

CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM
Độc lập - Tự do - Hạnh phúc

BẢN TRÍCH YẾU LUẬN ÁN

Họ và tên nghiên cứu sinh: **Nguyễn Ngọc Trí**

Tên đề tài luận án: *Nghiên cứu khả năng hấp phụ một số hợp chất hữu cơ trên các vật liệu TiO₂ và khoáng sét bằng phương pháp hóa học tính toán*

Chuyên ngành: Hóa lí thuyết và Hóa lí Mã số: 9440119

Người hướng dẫn khoa học: **PGS.TS. Nguyễn Tiến Trung** (Hướng dẫn 1) và **GS.TSKH. Nguyễn Minh Thọ** (Hướng dẫn 2)

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Quy Nhơn**

1. MỤC ĐÍCH VÀ ĐỐI TƯỢNG NGHIÊN CỨU

+ *Mục đích*: Xác định các cấu trúc bền trong sự hấp phụ các phân tử hữu cơ trên các bề mặt khác nhau của TiO₂ và khoáng sét; Khảo sát và đánh giá khả năng hấp phụ các phân tử hữu cơ khác nhau, đặc biệt đối với các phân tử kháng sinh được sử dụng trong nuôi tôm, trên các bề mặt vật liệu TiO₂ và khoáng sét; Cung cấp các thông số đặc trưng của các vật liệu cho các nghiên cứu thực nghiệm xa hơn nhằm xử lý và loại bỏ các dư lượng kháng sinh trong nước thải.

+ *Đối tượng*: Nghiên cứu lý thuyết về khả năng hấp phụ các phân tử hữu cơ, đặc biệt đối với các kháng sinh trên các vật liệu TiO₂ (pha rutile và anatase) và khoáng sét (kaolinite và vermiculite) sử dụng các phương pháp hóa học tính toán.

2. CÁC PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Các phương pháp lý thuyết hàm mật độ (DFT) với các phiếm hàm phù hợp như PBE, vdW được xem xét sử dụng để tối ưu hóa hình học và tính toán các đại lượng đặc trưng sử dụng các chương trình VASP, GPAW. Ngoài ra, các tính toán về DPE, PA, MEP, hình học tôpô, EDT được thực hiện bằng các chương trình Gaussian (phiên bản 03 và 09), AIM2000 và NBO 5.G.

3. CÁC KẾT QUẢ CHÍNH VÀ KẾT LUẬN

i/ Các quá trình hấp phụ các phân tử hữu cơ bao gồm các dẫn xuất của benzene, axit fomic, axit axetic trên bề mặt rutile-TiO₂ (110) (r-TiO₂) và anatase-TiO₂ (101) (a-TiO₂) được xác định là hấp phụ hóa học. Độ bền của các cấu hình hấp phụ chủ yếu được đóng góp bởi tương tác tĩnh điện Ti···O/N và sự bổ sung từ các liên kết hydro O-H···O. Kết quả cho thấy khả năng hấp phụ các phân tử trên cả hai bề mặt r-TiO₂ và a-TiO₂ giảm theo thứ tự -SO₃H > -COOH > -NH₂ > -NO₂ > -CHO > -OH.

ii/ Đối với kaolinite, kết quả tính toán về sự hấp phụ các dẫn xuất của benzen trên bề mặt H-slab và K⁺-slab cho thấy độ bền các cấu hình chủ yếu được đóng góp từ các tương tác ngoại phân tử O/N-H···O đối với H-slab hoặc cả hai O/N-H···O và K···O/N/C(π) đối với K⁺-slab. Khả năng hấp phụ của các phân tử này trên kaolinite giảm dần theo thứ tự -SO₃H > -COOH > -OH > -CHO > -NH₂ (H-slab) và -COOH ≥ -CHO > -NH₂ > -OH (K⁺-slab).

iii/ Sự hấp phụ các phân tử kháng sinh bao gồm ampicillin (AP), amoxicillin (AX), enrofloxacin (ER) và tetracycline (TC) trên bề mặt r-TiO₂ và a-TiO₂ được đặc trưng là hấp thụ hóa

học. Khả năng hấp phụ của các kháng sinh trên r-TiO₂ giảm nhẹ theo thứ tự TC ≥ AX ≥ AP ≥ ER trong khi đối với a-TiO₂, sự hấp phụ AP thuận lợi hơn so với AX. Các phân tích hóa học lượng tử chỉ ra những đóng góp đáng kể của tương tác tĩnh điện Ti⋯⋯O và liên kết hydro O/N/C-H⋯⋯O trong việc làm bền các phức thu được.

iv/ Quá trình hấp phụ cloramphenicol (CP) và kháng sinh nhóm β -lactam bao gồm ampicillin (AP), amoxicillin (AX) và benzylpenicillin (BP) trên bề mặt vermiculite đều là các quá trình hấp phụ hóa học mạnh. Độ bền của các phức được đóng góp chủ yếu từ các tương tác tĩnh điện Mg⋯⋯O/Cl/S/π và liên kết hydro O-H⋯⋯O. Đáng chú ý, vai trò quan trọng của tương tác Mg⋯⋯π trong việc làm bền phức được phát hiện lần đầu tiên trong quá trình hấp phụ kháng sinh nhóm β -lactam trên các bề mặt vật liệu.

4. NHỮNG ĐÓN GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

Kết quả của luận án mang lại cái nhìn sâu sắc hơn về quá trình hấp phụ các phân tử hữu cơ cũng như kháng sinh chứa các nhóm chức khác nhau như -OH, -COOH, -CHO, >C=O, -NO₂, -NH₂, -SO₃H trên các bề mặt vật liệu TiO₂ và khoáng sét.

Các kết quả tính toán trong nghiên cứu này cung cấp một sự đánh giá tốt về các quá trình hấp phụ diễn ra trên bề mặt của TiO₂ và khoáng sét. Đây là một khảo sát quan trọng cho các nghiên cứu thực nghiệm sau này nhằm loại bỏ hoặc phân hủy các chất ô nhiễm trong các môi trường.

Vai trò và bản chất của tương tác giữa các phân tử góp phần vào việc làm bền các phức cũng như khả năng hấp phụ của các phân tử trên bề mặt của TiO₂ và khoáng sét được phân tích, làm rõ bằng các phương pháp hóa học lượng tử.

Bình Định, ngày 31 tháng 5 năm 2021

TM. Tập thể hướng dẫn

Nghiên cứu sinh

PGS.TS. Nguyễn Tiến Trung

Nguyễn Ngọc Trí