

CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM

Độc lập - Tự do - Hạnh phúc

=====

## TRÍCH YẾU LUẬN ÁN TIẾN SĨ HÓA HỌC

Nghiên cứu sinh: TRẦN THỊ VĂN THỊ

Tên đề tài: “Xúc tác chứa ion kim loại trong phản ứng chuyển hóa phenol và ancol”

Chuyên ngành: Hóa Hữu cơ

Mã số: 1.04.02

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - Đại học Quốc gia Hà Nội

Người hướng dẫn khoa học: GS.TSKH. Ngô Thị Thuận

### NỘI DUNG TRÍCH YẾU

#### 1. Mục đích và đối tượng nghiên cứu của luận án

*1.1. Mục đích nghiên cứu:* Điều chế các hệ xúc tác chứa ion kim loại hoạt động trên chất mang cho phản ứng oxi hóa chọn lọc phenol thành dẫn xuất dihidroxibenzen và ancol benzylic thành benzandehit. Nghiên cứu điều kiện điều chế và sử dụng xúc tác để nâng cao hiệu suất sản phẩm. Khảo sát cấu trúc và các yếu tố ảnh hưởng đến cấu trúc xúc tác. Đề nghị cơ chế phản ứng trên các hệ xúc tác nghiên cứu.

#### *1.2. Đối tượng nghiên cứu*

+ Phản ứng oxi hóa chọn lọc phenol thành dẫn xuất dihidroxibenzen và ancol benzylic thành benzandehit.

+ Các hệ xúc tác chứa ion kim loại.

#### 2. Các phương pháp nghiên cứu

Phương pháp điều chế xúc tác, phương pháp tiến hành phản ứng trong pha lỏng, các phương pháp phân tích hóa học, các phương pháp vật lý hiện đại: phổ hồng ngoại, phổ khuếch tán tử ngoại - khả kiến, phổ Raman, giản đồ nhiễu xạ Ronghen, chụp ảnh qua kính hiển vi điện tử quét, các phương pháp phân tích sắc ký.

#### 3. Các kết quả chính và kết luận

##### *3.1. Những vấn đề khoa học đã được giải quyết*

1. Đã chọn lựa và điều chế các hệ xúc tác thích hợp cho mỗi phản ứng oxi hóa phenol và ancol benzylic với điều kiện phản ứng dễ dàng: pha lỏng, áp suất thường và chất oxi hóa “sạch”  $H_2O_2$ .

2. Lần đầu tiên, đã sử dụng các phương pháp phổ: Raman, XRD, UV-VIS-DRS, IR, SEM... để nghiên cứu tương đối hệ thống vấn đề tương tác giữa chất mang và hợp chất chứa kim loại hoạt động trong quá trình điều chế xúc tác, cấu trúc và các yếu tố ảnh hưởng lên cấu trúc của các tâm oxi hóa trên bề mặt xúc tác.
3. Lần đầu tiên, đã xác nhận được mối quan hệ giữa cấu trúc của các tâm kim loại hoạt động xúc tác với hoạt tính cũng như độ chọn lọc của sản phẩm oxi hoá hữu hạn trong phản ứng oxi hóa phenol và ancol benzylic.
4. Đã tìm kiếm các bằng chứng để đề nghị cơ chế oxi hóa phenol và ancol benzylic thích hợp trong điều kiện phản ứng trên các tâm hoạt động của xúc tác.
5. Độ chọn lọc cao đối với sản phẩm xeton của các ancol bậc hai đã mở ra khả năng điều chế dihidroxiaxeton từ glixerin với hiệu suất cao và độ chọn lọc tuyệt đối. Đây là một hướng mới cần tiếp tục nghiên cứu.

### 3.2. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn

Phản ứng oxi hóa các hợp chất hữu cơ, đặc biệt phenol và ancol, là quá trình có ý nghĩa thiết thực trong tổng hợp tinh vi cũng như trong xử lý các hợp chất hữu cơ gây ô nhiễm môi trường. Việc nghiên cứu chuyển hóa các hợp chất này trên xúc tác dị thể “sạch” với chất oxi hóa “sạch” là mục đích nghiên cứu mà hiện nay khoa học đang hướng tới. Đề tài luận án có tính thiết thực cao. Khối lượng luận án rất lớn, có giá trị về lý thuyết và ứng dụng trong công nghệ.

### 3.3. Các mục tiêu đạt được

Luận án là công trình nghiên cứu logic và có hệ thống để giải quyết mục đích đặt ra và đã đạt được các mục tiêu cơ bản sau đây:

- + Luận án đã giải quyết một cách tương đối hoàn chỉnh vấn đề lý thuyết về cấu trúc của hệ xúc tác chứa ion kim loại hoạt động trên chất mang, đã chứng minh các phản ứng oxi hóa chọn lọc này xảy ra theo cơ chế gốc. Các kết quả nhận được là có giá trị học thuật cao.

- + Đã lựa chọn và điều chế được các hệ xúc tác thích hợp cho các phản ứng nghiên cứu. Đã thu được độ chọn lọc rất cao của DHA (dihidroxiaxeton) khi oxi hóa chọn lọc glixerin trên hệ xúc tác điều chế. Các kết quả thực nghiệm là đa dạng và phong phú, rất có giá trị về ứng dụng trong công nghệ.

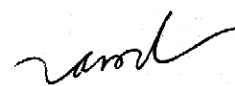
Hà Nội, ngày 22 tháng 01 năm 2002,

Người hướng dẫn khoa học,

Nghiên cứu sinh



GS.TSKH. NGÔ THỊ THUẬN



TRẦN THỊ VĂN THỊ

## DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ CÓ LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN

1. Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (1997), "Nghiên cứu phản ứng hidroxy hóa phenol trên hệ xúc tác vanadi oxit/zeolit", *Tạp chí Hóa học*, T.35, số 4, tr. 42-44.
2. Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (1999), "Các nghiên cứu về xúc tác dị thể có chứa kim loại trong phản ứng oxi hóa chọn lọc pha lỏng của các ancol và phenol với chất oxi hóa  $H_2O_2$ ", *Tạp chí Hóa học*, T. 37, số 1, Tr. 71-78.
3. Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi, Nguyễn Trí Phương (1999), "Xúc tác  $V_2O_5/SiO_2$  trong phản ứng hidroxy hóa phenol thành dihidroxibenzen", *Tuyển tập các công trình Hội nghị khoa học và công nghệ Hóa Hữu cơ toàn quốc lần thứ nhất*, Quy Nhơn, tr. 209-212.
4. Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (1999), "Ảnh hưởng của chất mang đến hoạt tính và độ chọn lọc của xúc tác trong phản ứng hidroxy hóa pha lỏng phenol", *Tuyển tập các công trình Hội nghị khoa học và công nghệ Hóa Hữu cơ toàn quốc lần thứ nhất*, Quy Nhơn, tr. 320-324.
5. Trần Thị Văn Thi (1999), "Tính chọn lọc hình thể của rây phân tử biến tính trong phản ứng oxi hóa pha lỏng phenol", *Thông tin khoa học* số 11, tập 1, Trường Đại học Khoa học Huế, tr. 162-165.
6. Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (2000), "Các kim loại chuyển tiếp trong hệ xúc tác dị thể oxi hóa ancol và phenol", *Tạp chí Hóa học*, T. 38, số 1, tr. 19-22.
7. Trần Thị Văn Thi (2000), "Một số yếu tố ảnh hưởng đến hoạt tính và độ chọn lọc của xúc tác Fe- $Al_2O_3$  trong phản ứng hidroxy hóa phenol", *Thông tin Khoa học* số 11, tập 5, Trường Đại học Khoa học Huế, tr. 14-18.

8. **Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (2001),** “Nghiên cứu sự biến đổi cấu trúc của hệ xúc tác Fe-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> trong phản ứng oxi hóa bằng H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, *Tạp chí Hóa học*, T. 39, số 3, tr. 57-59.
9. **Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (2001),** “Ảnh hưởng của phương pháp điều chế chất mang lên hoạt tính và độ chọn lọc của xúc tác trong phản ứng oxi hóa pha lỏng ancol benzylic”, *Tuyển tập các công trình Hội nghị Hóa Hữu cơ toàn quốc lần thứ hai*, Hà Nội.
10. **Ngô Thị Thuận, Trần Thị Văn Thi (2001),** “Cơ chế của phản ứng oxi hóa ancol benzylic bằng H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> trên xúc tác vanadi oxit/chất mang”, *Tuyển tập các công trình Hội nghị Hóa Hữu cơ toàn quốc lần thứ hai*, Hà Nội.