

THÔNG TIN LUẬN ÁN TIẾN SĨ

Tên đề tài: *Tổng hợp vật liệu nanocomposite trên cơ sở graphene aerogel để hấp phụ, quang phân hủy chất màu hữu cơ trong nước*

Chuyên ngành: **Kỹ Thuật Hóa Học**

Mã số: **9520301**

Họ tên NCS: **Trương Thị Phụng Nguyệt Xuân Trinh**

Người hướng dẫn: **1: PGS. TS. Mai Thanh Phong**

2: PGS. TS. Nguyễn Hữu Hiếu

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại Học Bách Khoa, Đại Học Quốc Gia TP. Hồ Chí Minh**

Thông tin tóm tắt về những đóng góp mới về mặt học thuật, lý luận của luận án

Trong luận án này, vật liệu graphene aerogel (GA) và nanocomposite trên cơ sở GA như titanium dioxide/graphene aerogel (TiGA) và Silver-titanium dioxide/graphene aerogel (ATGA) đã được nghiên cứu tổng hợp và thử nghiệm quang phân hủy đối với hai loại chất màu hữu cơ là cation – methylen xanh (methylene blue – MB) và anion – methyl cam (methyl orange – MO). Nồng độ MB, MO được xác định bằng phương pháp phổ hấp thụ tử ngoại–khả kiến (ultraviolet-visible absorption spectroscopy – UV-Vis). Ba loại vật liệu (GA, TiGA, và ATGA) được tổng hợp bằng phương pháp khử hóa học với graphene oxide (GO) là tiền chất và sử dụng ethylenediamine (EDA) làm chất khử, nội dung cụ thể như sau:

Đối với GA: Vật liệu GA phù hợp tìm được dựa trên ảnh hưởng của hai điều kiện tổng hợp (thể tích EDA và tỷ lệ dung môi (nước:etanol)) đến đặc trưng của GA. Khả năng hấp phụ chất màu của GA được khảo sát thông qua dung lượng hấp phụ; ảnh hưởng của các yếu tố như thời gian, pH, và nồng độ chất màu đến dung lượng hấp phụ được khảo sát bằng phương pháp luân phiên từng biến. Bên cạnh đó, động học quá trình hấp phụ được khảo sát thông qua mô hình động học biểu kiến

(bậc một và bậc hai) và ba mô hình đẳng nhiệt hấp phụ (Langmuir, Freundlich, và Temkin). Khả năng thu hồi và tái sử dụng của vật liệu được khảo sát qua 5 chu kỳ hấp

phụ. Ngoài ra, cơ chế hấp phụ của vật liệu cũng được nghiên cứu và đề xuất thông qua kết quả phân tích phổ hồng ngoại biến đổi Fourier (Fourier transform infrared spectroscopy – FTIR) của vật liệu trước và sau khi hấp phụ.

Đối với TiGA: Vật liệu TiGA phù hợp tìm được dựa trên ảnh hưởng của hai phương pháp tổng hợp (khử hóa học và thủy nhiệt) và điều kiện tổng hợp (thể tích EDA, thể tích titanium (IV) isopropoxide (TIP), nhiệt độ, và thời gian khử) đến hiệu suất quang phân hủy chất màu MB, MO. Đồng thời, ảnh hưởng riêng lẻ các yếu tố (lượng vật liệu, nồng độ chất màu, và pH) đến hiệu suất quang phân hủy của vật liệu được khảo sát bằng phương pháp luân phiên từng biến. Khả năng ổn định của vật liệu được khảo sát qua 10 chu kỳ tái sử dụng. Ngoài ra, ảnh hưởng các gốc tự do đến hiệu suất quang phân hủy của vật liệu TiGA được khảo sát để đưa ra cơ chế quang phân hủy. Những chất bắt gốc tự do lần lượt được khảo sát là isopropyl alcohol (IPA), p-benzoquinone (p-BQ), và muối axit dinatri ethylenediaminetetraacetic (EDTA-Na₂) tương ứng với các gốc tự do •OH, •O₂⁻, và h⁺.

Đối với ATGA: Vật liệu ATGA phù hợp tìm được dựa trên ảnh hưởng của phương pháp tổng hợp (khử hóa học và thủy nhiệt) và điều kiện tổng hợp (thể tích EDA, tỷ lệ thể tích TIP:AgNO₃, nhiệt độ, và thời gian khử) đến hiệu suất quang phân hủy chất màu MB, MO. Ảnh hưởng các yếu tố (khoảng cách chiếu sáng, pH, thời gian hấp phụ, thời gian quang phân hủy, nồng độ chất màu, và lượng vật liệu) đến hiệu suất quang phân hủy của vật liệu được khảo sát theo mô hình sàng lọc Plackett – Burman. Trên cơ sở kết quả khảo sát ảnh hưởng của riêng lẻ các yếu tố, 3 yếu tố ảnh hưởng nhất được khảo sát ảnh hưởng đồng thời theo mô hình Box – Behnken. Đồng thời, khả năng thu hồi và tái sử dụng của vật liệu được khảo sát qua 10 chu kỳ. Cơ chế quang phân hủy của vật liệu đã được nghiên cứu và đề xuất thông qua kết quả khảo sát ảnh hưởng của các gốc tự do. Các chất bắt gốc tự do lần lượt được khảo sát giống như đối với vật liệu TiGA. Ngoài ra, khả năng phân hủy chất màu MB, MO của vật liệu ATGA còn được đánh giá dưới điều kiện ánh sáng khả kiến với mục đích mở rộng tiềm năng ứng dụng quang phân hủy của vật liệu. Hiệu quả quang phân hủy của vật liệu đối với chất màu được đánh giá qua kết quả phân tích hàm lượng carbon hữu cơ trong dung dịch (total organic carbon – TOC). Hơn nữa, vật liệu ổn định sau quá trình quang phân hủy chất

màu được xác định thông qua kết quả phân tích cấu trúc nhiễu xạ tia X (X-ray diffraction – XRD) và phổ FTIR.

Đặc trưng của ba loại vật liệu trên được phân tích bằng các phương pháp hiện đại như: Nhiễu xạ XRD, phổ FTIR, phổ Raman, kính hiển vi điện tử quét (scanning electron microscope – SEM), phổ tán sắc năng lượng tia X (energy-dispersive X-ray spectroscopy – EDS), kính hiển vi điện tử truyền qua (transmission electron microscopy – TEM), kính hiển vi điện tử truyền qua có độ phân giải cao (high resolution transmission electron microscopy – HR-TEM), nhiễu xạ lựa chọn vùng (selected area electron diffraction – SAED), phổ tử ngoại khả kiến (Ultraviolet-visible – UV-Vis) spectroscopy, và quang phổ quang điện tử tia X (X-ray photoelectron spectroscopy – XPS).

Tập thể hướng dẫn

Nghiên cứu sinh

PGS. TS. Mai Thanh Phong

PGS. TS. Nguyễn Hữu Hiếu

Trương Thị Phượng Nguyệt

Xuân Trinh