-9/2019	Vũ Quốc Trung

2.3	Công việc 3: Tổng hợp polythiophene poly_02_03		7/2019-9/2019	
2.3.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_02_03	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	7/2019-8/2019	Nguyễn Thủy Chính
2.3.2	Tổng hợp polythiophene poly_02_03	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	8/2019-9/2019	Đường Khánh Linh
2.4	Công việc 4: Tổng hợp polythiophene poly_02_04		10/2019-12/2019	
2.4.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_02_04	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	10/2019-11/2019	Đoàn Thị Yến Oanh
2.4.2	Tổng hợp polythiophene poly_02_04	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	11/2019-12/2019	Vũ Quốc Trung
2.5	Công việc 5: Tổng hợp polythiophene poly_02_05		10/2019-12/2019	
2.5.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_02_05	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	10/2019-11/2019	Vũ Thị Hương
2.5.2	Tổng hợp polythiophene poly_02_05	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	11/2019-12/2019	Ngô Tuấn Cường
2.6	Công việc 6: Tổng hợp polythiophene poly_02_06		10/2019-12/2019	
2.6.1	Tổng hợp monome để chế tạo polythiophene poly_02_06	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	10/2019-11/2019	Vũ Thị Hương
2.6.2	Tổng hợp polythiophene poly_02_06	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện, phổ huỳnh quang	11/2019-12/2019	Ngô Tuấn Cường
III	Nội dung 3: Tổng hợp toàn phần 3 polythiophene kiểu poly_03 (dãy poly_03)	Quy trình tổng hợp toàn phần 3 polythiophen kiểu poly_03 theo sơ đồ 3	1/2020-3/2020	Trần Thị Thùy Dương, Nguyễn Thiên Vương, Đoàn Thị Yến Oanh, Vũ Thị Hương
3.1	Công việc 1: Tổng hợp polythiophene poly_03_01		1/2020-3/2020	
3.1.1	Tổng hợp monome theo sơ đồ 3	Bộ số liệu IR, Raman, NMR	1/2020-2/2020	Trần Thị Thùy Dương
3.1.2	Tổng hợp polythiophene poly_03_01	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện, phổ huỳnh quang	2/2020-3/2020	Đoàn Thị Yến Oanh
3.2	Công việc 2: Tổng hợp polythiophene poly_03_02		1/2020-2/2020	
3.2.1	Tổng hợp polythiophene poly_03_02	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	1/2020-2/2020	Nguyễn Thiên Vương

3.3	Công việc 3: Tổng hợp polythiophene poly_03_03		2/2020-3/2020	
3.3.1	Tổng hợp polythiophene poly_03_03	Bộ số liệu IR, Raman, TGA, SEM, độ dẫn điện	2/2020-3/2020	Vũ Thị Hương
IV	Nội dung 4: Xác định một số tính chất, đặc trưng của một số monome kết tinh cho tinh thể tốt	01 báo cáo	1/2019-12/2019	Vũ Thị Hương, Ngô Tuấn Cường
4.1	Xác định phổ MS của 5 monome	Bộ số liệu phổ MS của 5 monome	1/2019-6/2019	Vũ Thị Hương
4.2	Xác định cấu trúc đơn tinh thể của 4 monome kết tinh cho tinh thể tốt	Bộ số liệu phổ X-ray đơn tinh thể của 4 monome	7/2019-12/2019	Ngô Tuấn Cường
V	Nội dung 5: Xác định tính chất điện hóa của 01 polyme trong dãy poly_03	01 báo cáo	1/2020-6/2020	Vũ Quốc Trung, Đường Khánh Linh
5.1	Xác định tính chất von -ampe vòng của polyme	Số liệu về CV của polyme	1/2020-6/2020	Đường Khánh Linh
5.2	Xác định phổ tổng trở điện hóa của polyme	Số liệu EIS của polyme	1/2020-6/2020	Vũ Quốc Trung
VI	Nội dung 6: Chế tạo và đặc trưng tính chất của siêu tụ điện trên cơ sở 2 polythiophene tổng hợp được	- Quy trình chế tạo điện cực siêu tụ điện. - 02 điện cực siêu tụ điện với + Điện dung = 30-50 F). + Điện áp = 2-3 V	4/2020-9/2020	Nguyễn Thiên Vương, Lê Trọng Lư
6.1	Công việc 1: Lựa chọn polyme tổng hợp được chế tạo điện cực siêu tụ điện		4/2020-6/2020	
6.1.1	Lựa chọn được 02 polythiophene phù hợp chế tạo điện cực siêu tụ điện	01 báo cáo	4/2020-6/2020	Nguyễn Thiên Vương
6.2	Công việc 2: Chế tạo graphene		7/2020-9/2020	
6.2.1	Chế tạo graphene	Bộ số liệu SEM, IR, EDX	7/2020-9/2020	Lê Trọng Lư
6.3	Công việc 3: Chế tạo siêu tụ điện bằng công nghệ in 3D và khảo sát đặc trưng phóng nạp của chúng		7/2020-9/2020	

5.3.1	Chế tạo 02 siêu tụ điện bằng công nghệ in 3D	02 siêu tụ điện	7/2020-9/2020	Lê Trọng Lư
6.3.2	Đánh giá đặc trưng siêu tụ điện 1	Bộ số liệu về điện dung, độ ổn định của điện cực và khả năng phóng nạp của điện cực	7/2020-9/2020	Lê Trọng Lư
6.3.2	Đánh giá đặc trưng siêu tụ điện 2	Bộ số liệu về điện dung, độ ổn định của điện cực và khả năng phóng nạp của điện cực	7/2020-9/2020	Lê Trọng Lư
7	Hội thảo khoa học - Nội dung: Tổng hợp, tính chất và ứng dụng của một số polythiophene - Địa điểm: Trường Đại học Sư phạm Hà Nội)	- 7 báo cáo hội thảo(3 báo cáo trình bày và 4 báo cáo không trình bày) - Biên bản hội thảo	10-12/2020	Vũ Quốc Trung và nhóm nghiên cứu
8	Hoàn thiện sản phẩm và báo cáo kết quả nghiên cứu đề tài, nghiệm thu đề tài	- 01 báo cáo tóm tắt - 01 báo cáo tổng kết đề tài	10/2020-12/2020	Vũ Quốc Trung và nhóm nghiên cứu
16. SẢN PHẨM				
Stt	Tên sản phẩm	Số lượng	Yêu cầu chất lượng sản phẩm (mô tả chi tiết chất lượng sản phẩm đạt được như nội dung, hình thức, các chỉ tiêu, thông số kỹ thuật,...)	
I	Sản phẩm khoa học (Các công trình khoa học sẽ được công bố: sách, bài báo khoa học...)			
1.1	Bài báo quốc tế uy tín	02 /	02 bài chấp nhận đăng, trong đó có 01 bài thuộc nhóm Q1, 01 bài thuộc nhóm Q3 căn cứ theo QĐ số 31/QĐ-HĐQL-Nafosted ngày 30/3/2016 của Quỹ PTKHCN Quốc gia phê duyệt Danh mục các tạp chí có uy tín và quốc tế có uy tín trong lĩnh vực KHTN và kỹ thuật	
1.2	Báo trong nước	01 /	01 bài được đăng trên Tạp chí chuyên ngành trong nước có chỉ số ISSN	
II	Sản phẩm đào tạo (Cử nhân, Thạc sĩ, Tiến sỹ,...)			
2.1	Tham gia đào tạo Tiến sỹ	01 /	Hỗ trợ đào tạo 01 nghiên cứu sinh theo hướng nghiên cứu của đề tài	

2.2	Tham gia đào tạo Thạc sỹ	01	Thạc sỹ bảo vệ thành công luận văn theo hướng nghiên cứu của đề tài
III	Sản phẩm ứng dụng		
3.1	Số liệu minh chứng siêu tụ có điện dung cao	1 bộ số liệu	Siêu tụ có điện dung cao (trên 50F/gam), duy trì được độ ổn định sau hàng ngàn chu kì phóng nạp
3.2	Quy trình tổng hợp polythiophene	1 bộ quy trình	Quy trình tổng hợp 15 polythiophene mới với độ ổn định cao. Quy trình được đánh giá, nghiệm thu cấp cơ sở.
3.3	Điện cực siêu tụ điện dạng prototype.	02	Điện dung 50-100 F, duy trì ≥ 80 % giá trị điện dung ban đầu sau 2000 lần phóng nạp

17. PHƯƠNG THỨC CHUYỂN GIAO KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ ĐỊA CHỈ ỨNG DỤNG

17.1. Phương thức chuyển giao

- Tiến hành mở rộng sản xuất, tìm kiếm bạn hàng tiềm năng, đối tác kinh doanh để góp vốn. Mặt khác, tiến hành chuyển giao công nghệ, đa dạng hóa sản phẩm để phù hợp với nhu cầu thị trường.
- Sau khi thực hiện thành công đề tài này, chúng tôi sẽ tiến hành sản xuất các loại điện cực siêu tụ ở quy mô pilot và quy mô công nghiệp, trước mắt đáp ứng nhu cầu thị trường trong nước và có thể xuất khẩu thông qua tiếp thị, quảng bá sản phẩm.

17.2. Địa chỉ ứng dụng

- Các trung tâm, cơ sở sản xuất các thiết bị tích trữ năng lượng

18. TÁC ĐỘNG VÀ LỢI ÍCH MANG LẠI CỦA KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

18.1. Đối với lĩnh vực giáo dục và đào tạo

- Góp phần đào tạo bậc đại học, sau đại học tiếp cận với chuẩn quốc tế

18.2. Đối với lĩnh vực khoa học và công nghệ có liên quan

- Góp phần phát hiện ra một số vật liệu mới và đề xuất được quy trình tổng hợp 15 polythiophene mới.
- Đánh giá được tính chất vật liệu tổng hợp được.

18.3. Đối với phát triển kinh tế-xã hội

- Phát triển thêm các loại siêu tụ sử dụng polythiophene tổng hợp được trong lĩnh vực điện, điện tử.

18.4. Đối với tổ chức chủ trì và các cơ sở ứng dụng kết quả nghiên cứu

- Đối với tổ chức chủ trì: Góp phần xây dựng và nâng cao vị thế của một nhóm nghiên cứu mạnh, góp phần công bố quốc tế trên các tạp chí hàng đầu thế giới (Q1), góp phần đào tạo bậc đại học và sau đại học tiếp cận chuẩn quốc tế.
- Đối với cơ sở ứng dụng kết quả nghiên cứu: Đa dạng hóa sản phẩm thương mại, phát triển được các thành tựu nghiên cứu trong phòng thí nghiệm thành các sản phẩm thương mại.

KINH PHÍ THỰC HIỆN ĐỀ TÀI VÀ NGUỒN KINH PHÍ

h phí thực hiện đề tài: 710.000.000 đồng

g đó:

gân sách Nhà nước: 710.000.000 đồng

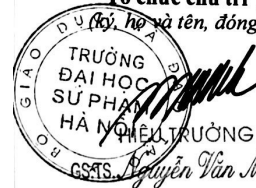
ác nguồn khác: 0

Khoản chi, nội dung chi	Thời gian thực hiện	Tổng kinh phí (đồng)	Nguồn kinh phí		Ghi chú
			Kinh phí từ NSNN	Các nguồn khác	
Chi tiền công lao động trực tiếp	1/2019-12/2020	343.886.000	343.886.000		
Chi mua vật tư, nguyên, nhiên, vật liệu	1/2019-12/2020	320.264.000	320.264.000		
Chi sửa chữa, mua sắm tài sản cố định					
Chi hội thảo khoa học, công tác phí	1/2019-12/2020	9.450.000	9.450.000		
Chi trả dịch vụ thuê ngoài phục vụ hoạt động nghiên cứu					
Chi điều tra, khảo sát thu thập số liệu					
Chi văn phòng, phẩm, thông tin liên lạc, in ấn					
Chi họp hội đồng đánh giá, nghiệm thu cấp cơ sở	12/2020	6.400.000	6.400.000		
Chi quản lý chung	1/2019-12/2020	30.000.000	30.000.000		
Chi khác					
Tổng cộng		710.000.000	710.000.000		

toán chi tiết các mục chi kèm theo và xác nhận của cơ quan chủ trì).

Ngày 16 tháng 12 năm 2019

Tổ chức chủ trì
(ký, họ và tên, đóng dấu)



Ngày 16 tháng 12 năm 2019

Chủ nhiệm đề tài
(ký, họ và tên)

PGS.TS Vũ Quốc Trung

Ngày 16 tháng 12 năm 2019

Cơ quan chủ quản duyệt

TL. BỘ TRƯỞNG BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
K. VỤ TRƯỞNG VIỆN KHOA HỌC, CÔNG NGHỆ VÀ MÔI TRƯỜNG



PHÓ VỤ TRƯỞNG VIỆN KHOA HỌC CÔNG NGHỆ VÀ MÔI TRƯỜNG

Nguyễn Hoàng Lan

**PHỤ LỤC KINH PHÍ THỰC HIỆN ĐỀ TÀI
TỔNG KINH PHÍ**

Đơn vị: đồng

TT	Nội dung các khoản chi	Tổng	%	Nguồn kinh phí		Ghi chú
				Từ Ngân sách nhà nước	Nguồn khác	
1	Tiền công lao động trực tiếp	343,886,000	48.43	343,886,000		
2	Chi mua vật tư, nguyên, nhiên, vật liệu	320,264,000	45.11	320,264,000		
3	Chi sửa chữa, mua sắm tài sản cố định	0	0.00			
4	Chi hội thảo khoa học, công tác phí	9,450,000	1.33	9,450,000		
5	Chi trả dịch vụ thuê ngoài		0.00			
6	Chi điều tra khảo sát thu thập số liệu		0.00			
7	Chi văn phòng phẩm, thông tin liên lạc, in ấn	0	0.00	0		
8	Chi họp hội đồng tự đánh giá kết quả thực hiện	6,400,000	0.90	6,400,000		
9	Chi phí quản lý chung nhiệm vụ KH&CN	30,000,000	4.23	30,000,000		
10	Chi khác liên quan trực tiếp		0.00			
Cộng:		710,000,000	100%	710,000,000		

Cơ quan chủ trì đề tài

(Ký, đóng dấu)



HIỆU TRƯỞNG
GS.TS. Nguyễn Văn Minh

Chủ nhiệm đề tài

(Ký ghi rõ họ tên)

PGS.TS Vũ Đức Tạng

1. Nhân công lao động khoa học (khoản chi)

Công lao động khoa học thực hiện theo mức lương cơ bản: 1.390.000đ

TT	Chức danh ⁽¹⁾	Số người	Số ngày công	Hệ số tiền công theo ngày	Tiền công (đồng)	Đơn vị: đồng	
						Nguồn kinh phí	
						Từ NSNN	Nguồn khác
1	Chủ nhiệm đề tài: PGS.TS. Vũ Quốc Trung	1	100	0.55	76,450,000	76,450,000	0
2	Thành viên thực hiện chính, thư ký khoa học: TS. Đường Khánh Linh	1	80	0.34	37,808,000	37,808,000	0
3	Thành viên chính: TS. Ngô Tuấn Cường	1	60	0.34	28,356,000	28,356,000	0
4	Thành viên chính: TS. Vũ Thị Hương	1	60	0.34	28,356,000	28,356,000	0
5	Thành viên chính: TS. Nguyễn Thiên Vương	1	60	0.34	28,356,000	28,356,000	0
6	Thành viên chính: TS. Lê Trọng Lư	1	100	0.34	47,260,000	47,260,000	0
7	Thành viên chính: TS. Nguyễn Thủy Chinh	1	60	0.34	28,356,000	28,356,000	0
8	Thành viên chính: TS. Hà Mạnh Hùng	1	50	0.34	23,630,000	23,630,000	0
9	Thành viên chính: TS. Đoàn Thị Yến Oanh	1	50	0.34	23,630,000	23,630,000	0
10	Kỹ thuật viên, nhân viên hỗ trợ: CN. Trần Thị Thùy Dương	1	120	0.13	21,684,000	21,684,000	0
Cộng:		10	740		343,886,000	343,886,000	0