

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

*HOÀNG THANH THÚY*

**NGHIÊN CỨU BIẾN TÍNH  $\text{TiO}_2$  NANO  
BẰNG  $\text{Cr(III)}$  LÀM CHẤT XÚC TÁC QUANG  
HÓA TRONG VÙNG ÁNH SÁNG TRÔNG THẤY**

**LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC**

**HÀ NỘI, 2011**

Trong một vài thập kỷ gần đây, cùng với sự phát triển nhanh chóng của đất nước, các ngành công nghiệp, nông nghiệp, các làng nghề ... ở Việt Nam đã có những tiến bộ không ngừng cả về số lượng cũng như chủng loại các sản phẩm và chất lượng cũng ngày càng được cải thiện. Bên cạnh những tác động tích cực do sự phát triển mang lại thì cũng phải kể đến những tác động tiêu cực. Một trong những mặt tiêu cực đó là các loại chất thải do các ngành công nghiệp thải ra ngày càng nhiều làm ảnh hưởng đến môi trường sống và sức khỏe của người dân. Môi trường sống của người dân đang bị đe dọa bởi các chất thải công nghiệp, trong đó vấn đề bức xúc nhất phải kể đến nguồn nước. Hầu hết các hồ, ao sông, ngòi đi qua các nhà máy công nghiệp ở Việt Nam đều bị ô nhiễm đặc biệt là các hồ ao trong các đô thị lớn như Hà Nội và Thành phố Hồ Chí Minh. Chính vì vậy, một vấn đề đặt ra là cần có những công nghệ hữu hiệu, có thể xử lý triệt để các chất ô nhiễm có trong môi trường nước.

Trong số các chất gây ô nhiễm nguồn nước, đáng chú ý là những chất hữu cơ bền có khả năng tích lũy trong cơ thể sinh vật và gây nhiễm độc cấp tính, mãn tính cho con người như: phenol, các hợp chất của phenol, các loại thuốc nhuộm, Rhodamin B.... Do vậy, việc nghiên cứu, xử lý nhằm giảm thiểu đến mức thấp nhất ô nhiễm là đặc biệt cần thiết.

Nhiều công nghệ tiên tiến xuất hiện trong các thập kỷ gần đây đã được ứng dụng trong công nghệ xử lý nước và nước thải. Hiện nay trên thế giới có nhiều phương pháp xử lý ô nhiễm như phương pháp hấp phụ, phương pháp sinh học, phương pháp oxi hóa – khử, phương pháp oxi hóa nâng cao... Trong các phương pháp trên phương pháp oxi hóa nâng cao có nhiều ưu điểm nổi trội như hiệu quả xử lý cao, khả năng khoáng hóa hoàn toàn các hợp chất hữu cơ độc hại thành các hợp chất vô cơ ít độc hại và được quan tâm ứng dụng rộng rãi trong xử lý môi trường.

Trong quá trình nghiên cứu và ứng dụng phương pháp oxi hóa nâng cao trong xử lý môi trường,  $\text{TiO}_2$  với vai trò một chất xúc tác quang hóa tiêu biểu đã được nhiều quốc gia phát triển như Mỹ, Nhật Bản, Đức...trên thế giới nghiên cứu, vì  $\text{TiO}_2$  có ưu điểm là giá thành rẻ, bền trong những điều kiện môi trường khác nhau, không độc hại, không gây ô nhiễm thứ cấp.

Titan đioxit ( $\text{TiO}_2$ ) là chất bán dẫn có dải trống năng lượng của rutile là 3.05 eV và của anatase là 3.25 eV nên có khả năng thực hiện các phản ứng quang xúc tác. Khả năng quang xúc tác của  $\text{TiO}_2$  thể hiện ở 3 hiệu ứng: quang khử nước trên điện cực  $\text{TiO}_2$ , tạo bề mặt siêu thấm nước và quang xúc tác phân hủy chất hữu cơ dưới ánh sáng tử ngoại  $\lambda < 380 \text{ nm}$ . Vì vậy hiện nay vật liệu  $\text{TiO}_2$  đang được nghiên cứu và sử dụng nhiều, nhất là trong lĩnh vực xử lý môi trường nước và khí với vai trò xúc tác quang hóa.

Tuy nhiên phần bức xạ tử ngoại trong quang phổ mặt trời đến bề mặt trái đất chỉ chiếm  $\sim 4\%$  nên việc sử dụng nguồn bức xạ này vào mục đích xử lý môi trường với xúc tác quang  $\text{TiO}_2$  bị hạn chế. Để mở rộng khả năng sử dụng năng lượng bức xạ mặt trời cả ở vùng ánh sáng nhìn thấy vào phản ứng quang xúc tác, cần giảm năng lượng vùng cấm của  $\text{TiO}_2$ . Để đạt mục đích đó, nhiều công trình nghiên cứu đã tiến hành đưa các ion kim loại và không kim loại lên bề mặt hoặc vào cấu trúc  $\text{TiO}_2$ .

**Trên những cơ sở khoa học và thực tiễn đó tôi đã thực hiện đề tài: “Nghiên cứu biến tính  $\text{TiO}_2$  nano bằng Cr(III) làm chất xúc tác quang hóa trong vùng ánh sáng trông thấy”**

## **CHƯƠNG 1 . TỔNG QUAN**

### **GIỚI THIỆU VỀ VẬT LIỆU BÁN DẪN VÀ XÚC TÁC QUANG HÓA**

#### ***Vật liệu bán dẫn và xúc tác quang hóa***

Năm 1930, khái niệm xúc tác quang ra đời. Trong hoá học nó dùng để nói đến những phản ứng xảy ra dưới tác dụng đồng thời của chất xúc tác và ánh sáng, hay nói cách khác, ánh sáng chính là nhân tố kích hoạt chất xúc tác, giúp cho phản ứng xảy ra.

Việc sử dụng chất bán dẫn làm xúc tác quang hóa và áp dụng vào xử lý môi trường đang thu hút được sự quan tâm nhiều hơn so với các phương pháp thông thường khác. Trong phương pháp này bản thân chất xúc tác không bị biến đổi trong suốt quá trình và không cần cung cấp nhiên liệu khác cho hệ phản ứng. Ngoài ra, phương pháp này còn có các ưu điểm như: có thể thực hiện trong nhiệt độ và áp suất bình thường, có thể sử dụng nguồn UV nhân tạo hoặc thiên nhiên, chất xúc tác rẻ tiền và không độc.

*Chất bán dẫn* (Semiconductor) là vật liệu trung gian giữa chất dẫn điện và chất cách điện. Gọi là “bán dẫn” có nghĩa là có thể dẫn điện ở một điều kiện nào đó, hoặc ở một điều kiện khác sẽ không dẫn điện. Khi giải thích cơ chế dẫn điện

của chất bán dẫn người ta phân thành chất bán dẫn loại n ( dẫn electron) và bán dẫn loại p ( dẫn lỗ trống dương) [12].

### ***Cơ chế phản ứng xúc tác quang dị thể.***

Quá trình xúc tác quang dị thể có thể được tiến hành ở pha khí hoặc pha lỏng. Cũng giống như các quá trình xúc tác dị thể khác, quá trình xúc tác quang dị thể được chia thành 6 giai đoạn như sau:

- Khuếch tán các chất tham gia phản ứng từ pha lỏng hoặc khí đến bề mặt xúc tác.
- Hấp phụ các chất tham gia phản ứng lên bề mặt chất xúc tác.
- Hấp thụ photon ánh sáng, phân tử chuyển từ trạng thái cơ bản sang trạng thái kích thích electron.
- Phản ứng quang hóa, được chia làm 2 giai đoạn nhỏ:

Phản ứng quang hóa sơ cấp, trong đó các phân tử bị kích thích (các phân tử chất bán dẫn) tham gia trực tiếp vào phản ứng với các chất bị hấp phụ. Phản ứng quang hóa thứ cấp, còn gọi là giai đoạn phản ứng “tối” hay phản ứng nhiệt, đó là giai đoạn phản ứng của các sản phẩm thuộc giai đoạn sơ cấp.

- Nhả hấp phụ các sản phẩm.
- Khuếch tán các sản phẩm vào pha khí hoặc lỏng.

Tại giai đoạn 3, phản ứng xúc tác quang hoá khác phản ứng xúc tác truyền thống ở cách hoạt hoá xúc tác. Trong phản ứng xúc tác truyền thống, xúc tác được hoạt hoá bởi nhiệt còn trong phản ứng xúc tác quang hoá, xúc tác được hoạt hoá bởi sự hấp thụ ánh sáng.

***Điều kiện để một chất có khả năng xúc tác quang.***

- Có hoạt tính quang hoá.
- Có năng lượng vùng cấm thích hợp để hấp thụ ánh sáng tử ngoại hoặc ánh sáng nhìn thấy.

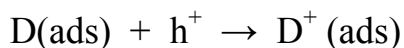
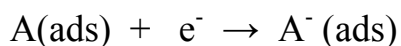
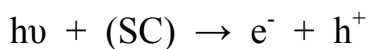
Quá trình đầu tiên của quá trình xúc tác quang dị thể phân hủy các chất hữu cơ và vô cơ bằng chất bán dẫn (Semiconductor ) là sự sinh ra của cặp điện tử - lỗ trống trong chất bán dẫn.

Có rất nhiều chất bán dẫn khác nhau được sử dụng làm chất xúc tác quang như:  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{ZnS}$ ,  $\text{CdS}$ ... Khi được chiếu sáng có năng lượng photon ( $h\nu$ ) thích hợp, bằng hoặc lớn hơn năng lượng vùng cấm  $E_{\text{gb}}$  ( $h\nu \geq E_{\text{gb}}$ ), thì sẽ tạo ra các cặp electron ( $e^-$ ) và lỗ trống ( $h^+$ ). Các e được chuyển lên vùng dẫn (quang electron), còn các lỗ trống ở lại vùng hoá trị.

Các phân tử của chất tham gia phản ứng hấp phụ lên bề mặt chất xúc tác gồm hai loại:

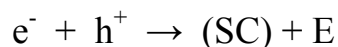
- Các phân tử có khả năng nhận e (Acceptor).
- Các phân tử có khả năng cho e (Donor).

Quá trình chuyển điện tử có hiệu quả hơn nếu các phân tử chất hữu cơ và vô cơ bị hấp phụ trước trên bề mặt chất xúc tác bán dẫn (SC). Khi đó, các electron ở vùng dẫn sẽ chuyển đến nơi có các phân tử có khả năng nhận electron (A), và quá trình khử xảy ra, còn các lỗ trống sẽ chuyển đến nơi có các phân tử có khả năng cho electron (D) để thực hiện phản ứng oxy hoá:

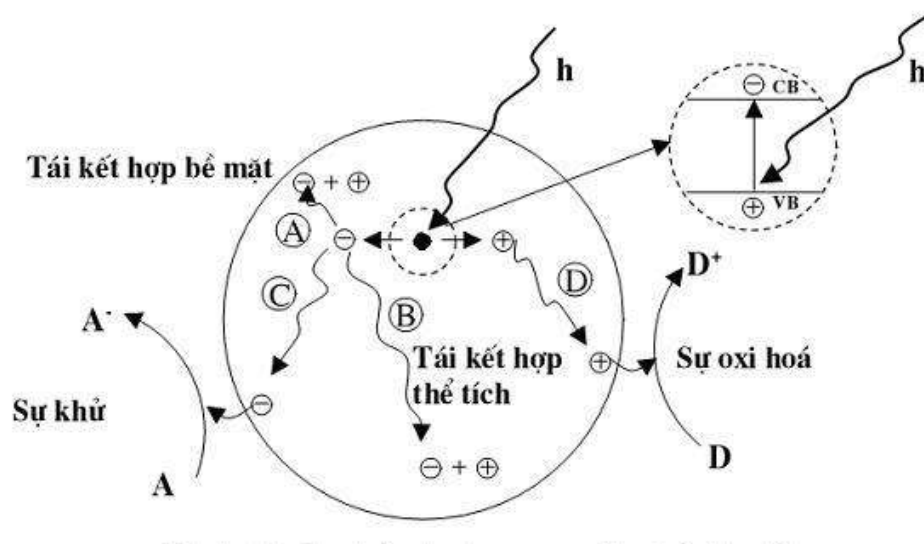


Các ion  $A^-$  (ads) và  $D^+$  (ads) sau khi được hình thành sẽ phản ứng với nhau qua một chuỗi các phản ứng trung gian và sau đó cho ra các sản phẩm cuối cùng.

Như vậy quá trình hấp thụ photon của chất xúc tác là giai đoạn khởi đầu cho toàn bộ chuỗi phản ứng. Trong quá trình xúc tác quang, hiệu suất lượng tử có thể bị giảm bởi sự tái kết hợp của các electron và lỗ trống.



Trong đó (SC) là tâm bán dẫn trung hoà và E là năng lượng được giải phóng ra dưới dạng bức xạ điện từ ( $h\nu' \leq h\nu$ ) hoặc nhiệt.



Hình 1.1. Cơ chế xúc tác quang của chất bán dẫn

Hiệu quả của quá trình quang xúc tác có thể được xác định bằng hiệu suất lượng tử, đó là tỉ lệ giữa số phân tử phản ứng trên số photon hấp thụ. Việc đo ánh sáng bị hấp thụ thực tế rất khó khăn ở trong hệ dị thể vì sự tán xạ của ánh sáng bởi bề mặt chất bán dẫn. Để xác định hiệu suất lượng tử chúng ta phải tuân theo 2 định luật quang hóa sau đây:

Định luật Grotthuss và Draper: Chỉ có ánh sáng bị hệ hấp thụ mới có khả năng gây ra phản ứng, hay nói cách khác là phản ứng quang hóa chỉ xảy ra khi ánh sáng được hấp thụ bởi các phân tử bán dẫn.

Định luật Einstein: Một photon hay lượng tử ánh sáng bị hấp thụ thì chỉ có khả năng kích thích một phân tử trong giai đoạn sơ cấp.

Hiệu suất lượng tử của hệ lý tưởng ( $\varphi$ ) được xác định bởi hệ thức đơn giản:

$$\varphi = \frac{\Delta N}{\Delta N_o}$$

Trong đó:  $\Delta N$  là số phân tử phản ứng

$\Delta N_o$  là số photon bị hấp thụ

Khi một phân tử chất bán dẫn bị kích thích và phân ly ra một electron kèm theo một lỗ trống, số electron này có thể chuyển tới chất phản ứng, ta gọi là  $N_c$ , số còn lại kết hợp với lỗ trống để tạo lại một phân tử trung hòa  $N_k$ . Theo định luật Einstein ta có:

$$\Delta N_o = N_c + N_k$$

Giả sử mỗi phân tử (A) tham gia phản ứng nhận 1 electron, khi đó số phân tử phản ứng sẽ bằng số electron được vận chuyển.

$$\Delta N = N_c$$

Vậy hiệu suất lượng tử có giá trị:

$$\varphi = \frac{N_c}{N_c + N_k}$$

Nếu ta xét quá trình xảy ra trong một đơn vị thời gian thì có thể thay số electron bằng tốc độ vận chuyển electron  $k_c$  và tốc độ tái kết hợp electron  $k_k$ :

$$\varphi = \frac{k_c}{k_c + k_k}$$

Ở đây ta thừa nhận sự khuếch tán của sản phẩm vào dung dịch xảy ra rất nhanh, không có phản ứng ngược tách điện tử của  $A^-$ , và tách lỗ trống của  $D^+$ . Để tăng hiệu suất lượng tử ( $\phi$ ) chúng ta phải nghĩ cách tăng tốc độ chuyển điện tử  $k_c$  và giảm tốc độ tái kết hợp electron với lỗ trống  $k_k$ . "Bẫy điện tích" được sử dụng để thúc đẩy sự bẫy điện tử và lỗ trống ở bề mặt, tăng thời gian tồn tại của electron và lỗ trống trong bán dẫn. Điều này dẫn tới việc làm tăng hiệu quả của quá trình chuyển điện tích tới chất phản ứng.

Bẫy điện tích có thể được tạo ra bằng cách biến tính bề mặt chất bán dẫn như đưa thêm kim loại, chất biến tính vào hoặc sự tổ hợp với các chất bán dẫn khác dẫn tới sự giảm tốc độ tái kết hợp điện tử - lỗ trống và tăng hiệu suất lượng tử của quá trình quang xúc tác.

### ***Các dạng cấu trúc và tính chất vật lý [43]***

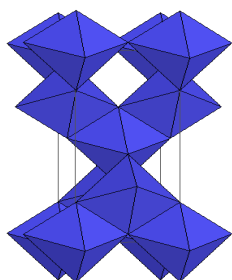
$TiO_2$  là chất rắn màu trắng, khi đun nóng có màu vàng, khi làm lạnh thì trở lại màu trắng. Tinh thể  $TiO_2$  có độ cứng cao, khó nóng chảy ( $t_{nc}^o = 1870^oC$ ).

$TiO_2$  có bốn dạng thù hình. Ngoài dạng vô định hình, nó có ba dạng tinh thể là anatase (tetragonal), rutile (tetragonal) và brookite (orthorhombic) (Hình 2).

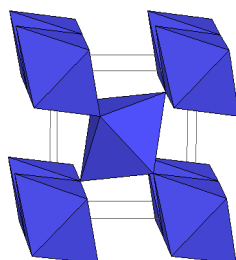
Rutile là dạng bền phổ biến nhất của  $TiO_2$ , có mạng lưới tứ phương trong đó mỗi ion  $Ti^{4+}$  được ion  $O^{2-}$  bao quanh kiểu bát diện, đây là kiến trúc điển hình của hợp chất có công thức  $MX_2$ . Anatase và brookite là các dạng giả bền và chuyển thành rutile khi nung nóng.

Tất cả các dạng tinh thể đó của  $TiO_2$  tồn tại trong tự nhiên như là các khoáng, nhưng chỉ có rutile và anatase ở dạng đơn tinh thể là được tổng hợp ở nhiệt độ thấp. Hai pha này cũng được sử dụng trong thực tế làm chất màu, chất độn, chất xúc tác... Các pha khác (kể cả pha ở áp suất cao) chẳng hạn như

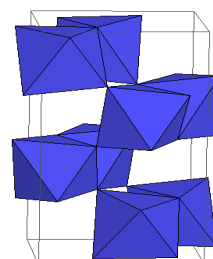
brookite cũng quan trọng về mặt ứng dụng, tuy vậy brookite bị hạn chế bởi việc điều chế brookite sạch không lẫn rutile hoặc anatase là điều khó khăn.



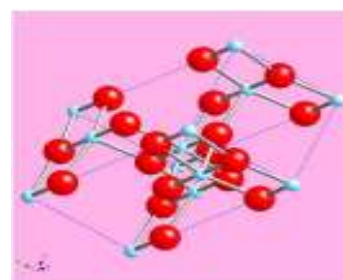
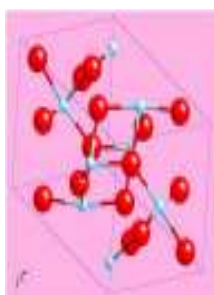
Dạng anatase



Dạng rutile



Dạng brookite

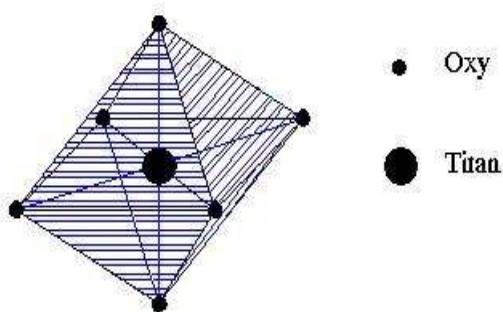


Hình 1.2. Cấu trúc tinh thể các dạng thù hình của  $\text{TiO}_2$

*Bảng 1.1. Một số tính chất vật lý của tinh thể rutile và anatase*

| Các thông số                          |       | Rutile                     | Anatase                            |
|---------------------------------------|-------|----------------------------|------------------------------------|
| Cấu trúc tinh thể                     |       | Tứ diện                    | Tứ diện                            |
| Thông số mạng                         | A (Å) | 4.58                       | 3.78                               |
|                                       | C (Å) | 2.95                       | 9.49                               |
| Khối lượng riêng (g/cm <sup>3</sup> ) |       | 4.25                       | 3.895                              |
| Chiết suất                            |       | 2.75                       | 2.54                               |
| Độ rộng vùng cấm (eV)                 |       | 3.05                       | 3.25                               |
| Nhiệt độ nóng chảy                    |       | 1830 ÷ 1850 <sup>o</sup> C | Ở nhiệt độ cao chuyển thành rutile |

Cấu trúc mạng lưới tinh thể của rutile, anatase và brookite đều được xây dựng từ các đa diện phối trí tám mặt (octahedra) TiO<sub>6</sub> nối với nhau qua cạnh hoặc qua đỉnh oxy chung. Mỗi ion Ti<sup>4+</sup> được bao quanh bởi tám mặt tạo bởi sáu ion O<sup>2-</sup>.



*Hình 1.3. Hình khối bát diện của TiO<sub>2</sub>*

Các mạng lưới tinh thể của rutile, anatase và brookite khác nhau bởi sự biến dạng của mỗi hình tám mặt và cách gắn kết giữa các octahedra. Hình tám mặt trong rutile không đồng đều hơi bị biến dạng thôi. Các octahedra của anatase bị biến dạng mạnh hơn, vì vậy mức đối xứng của hệ là thấp hơn. Khoảng cách Ti-Ti trong anatase lớn hơn trong rutile nhưng khoảng cách Ti-O trong anatase lại ngắn hơn so với rutile. Trong cả ba dạng thù hình của  $\text{TiO}_2$  các octahedra được nối với nhau qua đỉnh hoặc qua cạnh (Hình 1.2 và Hình 1.3).

### ***Sự chuyển pha trong $\text{TiO}_2$***

Hầu hết các tài liệu tham khảo đều chỉ ra rằng quá trình thủy phân các muối vô cơ đều tạo ra tiền chất titan đioxit dạng vô định hình hoặc dạng cấu trúc anatase hay rutile.

Khi nung axit metatitanic  $\text{H}_2\text{TiO}_3$  một sản phẩm trung gian chủ yếu của quá trình sản xuất  $\text{TiO}_2$  nhận được khi thủy phân các dung dịch muối titan, thì trước hết tạo thành anatase. Khi nâng nhiệt độ lên thì anatase chuyển thành rutile.

Quá trình chuyển dạng thù hình của  $\text{TiO}_2$  vô định hình - anatase - rutile bị ảnh hưởng rõ rệt bởi các điều kiện tổng hợp và các tạp chất, quá trình chuyển pha từ dạng vô định hình hoặc cấu trúc anatase sang cấu trúc rutile xảy ra ở nhiệt độ trên  $450^\circ\text{C}$ .

Ví dụ: Với các axit metatitanic sạch, không có tạp chất, thì nhiệt độ chuyển pha từ anatase thành rutile sẽ nằm trong khoảng  $610\div 730^\circ\text{C}$ . Với axit metatitanic thu được khi thủy phân các muối clorua và nitrat của titan thì quá trình chuyển thành rutile dễ dàng hơn nhiều (ở gần  $500^\circ\text{C}$ ). Trong khi đó, với axit metatitanic đã được điều chế bằng cách thủy phân các muối sunfat thì nhiệt độ chuyển pha sẽ

cao hơn, nằm trong khoảng 850÷900°C. Điều này có thể là do có sự liên quan đến sự có mặt của các sunfat bazơ hoặc là các anion sunfat nằm dưới dạng hấp phụ.

Ngoài ion  $\text{SO}_4^{2-}$  nhiệt độ chuyển anatase thành rutile cũng bị tăng cao khi có mặt một lượng nhỏ tạp chất  $\text{SiO}_2$ , cũng như khi có mặt HCl trong khí quyển bao quanh.

Theo công trình [5] thì năng lượng hoạt hoá của quá trình chuyển anatase thành rutile phụ thuộc vào kích thước hạt của anatase, nếu kích thước hạt càng bé thì năng lượng hoạt hoá cần thiết để chuyển anatase thành rutile càng nhỏ.

Theo các tác giả công trình [4] thì sự có mặt của pha brookite có ảnh hưởng đến sự chuyển pha anatase thành rutile: Khi tăng nhiệt độ nung thì tốc độ chuyển pha brookit sang rutile xảy ra nhanh hơn tốc độ chuyển pha anatase sang rutile nên tạo ra nhiều mầm tinh thể rutile hơn, đặc biệt với các mẫu  $\text{TiO}_2$  chứa càng nhiều pha brookit thì sự chuyển pha anatase sang rutile xảy ra càng nhanh. Quá trình xảy ra hoàn toàn ở 900°C.

## CHƯƠNG 2 - THỰC NGHIỆM

Tiến hành tổng hợp vật liệu nano  $\text{TiO}_2$  bằng phương pháp sol-gel thủy phân trong môi trường rượu và vật liệu nano  $\text{TiO}_2$  biến tính bởi Cr(III) bằng phương pháp sol-gel thủy nhiệt

Khảo sát các yếu tố ảnh hưởng quá trình tổng hợp vật liệu, nghiên cứu đặc trưng của vật liệu: thành phần pha, kích thước hạt, đặc trưng hình thái học và thành phần của vật liệu

Thử nghiệm các yếu tố ảnh hưởng đến quá trình quang xúc tác của vật liệu biến tính tổng hợp được qua phản ứng phân hủy Rhodamin B, Phenol đỏ, một số

thuốc nhuộm và nước thải dệt nhuộm. *Thí nghiệm khảo sát hoạt tính xúc tác của vật liệu*

Lấy 100ml mỗi loại hợp chất có nồng độ xác định cho vào ống thủy tinh sau đó thêm 150mg vật liệu xúc tác và khuấy trong bóng tối khoảng 1h với tốc độ không đổi bằng máy khuấy từ để quá trình hấp phụ đạt cân bằng. Trước khi tiến hành thí nghiệm, lấy một ít mẫu ra để xác định nồng độ. Sau đó, hỗn hợp được chiếu sáng và khuấy liên tục với tốc độ không đổi. Mẫu thí nghiệm được lấy ra ở các thời điểm 0,5h; 1h; 1,5h; 2h; 2,5h; 3h; 3,5h; 4h sau khi chiếu sáng.

Sau khi ly tâm tách xúc tác, nồng độ chất phản ứng trong mẫu được xác định bằng độ hấp thụ quang trên máy UV – Vis lỏng GBC Instrument – 2855 và độ giảm COD.

Đối với thuốc nhuộm E – 3G, A – 2R và mẫu thực tế, hoạt tính quang hóa của vật liệu được đánh giá qua độ giảm COD của các chất sau phản ứng.

Khảo sát các điều kiện tổng hợp và các yếu tố ảnh hưởng đến hoạt tính quang xúc tác của vật liệu bằng cách phân hủy Rhodamin B.

Mở rộng khả năng ứng dụng của vật liệu  $\text{TiO}_2$  biến tính với việc phân hủy các chất hữu cơ màu như: Phenol, một số loại thuốc nhuộm và nước thải ở làng nghề Dương Nội.

### **CHƯƠNG 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN**

Trên cơ sở một số kết quả nghiên cứu, có thể đưa ra một số kết luận như sau:

Khảo sát ảnh hưởng lượng Crom pha tạp vào  $\text{TiO}_2$  và thời gian thủy nhiệt. Kết quả thu được các điều kiện tổng hợp mẫu xúc tác Cr- $\text{TiO}_2$  tối ưu như sau: lượng Crom pha tạp vào  $\text{TiO}_2$  là 0,5% , tổng hợp ở nhiệt độ  $180^\circ\text{C}$ , thời gian

thủy nhiệt 10 giờ. Đã tổng hợp thành công xúc tác Cr-  $\text{TiO}_2$  từ TIOT và  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ .

Sau khi pha tạp Cr đã làm dịch chuyển phổ hấp thụ ánh sáng của vật liệu sang vùng ánh sáng khả kiến và kết quả nghiên cứu cho thấy rằng vật liệu thu được có hoạt tính quang xúc tác khá tốt ở vùng ánh sáng trông thấy. Điều này mở ra triển vọng nghiên cứu sâu hơn ứng dụng xúc tác Cr- $\text{TiO}_2$  để xử lý các hợp chất hữu cơ ngay trong vùng ánh sáng trông thấy.

Xác định đặc trưng cấu trúc, thành phần và đặc tính xúc tác bằng phương pháp: Nhiễu xạ tia X, phổ EDX, phổ phản xạ khuếch tán UV – VIS, kính hiển vi điện tử quét (SEM)

Khảo sát ảnh hưởng của pH, lượng xúc tác, nguồn sáng lên khả năng phân hủy Rhodamin B. Từ kết quả thu được cho thấy điều kiện tối ưu để phân hủy hoàn toàn Rhodamin B có nồng độ 20mg/l là: pH = 6, lượng xúc tác là 1,56g/lít, trong điều kiện chiếu xạ ánh sáng mặt trời.

Đã khảo sát hoạt tính quang xúc tác của  $\text{TiO}_2$  biến tính bởi Cr(III) với nguồn kích thích ánh sáng mặt trời trong phản ứng phân hủy Rhodamin B. Kết quả thí nghiệm cho thấy lượng Rhodamin B phân hủy hoàn toàn tại pH = 6, sau thời gian 150 phút.

Khảo sát khả năng xử lý của xúc tác với các hợp chất hữu cơ khác như: Phenol đỏ, phẩm vàng AX-2R, E-3G. Kết quả thực nghiệm cho thấy vật liệu Cr- $\text{TiO}_2$  có khả năng xử lý tương đối tốt với Phenol đỏ, phẩm vàng AX-2R và E-3G sau 240 phút Phenol đỏ, phẩm vàng AX-2R và E-3G được phân hủy gần như hoàn toàn.

Đã tiến hành xác định COD của phẩm vàng AX-2R và E-3G, kết quả cho thấy vật liệu Cr-TiO<sub>2</sub> có khả năng xúc tác cho quá trình oxi hóa sâu thuốc nhuộm, phenol đỏ.

Đã tiến hành thí nghiệm khảo sát khả năng tái sử dụng của vật liệu, kết quả thực nghiệm cho thấy: sau khi thu hồi và tái sử dụng vật liệu Cr-TiO<sub>2</sub> vẫn có hoạt tính khá tốt. Sau 4 lần sử dụng hiệu suất phân hủy Rhodamin B vẫn đạt đến 90%.

Đã tiến hành so sánh hoạt tính của TiO<sub>2</sub> và Cr-TiO<sub>2</sub>, kết quả thu được cho thấy trong vùng ánh sáng trông thấy vật liệu Cr-TiO<sub>2</sub> có hoạt tính quang hóa tốt hơn TiO<sub>2</sub> rất nhiều lần. Điều này chứng tỏ TiO<sub>2</sub> biến tính bởi Cr(III) làm tăng khả năng xúc tác của vật liệu trong vùng ánh sáng trông thấy.

Bước đầu tiến hành thí nghiệm sử dụng vật liệu Cr – TiO<sub>2</sub> xử lý mẫu nước thải dệt nhuộm Dương Nội – Hà Đông – Hà Nội. Kết quả cho thấy COD của mẫu nước thải thực tế giảm theo thời gian xử lý. Như vậy, xúc tác chế tạo được xử lý tương đối tốt với mẫu nước thải chứa các loại phẩm nhuộm.