

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO**  
**ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG**

**HÀ PHƯỚC HUY**

**NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT CƠ CHẾ PHẢN ỨNG**  
**GIẢI PHÓNG HYDRO CỦA CÁC VẬT LIỆU TRỮ HYDRO**  
**VÀ VAI TRÒ XÚC TÁC CỦA CÁC HYDRUA**

Chuyên ngành: CÔNG NGHỆ HÓA HỌC

Mã số: 60 52 75

**TÓM TẮT LUẬN VĂN THẠC SĨ KỸ THUẬT**

**Đà Nẵng - Năm 2011**

Công trình được hoàn thành tại  
**ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG**

Người hướng dẫn khoa học: **PGS.TS. PHẠM CẨM NAM**

Phản biện 1: TS. LÊ MINH ĐỨC

Phản biện 2: TS. TRẦN NGỌC TUYỀN

Luận văn sẽ được bảo vệ trước Hội đồng chấm Luận văn tốt nghiệp thạc sĩ kỹ thuật họp tại Đại học Đà Nẵng vào ngày 29 tháng 10 năm 2011

*Có thể tìm hiểu thông tin tại:*

- Trung tâm Thông tin - Học liệu, Đại học Đà Nẵng
- Trung tâm Học liệu, Đại học Đà Nẵng

## MỞ ĐẦU

### 1. TÍNH CẤP THIẾT CỦA ĐỀ TÀI NGHIÊN CỨU

Hiện nay việc tìm kiếm những nguồn năng sạch, có thể tái tạo được là vấn đề cấp bách đặt ra cho các nhà khoa học và các nhà quản lý kinh tế của các nước trên thế giới. Việc phát hiện ra hydro là một vật mang năng lượng đã mở ra một hướng phát triển cho yêu cầu năng lượng trong tương lai.

Trong lĩnh vực lưu trữ hydro (hydrogen storage) có rất nhiều phát triển và có nhiều cách thức lưu trữ. Có 3 phương pháp lưu trữ chính như sau: lưu trữ  $H_2$  ở dạng khí áp suất cao ( $>200$  bars), lưu trữ  $H_2$  ở dạng lỏng lạnh (21.2K ở áp suất phòng), và lưu trữ hydro ở dạng các hợp chất có chứa hydro nói chung (đặc biệt là các hợp chất hydrua).

Trên các cơ sở đó chúng tôi tiến hành đề tài: **“Nghiên cứu lý thuyết cơ chế phản ứng giải phóng Hydro của các vật liệu trữ Hydro và vai trò xúc tác của các hydrua”**.

### 2. MỤC ĐÍCH NGHIÊN CỨU

- Nghiên cứu cơ chế của các phản ứng giải phóng  $H_2$  của các vật liệu lưu trữ hydro đồng thời xem xét ảnh hưởng của các nhóm hydrua lên các phản ứng đó dựa trên sự mô phỏng về cấu trúc, mức năng lượng của các phân tử ở trạng thái nền, trạng thái chuyển tiếp dựa trên phần mềm **Gaussian 03**.

- Từ những cấu trúc phân tử, cơ chế phản ứng đã được tính toán chúng tôi sẽ tính toán động học phản ứng thông qua phần mềm động học **Chemrate**.

### **3. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHẠM VI NGHIÊN CỨU:**

#### ***3.1. Đối tượng nghiên cứu***

Các hợp chất lưu trữ hydro được chọn để tính toán và nghiên cứu có thể được liệt kê dưới đây: Ethane  $C_2H_6$ , Ammonia borane  $BH_3NH_3$ , Ammonia Alane  $AlH_3NH_3$ . Các hợp chất xúc tác là các hydrua như :  $BH_3$  (borane),  $AlH_3$  (aluminum hydride),  $MgH_2$  (magnesium hydride),  $NH_3$  (ammonia) v.v...

#### ***3.2. Phạm vi nghiên cứu***

Phạm vi của đề tài nghiên cứu này nghiên cứu các phản ứng giải phóng  $H_2$  của các chất lưu trữ hydro là : Ethane, ammonia borane, ammonia alane và tác động của các hydrua như  $BH_3$ ,  $AlH_3$ ,  $NH_3$ ,  $MgH_2$  lên các phản ứng trên.

### **4. Ý NGHĨA KHOA HỌC VÀ THỰC TIỄN CỦA ĐỀ TÀI**

Việc sử dụng công cụ hóa tính toán để nghiên cứu trong ngành hóa học có ý nghĩa vô cùng to lớn. Nó giúp cho các nhà hóa học có thể giải thích dễ dàng cơ chế các phản đã xảy ra trong thực tế nhưng chưa giải thích được. Đồng thời có thể nghiên cứu lý thuyết các phản ứng mới có thể xảy ra, tạo một định hướng cho các nghiên cứu thực nghiệm.

Việc tìm ra các chất lưu trữ hydro có dung lượng trữ hydro lớn và có khả năng giải phóng  $H_2$  dễ dàng có ý nghĩa thực tiễn rất quan trọng.

Việc tìm ra cơ chế giải phóng hydro và tính toán được các thông số nhiệt động học (nhiệt phản ứng, tốc độ phản ứng) các phản ứng

giải phóng  $H_2$  của vật liệu lưu trữ hydro là một vấn đề quan trọng trong việc nghiên cứu, tìm kiếm vật liệu lưu trữ hydro.

## **5. CẤU TRÚC CỦA LUẬN VĂN**

Nội dung của luận văn bao gồm 3 chương:

Chương 1. Giới thiệu vật liệu lưu trữ hydro, gồm 12 trang.

Chương 2. Cơ chế các phản ứng giải phóng  $H_2$  của vật liệu lưu trữ hydro và vai trò xúc tác của hydrua lên các phản ứng, gồm 52 trang

Chương 3. Động học các phản ứng giải phóng  $H_2$ , gồm 7 trang

## CHƯƠNG 1. GIỚI THIỆU VỀ VẬT LIỆU LƯU TRỮ HYDRO

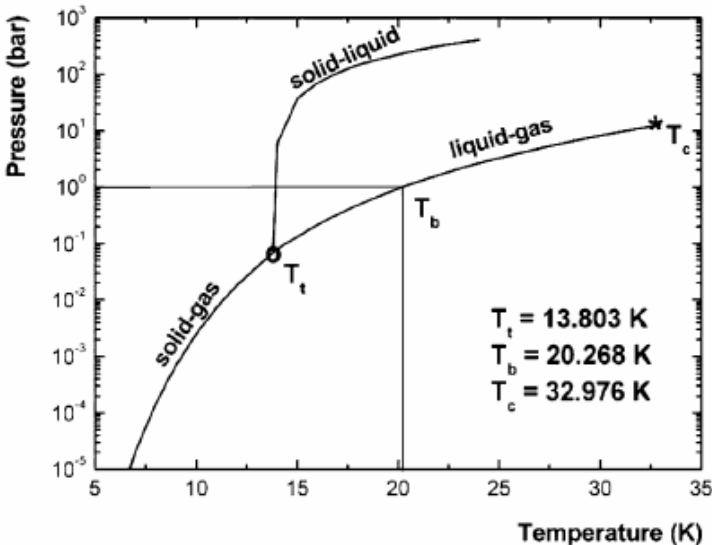
### 1.1. Hydro là chất mang năng lượng của tương lai

#### 1.1.1 Sự khám phá của hydro

Sau khi vụ nổ Big Bang, vũ trụ đã bắt đầu lạnh đi, nguyên tố nhẹ nhất đã được hình thành, mà sau này trở thành nguyên tử đầu tiên của bảng hệ thống tuần hoàn. Hydro sau đó đã được chuyển đổi thành các nguyên tố nặng hơn do phản ứng nhiệt hạch trong các ngôi sao và thiên hà.

#### 1.1.2 Tính chất vật lý và hóa học của hydro

Giản đồ pha của  $H_2$  được mô tả theo Hình 1.1



Hình 1.1 : Giản đồ pha của  $H_2$

Hydro có các tính chất vật lý được liệt kê theo bảng 1.2

*Bảng 1.2 Tính chất vật lý của H<sub>2</sub>*

<b>Tính chất</b>	<b>Giá trị</b>
Khối lượng phân tử	2.01594
<b>Pha rắn</b>	
Điểm chảy	-259 <sup>0</sup> C
Nhiệt ngưng tụ ở -259 <sup>0</sup> C	58.158 kJ/kg
Tỷ trọng của pha rắn ở -259 <sup>0</sup> C	858 kg/m <sup>3</sup>
Nhiệt dung riêng (C <sub>p</sub> ) của pha rắn ở -259.8 <sup>0</sup> C	2.63 kJ/(kg. <sup>0</sup> C)
<b>Pha lỏng</b>	
Nhiệt độ sôi ở 1atm	-252.8 <sup>0</sup> C
Tỷ trọng của pha lỏng ở -253 <sup>0</sup> C	70.8 kg/m <sup>3</sup>
Nhiệt hóa hơi ở -253 <sup>0</sup> C	447 kJ/kg
Nhiệt dung riêng (C <sub>p</sub> ) của pha lỏng ở -256 <sup>0</sup> C	8.1 kJ/(kg. <sup>0</sup> C)
<b>Điểm tới hạn</b>	
Nhiệt độ tới hạn	-240 <sup>0</sup> C
Áp suất tới hạn	12.8atm
Tỷ trọng tới hạn	31.2 kg/m <sup>3</sup>
<b>Điểm Triple point</b>	
Nhiệt độ triple	0259.3 <sup>0</sup> C
Áp suất triple	0.072 atm
<b>Pha khí</b>	
Tỷ trọng của khí ở 0 <sup>0</sup> C và 1 atm	0.08987 kg/m <sup>3</sup>
Nhiệt dung riêng (C <sub>p</sub> ) của khí ở 25 <sup>0</sup> C	14.3 kJ/(kg. <sup>0</sup> C)

### **1.1.3 Vai trò của năng lượng hydro**

Hydro là nguồn năng lượng vô tận. Hydro được sản xuất từ nước và năng lượng mặt trời, vì vậy hydro thu được còn gọi hydro nhờ năng lượng mặt trời (solar hydrogen). Nước và ánh nắng mặt trời có vô tận và khắp nơi trên hành tinh. Vì vậy, hydro nhờ năng lượng mặt trời là nguồn nhiên liệu vô tận, sử dụng từ thế kỷ này qua thế kỷ khác bảo đảm an toàn năng lượng cho loài người mà không sợ cạn kiệt, không thể có khủng hoảng năng lượng và bảo đảm độc lập về năng lượng cho mỗi quốc gia, không một quốc gia nào độc quyền sở hữu hoặc tranh giành nguồn năng lượng hydro như từng xảy ra với năng lượng hóa thạch.

## **1.2. Những thách thức của vật liệu lưu trữ hydro**

### **1.2.1. Lưu trữ $H_2$ ở dạng khí nén**

Lưu trữ hydro bằng áp lực đã được thực hiện thành công trong nhiều năm. Những nhược điểm của phương pháp này là sử dụng một lượng nhỏ khí và áp lực thiết kế của vật liệu làm bình chứa rất cao.

### **1.2.2. Lưu trữ $H_2$ dưới dạng lỏng**

Chi phí để hóa lỏng  $H_2$  là rất lớn đồng thời kèm thêm chi phí cách nhiệt cho bồn chứa cũng rất đáng kể đây chính là những thách thức của phương pháp này

### **1.2.3. Lưu trữ hydro dưới dạng rắn**

Thách thức ở đây là tìm các hợp chất có chứa hydro với dung lượng chứa hydro lớn, nhiệt độ giải phóng  $H_2$  bé.

## **1.3. Khái quát về hóa lượng tử tính toán (Computational Quantum Chemistry)**



Sử dụng phần mềm Gaussian 03 để tính toán: cấu trúc phân tử ở trạng thái nền và chuyển tiếp, từ kết quả đó chúng ta sẽ tính toán được các thông số rất quan trọng cho một phản ứng hoá học đó là: bề mặt thế năng.

Hai phương pháp được thực hiện trong đề tài này là :

+ B3LYP/6-311G(d,p)

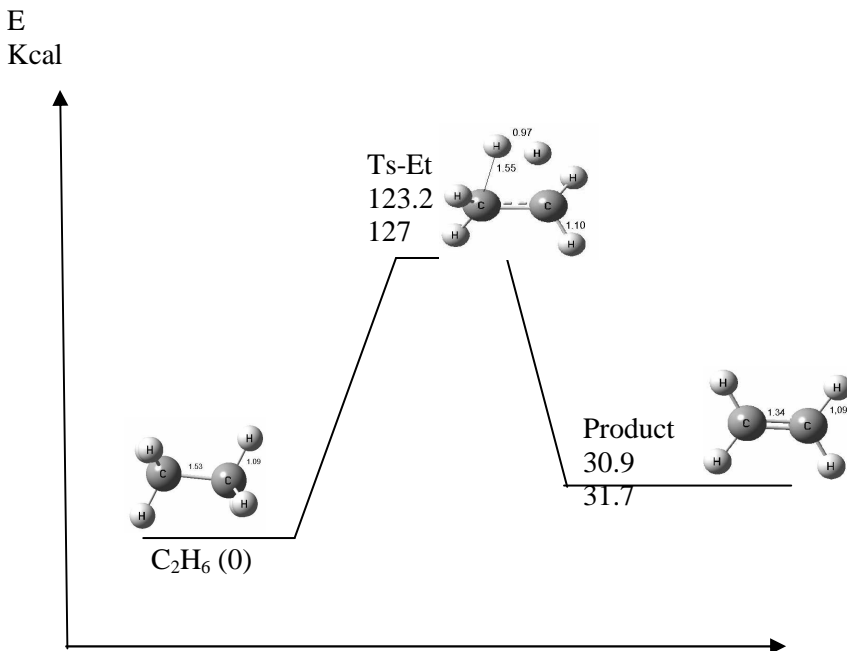
+ MP2/6-311+G(d,p)

## CHƯƠNG 2: CƠ CHẾ CÁC PHẢN ỨNG GIẢI PHÓNG $H_2$ CỦA VẬT LIỆU LƯU TRỮ HYDRO VÀ VAI TRÒ XÚC TÁC CỦA HYDRUA LÊN CÁC PHẢN ỨNG

### 2.1 . ETHANE ( $C_2H_6$ )

#### 2.1.1 Cơ chế phản ứng giải phóng $H_2$ của Ethane ( $C_2H_6$ )

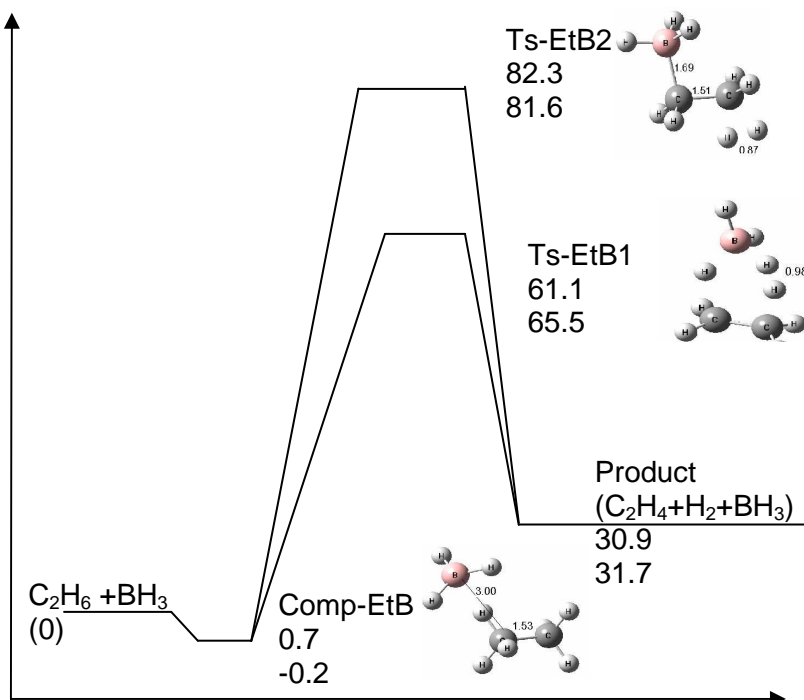
Kết quả về cơ chế của phản ứng được diễn tả theo hình 2.2.



Hình 2.2 : Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ Ethane ( $C_2H_6$ )

#### 2.1.2 Cơ chế phản ứng giải phóng $H_2$ của Ethane ( $C_2H_6$ ) khi có mặt của borane ( $BH_3$ )

Cơ chế của phản ứng được diễn tả theo sơ đồ Hình 2.4.



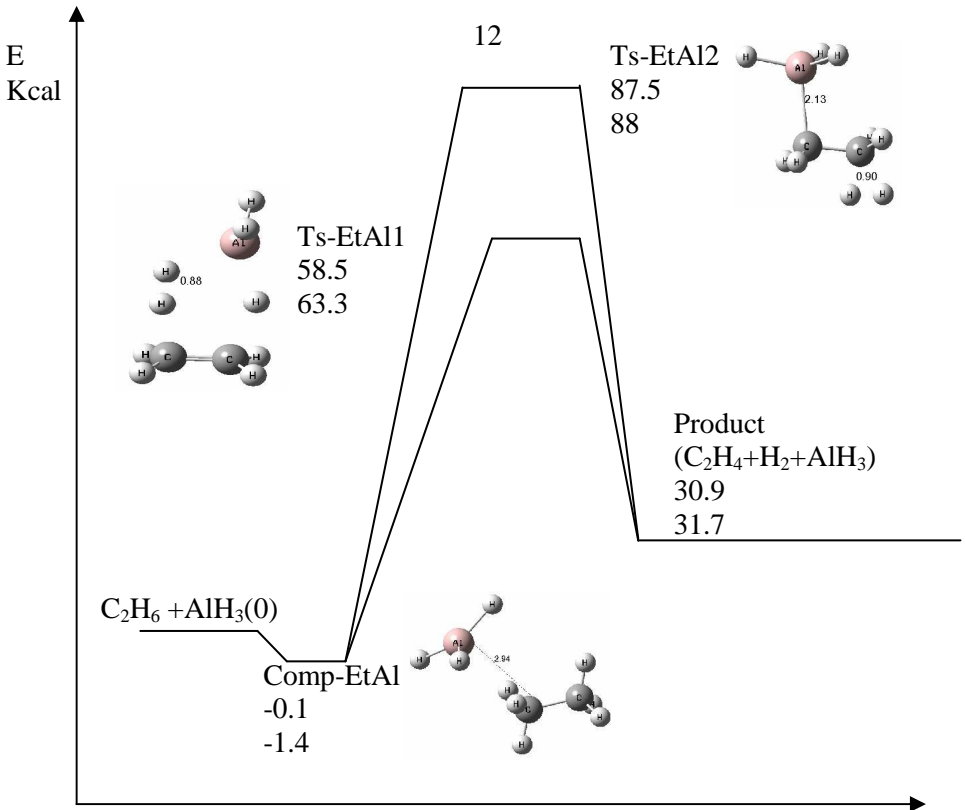
Hình 2.4 : Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ Ethane ( $C_2H_6$ ) với sự có mặt của borane  $BH_3$

**Nhận xét:**

- + Phản ứng có 2 trạng thái chuyển tiếp.
- + Làm giảm hàng rào thế năng khá lớn so với khi không có  $BH_3$

### 2.1.3 Cơ chế phản ứng giải phóng $H_2$ của Ethane ( $C_2H_6$ ) khi có mặt của alane ( $AlH_3$ )

Cơ chế của phản ứng được mô tả theo Hình 2.6

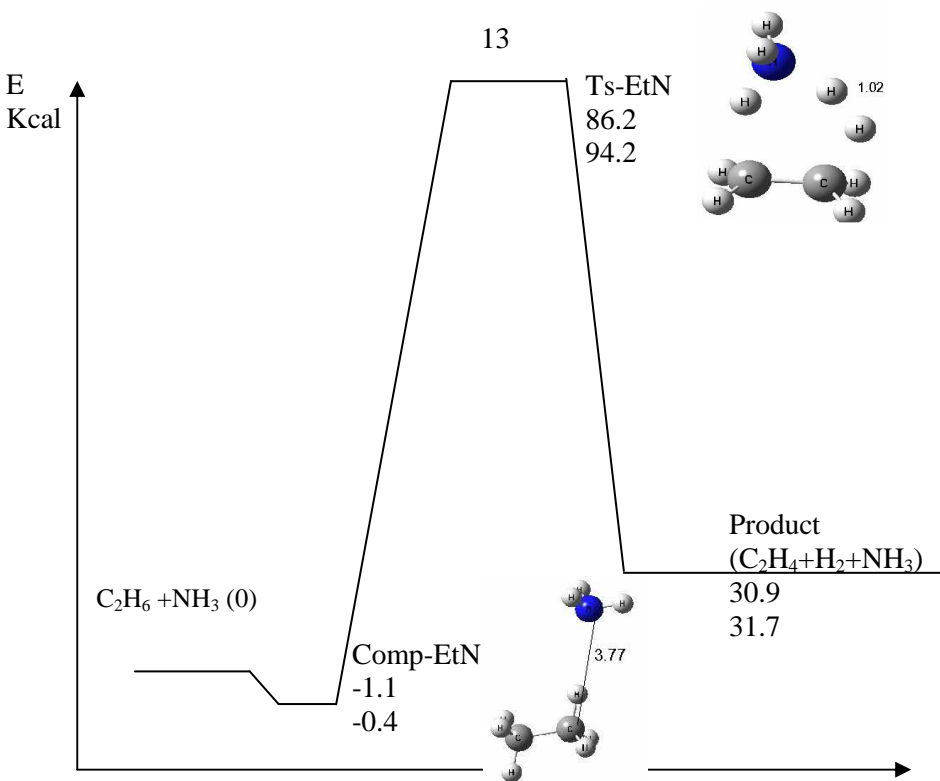


Hình 2.6 : Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ Ethane ( $C_2H_6$ ) với sự có mặt của alane  $AlH_3$

**Nhận xét:**

- + Phản ứng có 2 trạng thái chuyển tiếp.
- + Làm giảm hàng rào thế năng khá lớn so với khi không có  $AlH_3$  (giảm từ 127kcal/mol xuống còn 63.3 kcal/mol (với cơ chế hình thành Ts-EtB1) 88 (với cơ chế hình thành Ts-EtB2).
- + So với  $BH_3$ ,  $AlH_3$  có tác dụng làm giảm hàng rào thế năng của phản ứng mạnh hơn một chút

**2.1.4 Cơ chế phản ứng giải phóng  $H_2$  của Ethane ( $C_2H_6$ ) khi có mặt của ammonia ( $NH_3$ )**

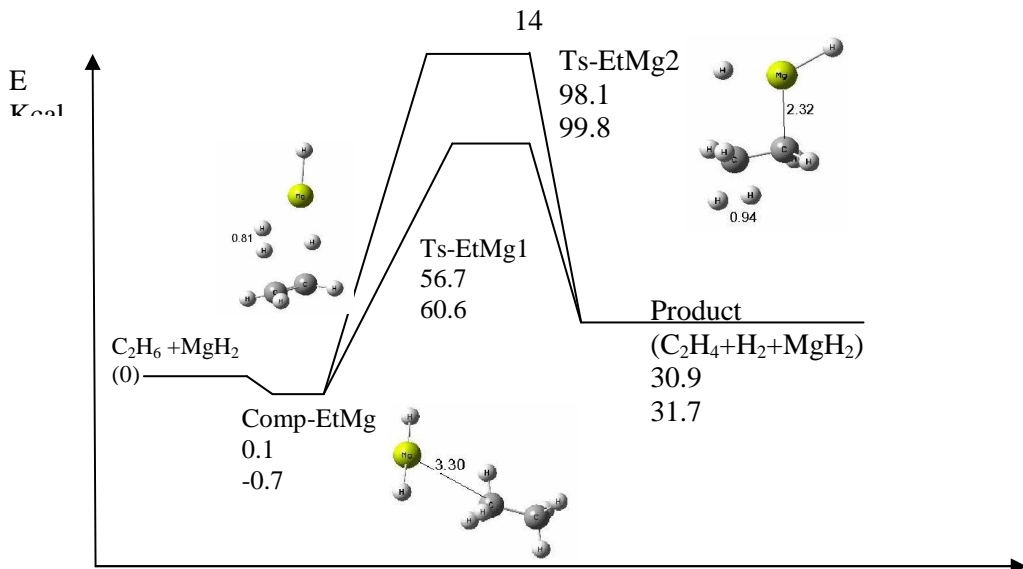


Hình 2.8 : Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ Ethane ( $C_2H_6$ ) với sự có mặt của ammonia  $NH_3$

**Nhận xét:**

- + Phản ứng chỉ có 1 TS.
- +  $NH_3$  có khả năng xúc tác yếu nhất so với  $BH_3$ ,  $AlH_3$  (trương ứng với hàng rào thế năng là 94.2 kcal/mol đối với  $NH_3$ , 65.5 kcal/mol đối với  $BH_3$  và 63.3 kcal/mol đối với  $AlH_3$ ).

### 2.1.5 Cơ chế phản ứng giải phóng $H_2$ của Ethane ( $C_2H_6$ ) khi có mặt của magnesium hydride ( $MgH_2$ )



Hình 2.10: Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ Ethane ( $C_2H_6$ ) với sự có mặt của  $MgH_2$

### Nhận xét kết quả như sau:

- + Phản ứng có 2 trạng thái chuyển tiếp
- + Hàng rào thế năng được giảm đáng kể so với phản ứng không có mặt của  $MgH_2$  : giảm từ  $127 \text{ kcal.mol}^{-1}$  đến  $60.6 \text{ kcal.mol}^{-1}$ .

### 2.1.6 Vai trò xúc tác của các hydrua

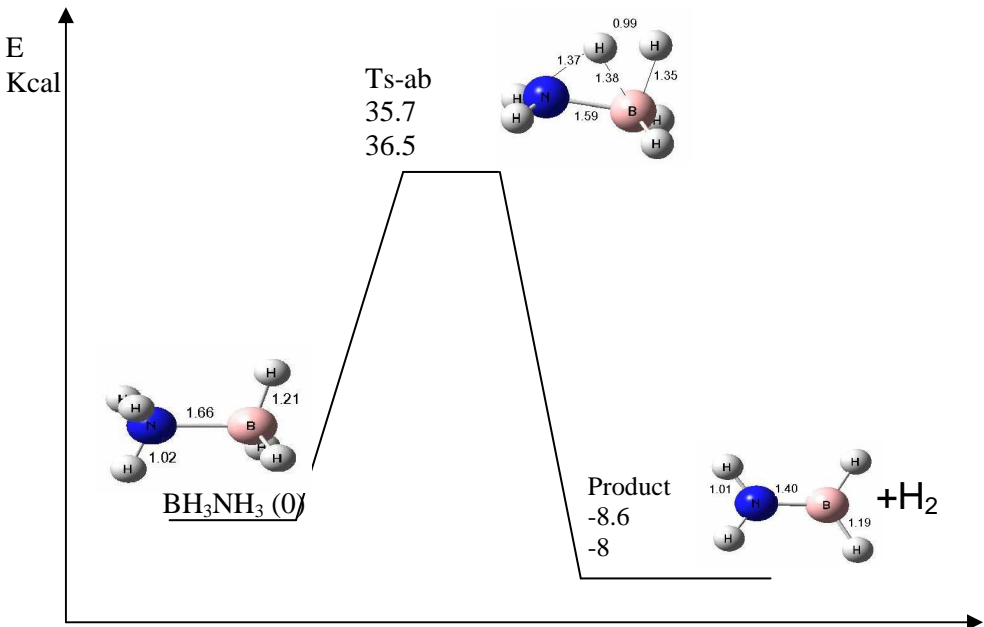
Để xem xét tác dụng của các loại xúc tác lên phản ứng giải phóng  $H_2$ , bảng 2.9 mô tả mức độ ảnh hưởng của của các xúc tác.

Bảng 2.9 : Bảng tóm tắt kết quả phản ứng giải phóng  $H_2$  từ Ethane khi có mặt các hydrua là:  $BH_3$ ,  $AlH_3$ ,  $NH_3$ ,  $MgH_2$ .

$M_xH_y$	Complex (Kcal/mol)	TS (Kcal/mol)	Khoảng cách $2H(\text{Å}^0)$
Không có xúc tác		127	
$BH_3$	-0.2	65.5	0.98006
$AlH_3$	-1.4	63.3	0.88241
$NH_3$	-0.4	94.2	1.01942
$MgH_2$	-0.7	60.6	0.81444

## 2.2 AMMONIA BORANE ( $\text{BH}_3\text{NH}_3$ )

### 2.2.1 Cơ chế phản ứng giải phóng $\text{H}_2$ của ammonia borane ( $\text{BH}_3\text{NH}_3$ )



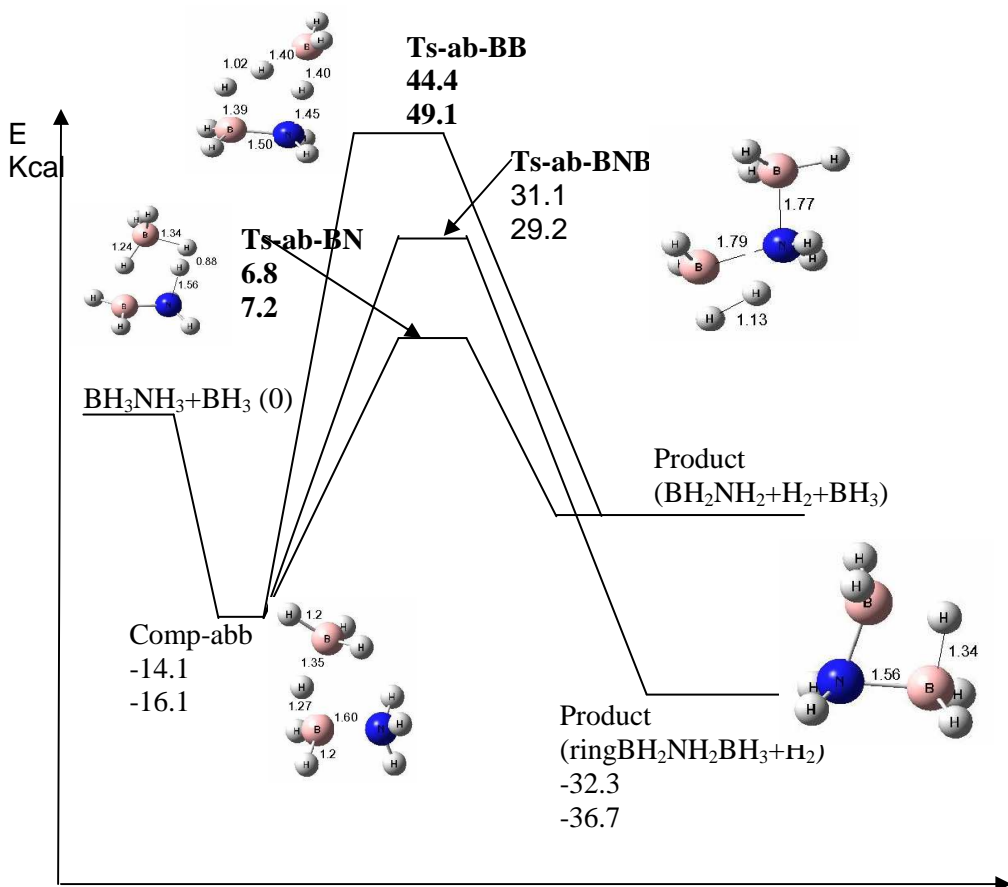
Hình 2.12 : Cơ chế giải phóng  $\text{H}_2$  từ  $\text{BH}_3\text{NH}_3$

#### Nhận xét:

+ So với phản ứng giải phóng  $\text{H}_2$  từ  $\text{C}_2\text{H}_6$  thì phản ứng giải phóng  $\text{H}_2$  từ  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  có hàng rào thế năng thấp hơn nhiều (36.5kcal/mol với  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  và 127kcal/mol với  $\text{C}_2\text{H}_6$ ).

+ Phản ứng tỏa nhiệt.

2.2.2 Cơ chế phản ứng giải phóng  $H_2$  của ammonia borane ( $BH_3NH_3$ ) khi có mặt của borane ( $BH_3$ )



Hình 2.14: Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ ammonia borane ( $BH_3NH_3$ ) với sự có mặt của  $BH_3$



**Nhận xét kết quả :**

- + Phản ứng tạo phức tỏa nhiệt.
- +  $BH_3$  có thể đóng vai trò xúc tác và làm chất tham gia phản ứng.
- + Hàng rào thế năng giảm rất mạnh (từ 36.5 đến 7.2 kcal/mol ứng với không có mặt và có mặt  $BH_3$ ).
- + Phản ứng tỏa nhiệt mạnh khi tạo hợp chất vòng  $ringBH_2NH_2BH_3$ .

***2.2.3 Cơ chế phản ứng giải phóng  $H_2$  của ammonia borane ( $BH_3NH_3$ ) khi có mặt của alane ( $AlH_3$ )***

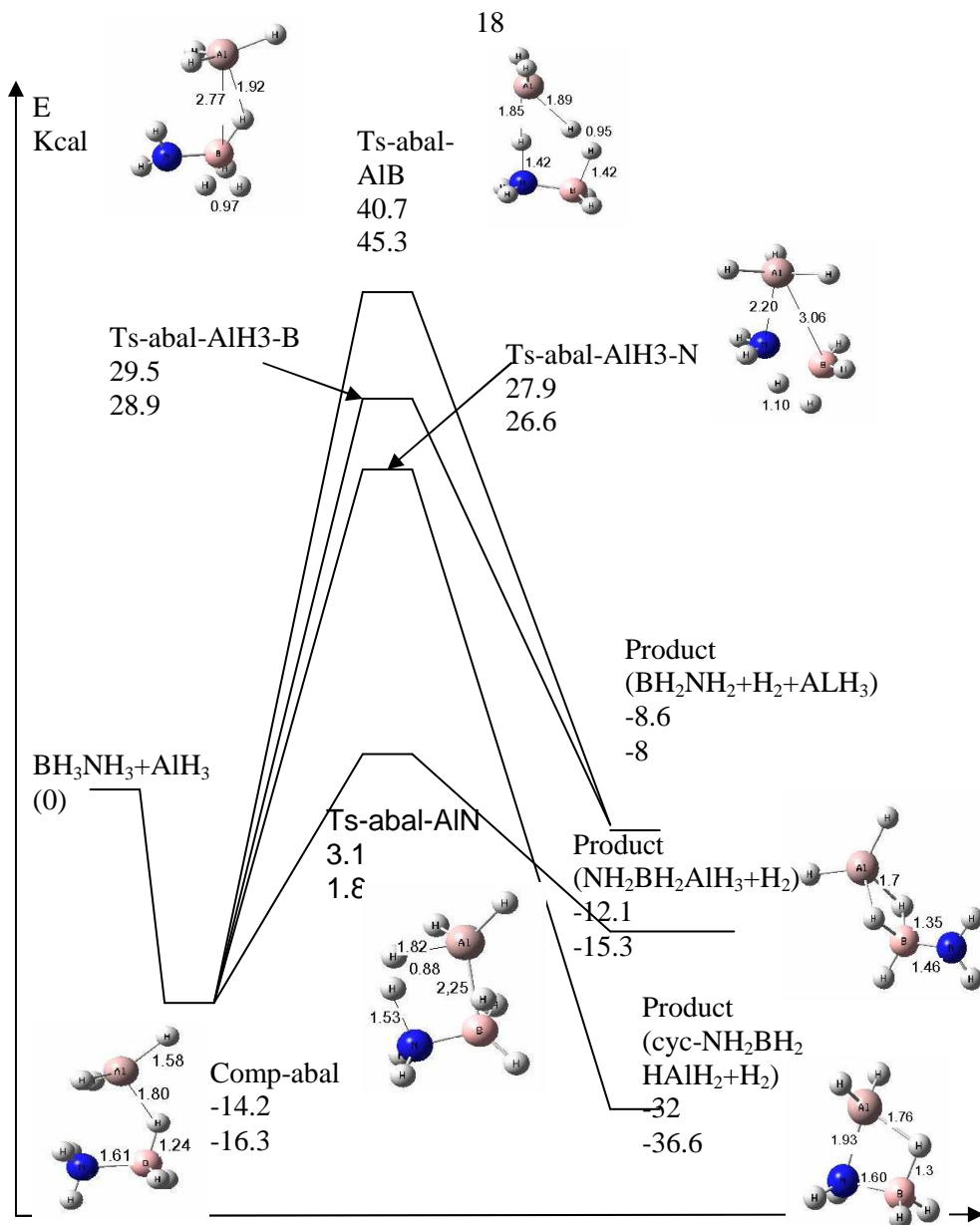
Cơ chế phản ứng được diễn tả theo hình 2.16

**Nhận xét kết quả:**

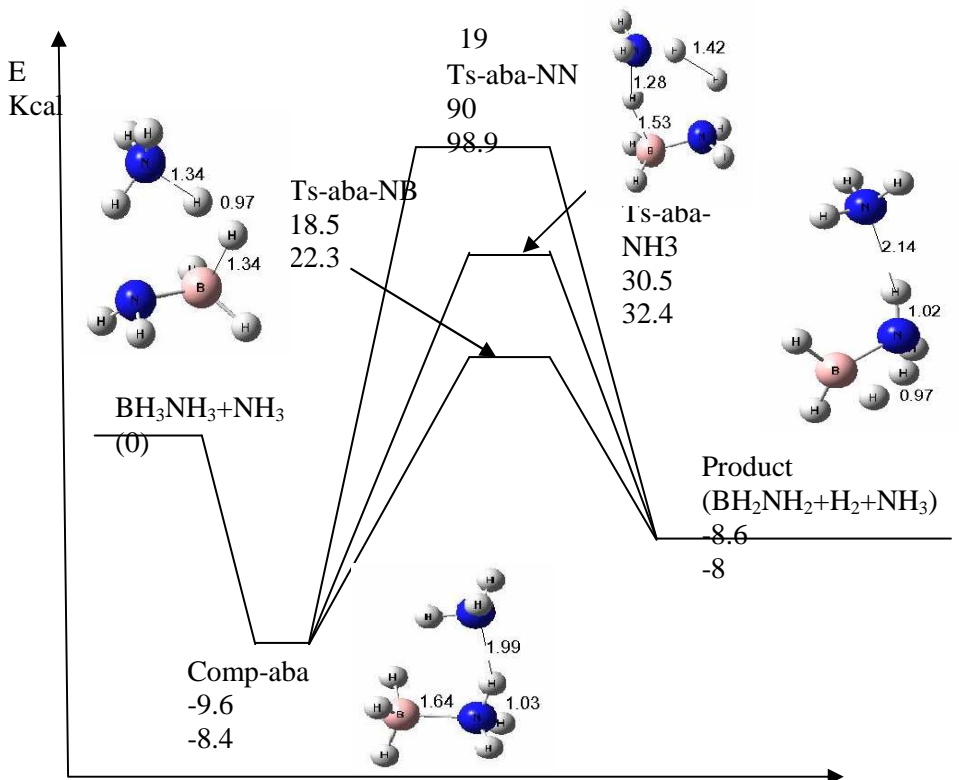
- + Phản ứng tạo phức tỏa nhiệt mạnh.
- +  $AlH_3$  có thể đóng vai trò xúc tác và làm chất tham gia phản ứng.
- + Tác dụng làm giảm hàng rào thế năng phản ứng của  $AlH_3$  lớn hơn  $BH_3$ .
- + Phản ứng tỏa nhiệt mạnh khi tạo hợp chất vòng  $cyc-NH_2BH_2HAlH_2$ .

***2.2.4 Cơ chế phản ứng giải phóng  $H_2$  của ammonia borane ( $BH_3NH_3$ ) khi có mặt của ammonia ( $NH_3$ )*****Nhận xét kết quả:**

- + Phản ứng tạo phức là tỏa nhiệt.
- + Phản ứng có 3 trạng thái chuyển tiếp.
- + Tác dụng làm giảm hàng rào thế năng của  $NH_3$  nhỏ hơn so với  $BH_3$  và  $AlH_3$



Hình 2.16: Cơ chế giải phóng H<sub>2</sub> từ ammonia borane (BH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>) với sự có mặt của AlH<sub>3</sub>



Hình 2.18 : Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ ammonia borane ( $BH_3NH_3$ ) với sự có mặt của  $NH_3$

### 2.2.5 Vai trò xúc tác của các hydrua trong phản ứng giải phóng $H_2$ của $BH_3NH_3$

Để xem xét tác dụng của các loại xúc tác lên phản ứng giải phóng  $H_2$ , bảng 2.21 mô tả mức độ ảnh hưởng của của các xúc tác.

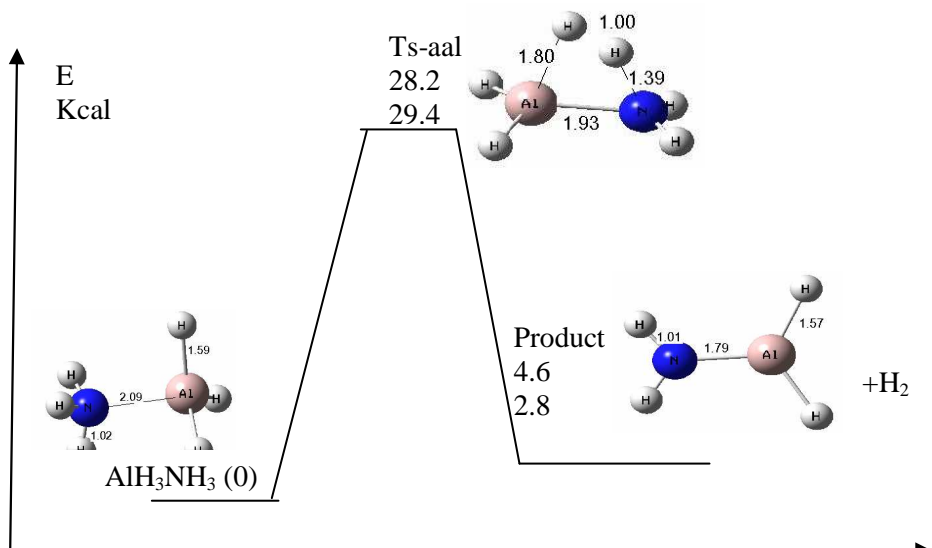
$M_xH_y$	Complex (Kcal/mol)	TS (Kcal/mol)	Sản phẩm (Kcal/mol)
Không có xúc tác		36.5	-8
$BH_3$	-16.1	7.2	-8
$AlH_3$	-16.3	1.8	-15.3
$NH_3$	-8.4	22.3	-8

Bảng 2.21: Bảng tóm tắt kết quả phản ứng giải phóng  $H_2$  từ  $BH_3NH_3$  khi có mặt các hydrua là:  $BH_3$ ,  $AlH_3$ ,  $NH_3$

### 2.3 AMMONIA ALANE ( $AlH_3NH_3$ )

#### 2.3.1 Cơ chế phản ứng giải phóng $H_2$ của ammonia alane ( $AlH_3NH_3$ )

Cơ chế phản ứng được mô tả theo hình 2.20.



Hình 2.20: Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ  $AlH_3NH_3$

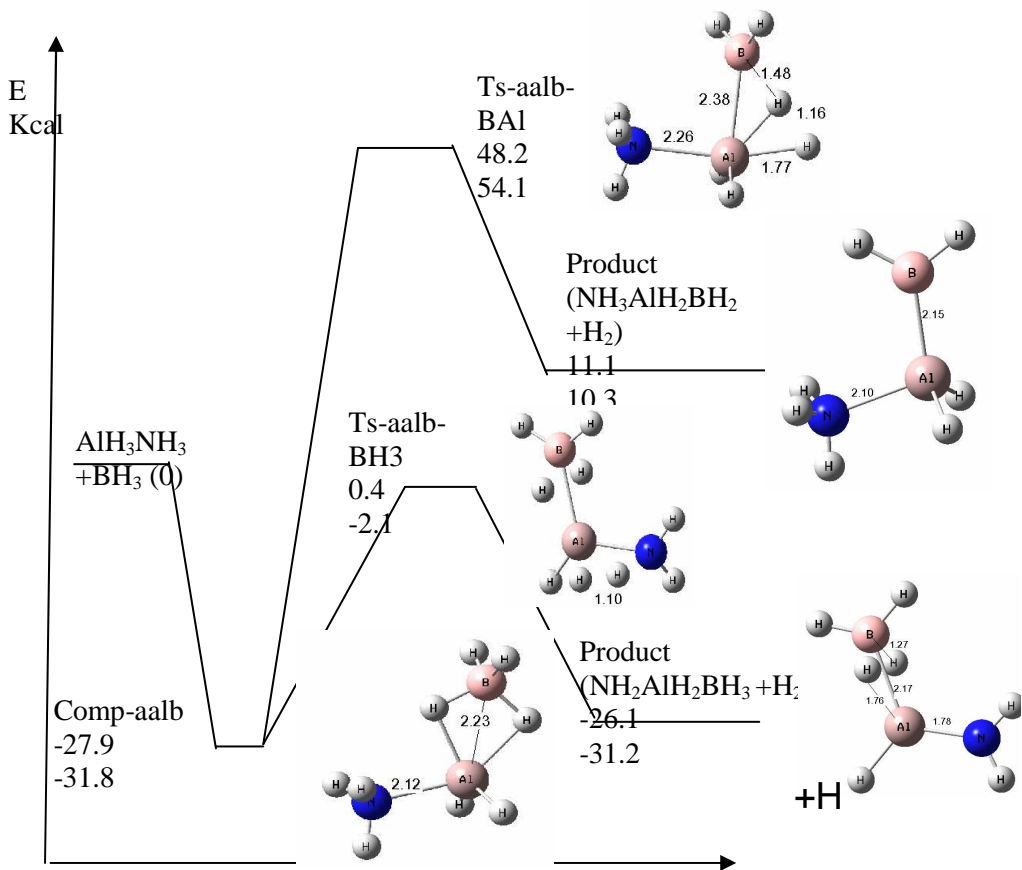
#### Nhận xét kết quả :

+ Ammonia alane có khả năng giải phóng  $H_2$  dễ dàng hơn so với Ethane và ammonia borane: hàng rào thế năng của phản ứng giải phóng  $H_2$  của Ethane là 127 kcal/mol, của ammonia borane là 36.5 kcal/mol và của Ammonia alane là 29.4 kcal/mol.

+ Phản ứng thu nhiệt.

2.3.2 Cơ chế phản ứng giải phóng  $H_2$  của ammonia alane  
( $AlH_3NH_3$ ) khi có mặt của borane ( $BH_3$ )

Cơ chế phản ứng được mô tả theo Hình 2.22



Hình 2.22 : Cơ chế giải phóng  $H_2$  từ ammonia alane ( $AlH_3NH_3$ ) với sự có mặt của  $BH_3$

**Nhận xét kết quả :**

+ Quá trình hình thành phức chất tỏa nhiệt lớn.

+ Có 2 trạng thái chuyển tiếp.

+  $\text{BH}_3$  không đóng vai trò xúc tác mà đóng vai trò chất tham gia phản ứng (vì sau phản ứng sản phẩm không có mặt  $\text{BH}_3$ ), tuy nhiên sự có mặt của  $\text{BH}_3$  giảm rất đáng kể hàng rào thế năng của phản ứng giải phóng  $\text{H}_2$  từ  $\text{AlH}_3\text{NH}_3$  (giảm từ 29,4 đến -2.1 kcal/mol).

**2.3.3 Cơ chế phản ứng giải phóng  $\text{H}_2$  của ammonia alane ( $\text{AlH}_3\text{NH}_3$ ) khi có mặt của ammonia ( $\text{NH}_3$ ).**

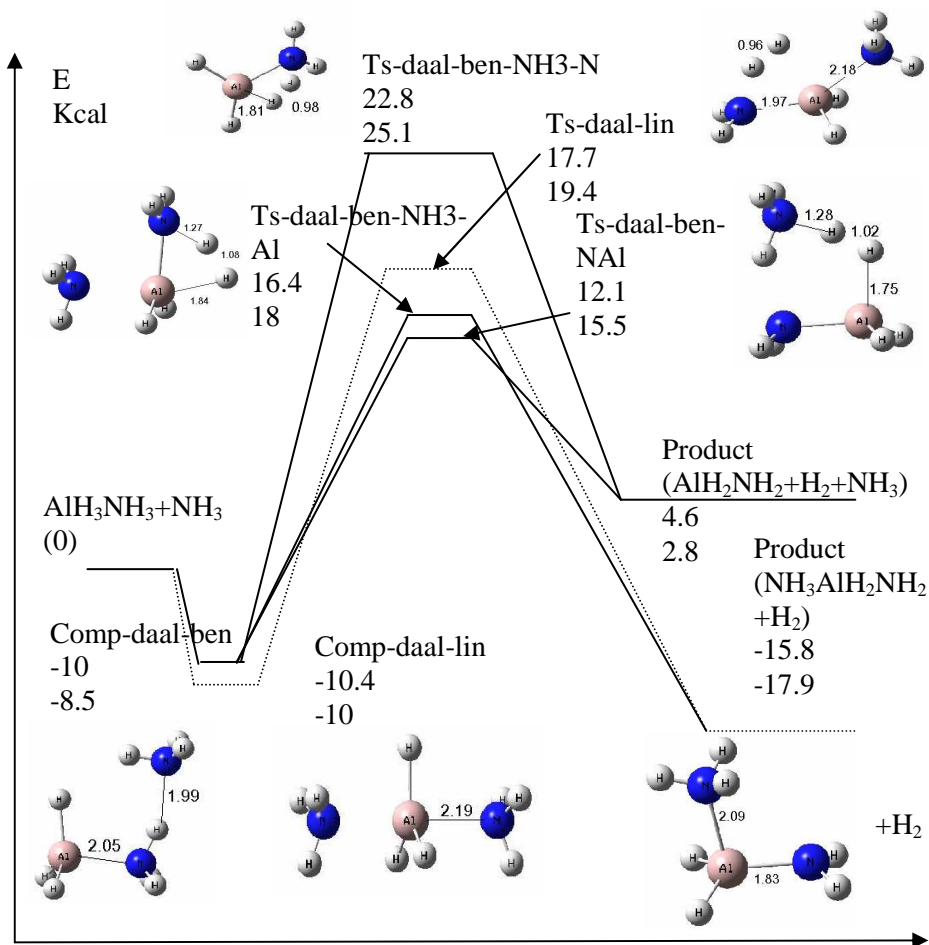
Cơ chế phản ứng được mô tả theo hình 2.24

**Nhận xét kết quả :**

+ Có 2 phức chất, và phản ứng tạo phức là tỏa nhiệt

+ Tất cả các hàng rào thế năng trong phản ứng này đều thấp hơn hàng rào thế năng của phản ứng giải phóng  $\text{H}_2$  của  $\text{AlH}_3\text{NH}_3$ .

+  $\text{NH}_3$  đóng vai trò vừa là chất xúc tác vừa làm chất tham gia phản ứng



Hình 2.24: Cơ chế của phản ứng giải phóng  $\text{H}_2$  từ ammonia alane ( $\text{AlH}_3\text{NH}_3$ ) với sự có mặt của  $\text{NH}_3$

## CHƯƠNG 3

### ĐỘNG HỌC CÁC PHẢN ỨNG GIẢI PHÓNG H<sub>2</sub>

#### 3.1. Động học phản ứng giải phóng H<sub>2</sub> từ C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>

Dùng kết quả tối ưu hóa cấu trúc từ Gaussian và kết quả hàng rào thế năng, sử dụng phần mềm Chemrate ta tính toán hằng số tốc độ phản ứng theo nhiệt độ ở áp suất cố định. Kết quả theo bảng 3.1 sau:

Bảng 3.1: Kết quả động học của phản ứng giải phóng H<sub>2</sub> từ C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>

Nhiệt độ [K]	Rate constant (1/s)
2000	0.369
2111.1	1.586
2222.2	5.636
2333.3	16.997
2444.4	44.500
2555.6	103.049
2666.7	214.533
2777.8	307.035
2888.9	712.267
3000	1161.69

#### 3.2 Động học phản ứng giải phóng H<sub>2</sub> từ BH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>

Kết quả hằng số tốc độ phản ứng phụ thuộc vào nhiệt độ theo Bảng 3.2.

Bảng 3.2: Kết quả động học của phản ứng giải phóng H<sub>2</sub> từ BH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>

Nhiệt độ [K]	Rate constant (1/s)
700	10.685
722.2	22.541
744.4	45.054
766.7	85.697
788.9	115.745



811.1	271.409
833.3	454.985
855.6	735.866
877.8	1151.27
900	1746.54

### 3.3 Động học phản ứng giải phóng H<sub>2</sub> từ AlH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>

Kết quả hằng số tốc độ phản ứng phụ thuộc vào nhiệt độ theo Bảng 3.3.

*Bảng 3.3: Kết quả động học của phản ứng giải phóng H<sub>2</sub> từ AlH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>*

Nhiệt độ [K]	Rate constant (1/s)
600	48.987
611.1	73.263
622.1	107.682
633.3	155.687
644.4	221.555
655.6	310.619
666.7	429.308
677.8	585.317
688.0	787.705
700	1046.98

## KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

### KẾT LUẬN:

Nghiên cứu này đã giải quyết được nhiều vấn đề quan trọng của việc nghiên cứu về vật liệu trữ hydro (hydrogen storage) :

+ Tìm ra 3 hợp chất có thể làm vật liệu lưu trữ hydro là Ethane, ammonia borane và ammonia alane.

+ Tìm ra được các chất xúc tác là các hydrua như  $BH_3$ ,  $AlH_3$ ,  $NH_3$ ,  $MgH_2$  trong các phản ứng giải phóng  $H_2$  của ba hợp chất trên.

+ Xây dựng được cơ chế các phản ứng giải phóng  $H_2$  của ba vật liệu lưu trữ hydro trên khi có và không có các hợp chất xúc tác.

+ Tìm được hằng số tốc độ phản ứng của ba phản ứng giải phóng hydro của ethane, ammonia borane, ammonia alane.

### KIẾN NGHỊ:

+ Nếu được thực hiện trên hệ thống máy tính có cấu hình mạnh, tôi sẽ chạy tối ưu hóa cấu hình tại các phương pháp và bộ hàm cao hơn như CCSD(T). Độ chính xác của phương pháp sẽ cao hơn.

+ Nếu có đủ điều kiện sẽ thực hiện được các nghiên cứu để khẳng định lại các kết quả nghiên cứu lý thuyết trên.