

THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN TIẾN SĨ

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: Nguyễn Thị Huệ
2. Giới tính: Nữ
3. Ngày sinh: 15/04/1982
4. Nơi sinh: Phú Thọ
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: 3485/QĐ-KHTN-CTSV ngày 14/09/2012 của Hiệu trưởng Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - ĐHQGHN.
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo:
Điều chỉnh tên đề tài và cán bộ hướng dẫn khoa học luận án tiến sĩ theo Quyết định số 3819/QĐ-ĐHKHTN, ngày 09 tháng 10 năm 2015 của Hiệu trưởng Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - ĐHQGHN.
7. Tên đề tài luận án: *“Nghiên cứu ảnh hưởng của các chất hòa tan lên cấu trúc phân tử bề mặt phân cách chất lỏng - không khí bằng quang phổ học dao động tần số tổng”*.
8. Chuyên ngành: Quang học
9. Mã số: 62 44 01 09
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: Hướng dẫn chính: TS. Nguyễn Anh Tuấn
Hướng dẫn phụ: PGS. TS. Nguyễn Thế Bình
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:
 - Chế tạo đơn lớp một phân tử hữu cơ axit béo, rượu 1-butanol trên bề mặt nước (đơn lớp Langmuir).
 - Nghiên cứu sự chuyển pha của đơn lớp Langmuir axit arachidic bằng các phương pháp sức căng bề mặt (đường cong đẳng nhiệt π -A) và quang phổ dao động tần số tổng, từ đó chỉ ra cấu trúc phân tử của đơn lớp trong các pha khác nhau: pha lỏng mở rộng, pha xếp chặt nghiêng; pha xếp chặt không nghiêng và pha sụp đổ đơn lớp.
 - Phương pháp quang phổ học dao động tần số tổng là một phương pháp hiện đại, lần đầu tiên tại Việt Nam được ứng dụng để nghiên cứu một cách hệ thống ảnh hưởng của các chất hòa tan phổ biến trong môi trường sinh học lên cấu trúc tại mặt phân cách của hệ mẫu chất đơn lớp Langmuir (axit béo; rượu 1-butanol).
 - Nghiên cứu ảnh hưởng của pH của nước lên cấu trúc mặt phân cách đơn lớp Langmuir axit arachidic – nước. Khi pH thấp ($\text{pH} = 2; 3,4$), trật tự cấu trúc mặt phân cách bị suy giảm do đơn lớp gần như trung hòa điện. Khi $7 \leq \text{pH} \leq 11$, các nhóm chức cacboxylic tách proton do đó đơn lớp tích điện âm sinh ra điện trường bề mặt cảm ứng mạng liên kết dạng băng của nước phù hợp mạng liên kết hydro với đơn lớp, làm tăng cường trật tự cấu trúc bề mặt phân cách.
 - Nghiên cứu ảnh hưởng của các ion halogen lên cấu trúc tại bề mặt phân cách phụ thuộc vào xu hướng lên bề mặt của các loại anion này. Các anion Cl^- và I^- có xu hướng

lên bề mặt cao, làm xáo trộn cấu trúc trật tự tại mặt phân cách, trong khi đó F^- lại làm tăng cường trật tự cấu trúc nước mặt phân cách và đơn lớp do chúng không nhô lên bề mặt mà ở bên dưới một vài lớp nước. Sự hydrat hóa của F^- làm cho lớp phân tử nước trên cùng phù hợp mạng liên kết hydro với đơn lớp.

- Các cation kiềm Na^+ và K^+ bị hút lên lớp bề mặt nhờ tương tác Coulomb có xu hướng làm trung hòa điện tích âm gây ra bởi các nhóm chức cacboxylic do đó làm yếu các liên kết của mạng hydro bên dưới đơn lớp.

- Ảnh hưởng của các cation có số ôxi hóa bằng 3 như La^{3+} và Fe^{3+} lên cấu trúc mặt phân cách phức tạp hơn. Các cation La^{3+} tương tác với các anion COO^- của đơn lớp axit arachidic nhờ tương tác Coulomb làm yếu các liên kết của mạng hydro bên dưới đơn lớp. Trong khi đó, các thành phần của sắt tồn tại trong dung dịch dưới dạng: Fe^{3+} ; $Fe(OH)^{2+}$ và thành phần không tan $Fe(OH)_3$, nhưng chỉ có $Fe(OH)_3$ ở bên dưới đơn lớp và tạo thành các mạng liên kết phức làm tăng cường trật tự cấu trúc của đơn lớp và mạng liên kết có dạng băng của nước.

12. Khả năng ứng dụng thực tiễn:

Xây dựng phương pháp quang phổ học tần số tổng bề mặt tại phòng thí nghiệm phục vụ các yêu cầu nghiên cứu khoa học vật liệu và các ứng dụng trong ngành y-sinh, hóa học, môi trường...

13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo:

- Nghiên cứu trong tương lai có thể mở rộng nội dung nghiên cứu thêm ảnh hưởng của các chất hòa tan khác có trong môi trường sinh học lên cấu trúc mặt phân cách của các màng phospholipid sinh học như axit béo bằng phương pháp quang phổ học tần số tổng.

- Nghiên cứu khả năng áp dụng thực tiễn trong khoa học

14. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

[1] **Nguyễn Thị Huệ**, Hùng Thị Nguyệt Minh, Nguyễn Thế Bình, Nguyễn Anh Tuấn (2016), “Ứng dụng kỹ thuật quang phổ phát tần số tổng để nghiên cứu phổ dao động phân tử bề mặt chất lỏng”, *Kỷ yếu Hội nghị quốc gia: Những tiến bộ trong Vật lý kỹ thuật và ứng dụng IV* (ISBN: 978-604-913-232-2), tr. 280-284.

[2] **Nguyen Thi Hue**, Vu Thanh Tam, Nguyen Anh Tuan (2017), “Effect of halide anions on structure of 1-butanol monolayer/water interface probed by sum-frequency vibrational spectroscopy”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* 33 (1), pp. 8-13.

[3] **Nguyen Thi Hue**, Vu Thanh Tam, Nguyen Anh Tuan (2017), “Study of Langmuir Monolayers of Arachidic Acid on Saline Solutions Using Sum-frequency Generation Vibrational Spectroscopy”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* 33 (2), pp. 42-47.

[4] **Nguyễn Thị Huệ**, Nguyễn Trọng Uyển, Nguyễn Anh Tuấn (2017), “Ảnh hưởng của pH của nước lên cấu trúc đơn lớp Langmuir axit arachidic bằng quang phổ dao động tần số tổng”, *Tạp chí Hóa học* 55(5B), tr. 205-208.

[5] **Nguyen Thi Hue**, Nguyen The Binh, Nguyen Anh Tuan (2018), “Effect of Alkali Cations on Structure of Arachidic Acid Langmuir Monolayer/Water Interface Probed by Sum-frequency Vibrational Spectroscopy”, *The 5th Academic Conference on Natural Science for Young Scientists, Master and PhD, Students from Asean Countries (CASEAN – 5)* (ISBN: 978-604-913-714-3), pp. 290-294.

[6] **Nguyen Thi Hue**, Nguyen The Binh, Nguyen Anh Tuan (2018), “Interaction of Arachidic Acid Langmuir Monolayers with Trivalent Ions La^{3+} and Fe^{3+} Studied by Vibrational Sum-frequency Spectroscopy”, *Materials Transactions* 59 (7), pp. 1087-1090.

Ngày 17 tháng 9 năm 2018

Người hướng dẫn luận án

Nghiên cứu sinh

TS. Nguyễn Anh Tuấn

Nguyễn Thị Huệ

head-groups are ionized and the resulting surface field induces the surface water molecules to form a more ordered hydrogen-bonding network. For high pH values ~ 11 , the structure of water underneath monolayer is arranged orderly the most.

- Study on effect of halide ions on the structure of Langmuir monolayers formed on salt solutions, such as NaCl, NaI, NaF. Both I^- and Cl^- ions have high surface propensities and disturb structures at the interface, but due to its higher surface propensity, the I^- shows more effect on the monolayer structure, whereas the Cl^- shows more effect on the “ice-like” structure of the beneath water. The presence of fluoride (F^-), on the other hand, shows an enhancement of the hydrogen bonding of water at the interface.
- In the case of AA monolayer on saline solutions such as KCl and NaCl, cations K^+ or Na^+ were attracted to the surface by COO^- anions in AA monolayer. Thus, the AA monolayer was neutral, so this AA monolayer network mismatched with the hydrogen-bonding network of the interfacial water molecules.
- Investigating the effect of trivalent cations, such as La^{3+} and Fe^{3+} on the structure of Langmuir monolayer - liquid interfaces is more difficult. The cation La^{3+} binds to the negatively-charged interface of the AA monolayer by Coulombic interaction, so interfacial hydrogen bond network is weakened. Meanwhile, Iron exists in the solution in three forms, soluble ions Fe^{3+} , molecular ions $Fe(OH)^{2+}$, and insoluble $Fe(OH)_3$, but only $Fe(OH)_3$ complexes bind to the carboxylic groups of the AA monolayer reinforcing the ordering structure at the interface.

12. Paractical applicability, if any:

Developing SFG Surface Spectrometry at the laboratory to investigate material surfaces and interfaces as well as applications in biology, chemistry, environment ...

13. Further research directions, if any

- Expanding study on effect of other dissolved substances in biological environment on the molecular structure of Langmuir monolayer on liquid surfaces probed by sum-frequency vibrational spectroscopy.
- Study on practical application in science.

14. Thesis-related publications:

[1] **Nguyen Thi Hue**, Hung Thi Nguyet Minh, Nguyen The Binh, Nguyen Anh Tuan (2016), “ Using sum-frequency generation vibrational spectroscopy to study vibrational spectra of molecules at interfaces”, *The proceeding of Advances in Applied and Engineering Physics IV* (ISBN: 978-604-913-232-2), pp. 280-284.

[2] **Nguyen Thi Hue**, Vu Thanh Tam, Nguyen Anh Tuan (2017), “Effect of halide anions on structure of 1-butanol monolayer/water interface probed by sum-frequency vibrational spectroscopy”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* 33 (1), pp. 8-13.

[3] **Nguyen Thi Hue**, Vu Thanh Tam, Nguyen Anh Tuan (2017), “Study of Langmuir Monolayers of Arachidic Acid on Saline Solutions Using Sum-frequency Generation Vibrational Spectroscopy”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* 33 (2), pp. 42-47.

[4] **Nguyen Thi Hue**, Nguyen Trong Uyen, Nguyen Anh Tuan (2017), “Effect of pH value of subphase water on structure of arachidic acid Langmuir monolayer/water interface probed by sum-frequency vibrational spectroscopy”, *Viet nam Journal of Chemistry* 55(5B), tr. 205-208.

[5] **Nguyen Thi Hue**, Nguyen The Binh, Nguyen Anh Tuan (2018), “Effect of Alkali Cations on Structure of Arachidic Acid Langmuir Monolayer/Water Interface Probed by Sum-frequency Vibrational Spectroscopy”, *The proceeding of The 5th Academic Conference on Natural Science for Young Scientists, Master and PhD, Students from Asean Countries (CASEAN – 5)* (ISBN: 978-604-913-714-3), pp. 290-294.

[6] **Nguyen Thi Hue**, Nguyen The Binh, Nguyen Anh Tuan (2018), “Interaction of Arachidic Acid Langmuir Monolayers with Trivalent Ions La^{3+} and Fe^{3+} Studied by Vibrational Sum-frequency Spectroscopy”, *Materials Transactions* 59 (7), pp. 1087-1090.

Date: September 17, 2018

Supervisor

PhD Student

Ph.D. Nguyen Anh Tuan

Nguyen Thi Hue