

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT KHẢ NĂNG HẤP PHỤ DICHLORO DIPHENYL TRICHLOROETHANE TRÊN GRAPHITIC CARBON NITRIDE BIẾN TÍNH BỞI SẮT BẰNG PHƯƠNG PHÁP PHIÊM HÀM MẬT ĐỘ

Phạm Thị Bé¹, Nguyễn Thị Thu Hà², Nguyễn Ngọc Hà²

Ngày nhận bài: 06/10/2021; Ngày phản biện thông qua: 03/11/2021; Ngày duyệt đăng: 30/11/2021

TÓM TẮT

Phương pháp phiêm hàm mật độ liên kết chặt (GFN2-xTB) kết hợp với phương pháp đường phản ứng (RP) được sử dụng để nghiên cứu khả năng hấp phụ chất hữu cơ khó phân hủy Dichloro Diphenyl Trichloroethane (DDT) trên g-C₃N₄ biến tính bởi Fe. Các thông số của quá trình hấp phụ: năng lượng hấp phụ, sự thay đổi các thông số cấu trúc, điện tích, bậc liên kết giữa DDT và g-C₃N₄ cũng như tính chất electron của hệ hấp phụ được tính toán và phân tích. Các kết quả thu được chỉ ra rằng, sự hấp phụ DDT trên g-C₃N₄ biến tính bởi Fe là quá trình hấp phụ hóa học do sự hình thành liên kết giữa Fe với các nguyên tử Cl của DDT. Quá trình hấp phụ không đi qua trạng thái chuyển tiếp. Hệ vật liệu Fe-g-C₃N₄ có thể coi là một vật liệu tiềm năng, ứng dụng trong công nghệ hấp phụ - xúc tác để xử lý các chất hữu cơ khó phân hủy.

Từ khóa: DDT, g-C₃N₄, Fe, POPs, hấp phụ, GFN2.

1. MỞ ĐẦU

Trong các hóa chất bảo vệ thực vật (BTVT), thì hóa chất BTVT thuộc nhóm các hợp chất hữu cơ khó phân hủy (Persistent Organic Pollutants – POPs) đang được quan tâm đặc biệt. Các hợp chất POPs có độc tính cao, tồn tại dai dẳng trong môi trường bởi chúng rất bền, khó bị phân hủy sinh học và hóa học (Huy et al., 2020).

Trong các hóa chất BTVT thuộc nhóm POPs, Dichloro Diphenyl Trichloroethane (DDT) đã được sử dụng nhiều trong sản xuất nông nghiệp ở nước ta cũng như nhiều nước khác trên thế giới (Chau et al., 2015; Dang et al., 2017; Hoi et al., 2016; Pariatamby and Kee, 2016). Dư lượng các chất này trong đất, nước ở nhiều khu vực còn rất cao và do đó, rất cần được xử lý (Islam et al., 2018; Tian et al., 2009).

Có nhiều phương pháp và kỹ thuật đã được sử dụng để loại bỏ các hợp chất ô nhiễm này: Phương pháp hấp phụ, phương pháp phân hủy sinh học, phân hủy hóa học và phương pháp oxi hóa nâng cao (Advanced Oxidation Process – AOP). Trong số các phương pháp này, phương pháp oxi hóa nâng cao, bao gồm các quá trình phân hủy quang xúc tác, sử dụng các hệ xúc tác quang hóa đang được quan tâm nghiên cứu nhiều trong giai đoạn hiện nay (Devipriya and Yesodharan, 2005). Trong công nghệ quang xúc tác xử lý POPs, giai đoạn hấp phụ và tương tác giữa phân tử POPs với các tâm hấp phụ trên bề mặt đóng vai trò rất quan trọng, ảnh hưởng tới hiệu suất của quá trình.

Trong những năm gần đây, graphitic carbon nitride (g-C₃N₄) nổi lên như một chất bán dẫn polimer phi kim loại tiềm năng trong các ứng dụng quang xúc tác. Tuy nhiên ở dạng nguyên chất, g-C₃N₄ có nhược điểm là dễ tái tổ hợp electron và lỗ trống quang sinh, diện tích bề mặt nhỏ, hiệu suất lượng tử thấp (Mo et al., 2015), dẫn đến khả năng hấp phụ và hiệu suất xúc tác quang không cao. Do đó, nhiều vật liệu dựa trên cơ sở g-C₃N₄ đã được nghiên cứu, điển hình là việc pha tạp các oxide kim loại, kim loại hoặc phi kim vào g-C₃N₄ nguyên chất đã làm tăng bề mặt riêng của các hệ vật liệu thu được (International, 2010; Li et al., 2018; Lin and Chiu, 2020), giảm năng lượng vùng cấm và giảm tốc độ tái kết hợp giữa electron và lỗ trống quang sinh (Ismael and Wu, 2019; Jiang et al., 2017).

Bài báo này trình bày các kết quả nghiên cứu lý thuyết khả năng hấp phụ DDT trên g-C₃N₄ biến tính bởi Fe. Kết quả này có thể cung cấp những hiểu biết ở cấp độ phân tử, làm rõ bản chất quá trình hấp phụ DDT trên g-C₃N₄ biến tính bởi Fe; cung cấp những thông tin hữu ích phục vụ cho việc thiết kế vật liệu mới, ứng dụng trong xử lý DDT.

2. NỘI DUNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Mô hình nghiên cứu

g-C₃N₄ có cấu trúc dạng s-triazine được xây dựng từ những đơn vị cấu trúc là các dị vòng s-triazine (CN)₃ liên kết với nhau thông qua nguyên tử nitrogen. Các nguyên tử ở biên được bão hòa hóa trị bằng các nguyên tử hydrogen. Mô hình g-

¹Khoa Khoa học Tự nhiên và Công nghệ, Trường Đại học Tây Nguyên;

²Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội;

Tác giả liên hệ: Phạm Thị Bé, ĐT: 0978980047, Email: ptbe@ttn.edu.vn.