

THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN TIẾN SĨ

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: Vũ Hoàng Hương
2. Giới tính: Nam
3. Ngày sinh: 06/08/1990
4. Nơi sinh: Hải Phòng
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: Số 2251/QĐ-ĐHKHTN ngày 19/07/2019 của Hiệu trưởng Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo (nếu có): Văn bản gia hạn số 151/QĐ-ĐHKHTN; Văn bản gia hạn số 1073/QĐ-ĐHKHTN; Quyết định điều chỉnh thời gian đào tạo số 4955/QĐ-ĐHKHTN; Văn bản gia hạn số 4828/QĐ-ĐHKHTN.
7. Tên đề tài luận án: Chế tạo và nghiên cứu tính chất của vật liệu quang xúc tác TiO_2 , SnO_2 pha tạp Fe và cấu trúc dị thể liên quan.
8. Chuyên ngành: Vật lý chất rắn
9. Mã số: 9440130.02
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học:

HDC: PGS.TS. Ngọc An Bang - Cơ quan công tác: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên-ĐHQGHN.

HDP: PGS.TS. Trịnh Thị Loan - Cơ quan công tác: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên-ĐHQGHN

11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:

Mục đích và đối tượng nghiên cứu của luận án

- Nghiên cứu để tìm ra quy trình chế tạo thành công các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ có các tính chất như mong muốn nhằm tăng cường và mở rộng khả năng ứng dụng của chúng vào thực tế.
- Đánh giá sự ảnh hưởng của điều kiện chế tạo mẫu, nồng độ tạp chất Fe^{3+} đến các tính chất cấu trúc, hình thái học, tính chất quang và quang điện các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Tìm các điều kiện tối ưu cho hiệu quả quang xúc tác tốt nhất của các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ qua khảo sát sự phân hủy các chất ô nhiễm RhB hoặc CIP trong môi trường nước dưới sự kích thích của ánh sáng.

Các phương pháp nghiên cứu đã sử dụng

- Luận án sử dụng phương pháp thủy nhiệt để chế tạo các hệ mẫu
- Phân tích cấu trúc tính chất của vật liệu đã chế tạo bằng các công cụ hiện đại như giản đồ nhiễu xạ tia X, phổ tán xạ Raman, ảnh FESEM, ảnh TEM, Phổ XPS.....
- Sử dụng tính toán lý thuyết DFT để phân tích cấu trúc điện tử của các hệ vật liệu

Các kết quả chính

- Đã nghiên cứu và tìm ra các quy trình chế tạo thành công các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ với các nồng độ tạp Fe^{3+} khác nhau.
- Tạp chất Fe^{3+} gây ra hiện tượng giãn mạng, mở rộng và dịch chuyển các mode Raman đặc trưng của TiO_2 và tăng cường quá trình chuyển pha TiO_2 từ anatase thành rutile ở điều kiện nhiệt độ thấp. Mẫu TiO_2 pha tạp Fe^{3+} với nồng độ 4 %mol được tìm thấy có hiệu suất phân hủy RhB cao nhất, cao hơn mẫu TiO_2 không pha tạp khoảng 1,78 lần.
- Tạp chất Fe^{3+} làm giảm các thông số hằng số mạng, khiến các mode Raman bị mở rộng và mật độ dòng quang điện của SnO_2 tăng đáng kể; tạo các mức năng lượng mới trong vùng cấm của SnO_2 . Mẫu SnFe_3 thể hiện hiệu suất phân hủy CIP cao nhất, đạt 98,23% sau 120 phút tiếp xúc với ánh sáng, cao hơn 18,6 lần so với SnO_2 không pha tạp.
- Các kết quả nghiên cứu về chuyển tiếp dị thể $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ giúp đưa ra một phương pháp tiềm năng để thiết kế các chuyển tiếp dị thể S-scheme cho quá trình photo-Fenton hiệu quả. Trong các mẫu, chuyển tiếp dị thể pha tạp Fe^{3+} với nồng độ 7 %mol có hoạt tính quang xúc tác cao nhất với hằng số tốc độ phản ứng bằng $17,03 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$, cao hơn 8,4 lần so với các đơn chất $\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và 2,1 lần so với TiO_2 pha tạp Fe^{3+} cùng nồng độ.
- Việc mở rộng nghiên cứu trên đối tượng chuyển tiếp dị thể $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ vừa giúp phân hủy chất gây ô nhiễm RhB hiệu quả vừa tạo năng lượng xanh khí H_2 . Trong các mẫu, OVs-TCN10 cho hoạt tính quang xúc tác cao nhất, với hằng số tốc độ $0,021 \text{ phút}^{-1}$, cao hơn 12,17 lần so với $\text{g-C}_3\text{N}_4$ và 5,75 lần so với OVs-TiO_2 . Tốc độ sản xuất H_2 đối với OVs-TCN10 bằng $150 \mu\text{mol h}^{-1}$ và AQY bằng 15,4% dưới ánh sáng có bước sóng 420 nm. Các giá trị này cao hơn khoảng 9 và 3 lần so với các đơn chất OVs-TiO_2 và $\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Bằng cách kết hợp phân tích các kết quả thực nghiệm và tính toán DFT, vai trò của OVs , tâm tạp Fe^{3+} đến sự tăng cường hiệu suất quang xúc tác của các vật liệu đã được làm rõ. Quá trình truyền điện tích trên các lớp cấu trúc dị thể đã được nghiên cứu. Các cơ chế quang xúc tác của các hệ vật liệu đã được xây dựng. Độ ổn định và khả năng tái sử dụng của các vật liệu quang xúc tác đã được đánh giá.

Đóng góp mới của luận án

- Đã xây dựng và tối ưu quy trình tổng hợp các vật liệu quang xúc tác mới ($\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$) với kiểm soát hiệu quả nồng độ tạp Fe^{3+} và khuyết oxy, làm rõ vai trò của chúng trong điều chỉnh cấu trúc và tăng cường hoạt tính quang xúc tác.
- Phát hiện vai trò trung tâm hoạt tính của Fe^{3+} trong việc hình thành các mức năng lượng mới, thúc đẩy quá trình tách và truyền điện tử, làm giảm tái hợp $e^- - h^+$, từ đó nâng cao hiệu suất quang xúc tác trong phân hủy chất ô nhiễm hữu cơ và sản sinh hydro.
- Lần đầu tiên thiết lập thành công hệ chuyển tiếp dị thể S-scheme trên nền vật liệu pha tạp Fe^{3+} và khuyết oxy, chứng minh hiệu quả vượt trội trong ứng dụng photo-Fenton xử lý ô nhiễm hữu cơ và sản xuất năng lượng xanh.
- Kết hợp thực nghiệm và tính toán DFT để làm rõ cơ chế truyền tải điện tích, xây dựng sơ đồ cơ chế quang xúc tác phù hợp cho từng hệ vật liệu.

Kết luận

- Đã nghiên cứu và tìm ra quy trình chế tạo thành công các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
 - Tạp chất Fe^{3+} gây ra hiện tượng giãn mạng, mở rộng, dịch chuyển các mode Raman đặc trưng của TiO_2 và tăng cường quá trình chuyển pha TiO_2 từ anatase thành rutile ở ngay điều kiện nhiệt độ thấp. Sau 120 phút chiếu ánh sáng khả kiến, các kết quả khảo sát đã chỉ ra mẫu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$ 4 %mol Fe^{3+} cho hiệu suất phân hủy RhB cao nhất, đạt 58,80%, cao hơn mẫu TiO_2 không pha tạp 1,78 lần.
 - Tạp chất Fe^{3+} làm giảm các thông số hằng số mạng, khiến các mode Raman bị mở rộng và khiến mật độ dòng quang điện của SnO_2 tăng đáng kể; tạo các mức năng lượng mới trong vùng cấm của SnO_2 . Sau 120 phút chiếu ánh sáng UV, mẫu $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$ 6 %mol Fe^{3+} cho hiệu suất phân hủy CIP cao nhất, đạt 98,23%, cao hơn mẫu SnO_2 không pha tạp 4,79 lần.
 - Tạp chất Fe^{3+} làm tăng tỷ lệ hàm lượng thành phần pha SnO_2 so với TiO_2 trong các mẫu TFS-X; làm giảm năng lượng vùng cấm quang. Với sự có mặt của H_2O_2 , hoạt tính xúc tác photo-Fenton đặc biệt của $\text{Fe-TiO}_2/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ đã được thể hiện đối với quá trình phân hủy RhB dưới ánh sáng khả kiến. Mẫu TFS-7 có hiệu suất loại bỏ RhB cao nhất, đạt 95,5% trong 180 phút với hằng số tốc độ phản ứng của mẫu TFS-7 xác định bằng $17,03 \times 10^{-3} \text{ phút}^{-1}$, cao hơn 8,4 lần so với $\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và 2,1 lần so với TF-7.
 - Nồng độ OVAs trong chuyển tiếp dị thể OVs-TCN có thể điều khiển được bằng việc thay đổi tỷ lệ khối lượng giữa $\text{g-C}_3\text{N}_4$ và TiO_2 . Hiệu suất quang xúc tác phân hủy RhB của OVs-TCN10 đạt 97,2%, với hằng số tốc độ biểu kiến là $0,021 \text{ phút}^{-1}$, cao hơn 12,17 lần so với $\text{g-C}_3\text{N}_4$ và 5,75 lần so với OVs-TiO_2 . Đáng chú ý, trong sản xuất H_2 khi sử dụng OVs-TCN10 đạt được tốc độ $150 \mu\text{mol h}^{-1}$ và AQY bằng 15,4% dưới ánh sáng có bước sóng 420 nm.
12. Các hướng nghiên cứu tiếp theo:
- Sử dụng vật liệu đã chế tạo được nghiên cứu thử nghiệm hiệu quả của hệ S-scheme Ternary. Hệ S-scheme ternary là cấu trúc dị thể ba thành phần với cấu trúc vùng năng lượng được thiết kế so le nhau nhằm tạo ra hiệu quả gấp đôi về khả năng oxy hóa khử của vật liệu cấu trúc dị thể.
 - Kết hợp vật liệu SnO_2 , TiO_2 đã chế tạo được với các vật liệu khác để nghiên cứu ứng dụng pin Zinc-Air và siêu tụ điện.
13. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

Danh mục công bố trên tạp chí quốc tế uy tín

- Trinh Thi Loan, **Vu Hoang Huong**, Nguyen Thi Huyen, Lai Van Quyet, Ngac An Bang, Nguyen Ngoc Long, (2021), "Anatase to rutile phase transformation of iron-doped titanium dioxide nanoparticles: The role of iron content", *Optical Materials*, (111), pp. 110651, (*IF* =3.8)
- **Vu Hoang Huong**, Van-Can Nguyen, Minh Ngoc Ha, Pham Van Duy, Nguyen Thanh Binh, Yuan-Ron Ma, Ngac An Bang, Trinh Thi Loan, (2023)"A S-scheme heterojunction Fe-doped $\text{TiO}_2/\text{SnO}_2$ with rich oxygen vacancies for

- photo-Fenton degradation of Rhodamine B under visible light illumination", *Optical Materials*, (140), pp. 113864, (IF =3.8)
- **Vu Hoang Huong** , Trinh Thi Loan , Khanh-Phong Pham , Minh Ngoc Ha , Quang Hoa Nguyen , Yuan-Ron Ma , An Bang Ngac , Van-Can Nguyen, (2024), "Unveiling the Synergistic Interplay of Appropriate Oxygen Vacancies and S-scheme Heterojunction Structures in OVs-TiO₂/g-C₃N₄ catalyst for Efficient RhB Photodegradation and H₂ Production", *Journal of Alloys and Compounds*, (972), pp. 172722, (IF =5.8)
 - **Vu Hoang Huong**, Van-Can Nguyen, Khanh-Phong Pham, Thanh Binh Nguyen, An Bang Ngac, Trinh Thi Loan, (2024),"Construction dual active sites on SnO₂ via Fe doping for effective Ciprofloxacin photodegradation", *Journal of Alloys and Compounds*, (1005), pp. 176020, (IF =5.8)

Danh mục công bố trên tạp chí quốc gia

- **Vu Hoang Huong**, Nguyen Thanh Binh, Trinh Thi Loan, Ngac An Bang, *Oxygen vacancy related luminescence properties of SnO₂ nanorods and nanoparticles*, *Advances in Optics, Photonics, Spectroscopy & Applications XII*, ISBN: 978-604-357-120.
- **Vu Hoang Huong**, Trinh Thi Loan, A Comparison Study of Photocatalytic Performance of TiO₂ Anatase Phase Prepared from Different Procedures, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics*, Vol. 40, No. 3 (2024) 1-10.

TM. Tập thể hướng dẫn
(Ký và ghi rõ họ tên)

PGS.TS. Trịnh Thị Loan

Hà Nội, ngày 06 tháng 06 năm 2025
Nghiên cứu sinh
(Ký và ghi rõ họ tên)

Vũ Hoàng Hương

INFORMATION ON DOCTORAL THESIS

1. Full name: Vu Hoang Huong
2. Sex: Male
3. Date of birth: 06/08/1990
4. Place of birth: Hai Phong City
5. Admission decision number : 2251/QĐ-ĐHKHTN dated July 19, 2019, issued by the Rector of University of Science, Vietnam National University, Hanoi
6. Changes in academic process:
 - Extension by Decision No. 151/QĐ-ĐHKHTN
 - Extension by Decision No. 1073/QĐ-ĐHKHTN
 - Adjustment of training duration by Decision No. 4955/QĐ-ĐHKHTN
 - Extension by Decision No. 4828/QĐ-ĐHKHTN
7. Official thesis title: Fabrication and investigation of properties of Fe-doped TiO₂, SnO₂ photocatalysts and related heterostructures
8. Major: Solid State Physics
9. Code: 9440130.02
10. Supervisors:
 - Assoc. Prof. Dr. Ngac An Bang – University of Science, Vietnam National University, Hanoi
 - Assoc. Prof. Dr. Trinh Thi Loan – University of Science, Vietnam National University, Hanoi
11. Summary of the new findings of the thesis:
 - Developed and optimized synthesis protocols for new photocatalytic materials (TiO₂:Fe³⁺, SnO₂:Fe³⁺, TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OVs và OVs-TiO₂/g-C₃N₄) with effective control over Fe³⁺ doping concentration and oxygen vacancy content, thereby clarifying their roles in structural modulation and enhancement of photocatalytic activity.
 - Identified the pivotal role of Fe³⁺ as an active center in generating new energy levels, promoting charge separation and transfer, reducing e⁻-h⁺ recombination, and consequently improving photocatalytic efficiency for organic pollutant degradation and hydrogen evolution.
 - Established, for the first time, S-scheme heterojunction systems based on Fe³⁺-doped and oxygen-vacancy-enriched materials, demonstrating outstanding

performance in photo-Fenton applications for organic pollutant removal and green energy production.

- Combined experimental investigations with DFT calculations to elucidate the charge transfer mechanisms, constructing appropriate photocatalytic mechanism diagrams for each material system.

12. Further research directions:

- The synthesized materials have been utilized to experimentally evaluate the effectiveness of the S-scheme ternary system. The S-scheme ternary system is a heterojunction structure composed of three components, in which the energy band alignment is designed in a staggered manner to achieve a synergistic enhancement—doubling the redox capability of the heterostructured material.
- The synthesized SnO₂ and TiO₂ materials have been combined with other materials to investigate their potential applications in zinc–air batteries and supercapacitors.

13. Thesis-related publications

- Trinh Thi Loan, **Vu Hoang Huong**, Nguyen Thi Huyen, Lai Van Quyet, Ngac An Bang, Nguyen Ngoc Long, (2021), "Anatase to rutile phase transformation of iron-doped titanium dioxide nanoparticles: The role of iron content", *Optical Materials*, (111), pp. 110651, (*IF* =3.8)
- **Vu Hoang Huong**, Van-Can Nguyen, Minh Ngoc Ha, Pham Van Duy, Nguyen Thanh Binh, Yuan-Ron Ma, Ngac An Bang, Trinh Thi Loan, (2023)"A S-scheme heterojunction Fe-doped TiO₂/SnO₂ with rich oxygen vacancies for photo-Fenton degradation of Rhodamine B under visible light illumination", *Optical Materials*, (140), pp. 113864, (*IF* =3.8)
- **Vu Hoang Huong**, Trinh Thi Loan, Khanh-Phong Pham, Minh Ngoc Ha, Quang Hoa Nguyen, Yuan-Ron Ma, An Bang Ngac, Van-Can Nguyen, (2024), "Unveiling the Synergistic Interplay of Appropriate Oxygen Vacancies and S-scheme Heterojunction Structures in OVs-TiO₂/g-C₃N₄ catalyst for Efficient RhB Photodegradation and H₂ Production", *Journal of Alloys and Compounds*, (972), pp. 172722, (*IF* =5.8)
- **Vu Hoang Huong**, Van-Can Nguyen, Khanh-Phong Pham, Thanh Binh Nguyen, An Bang Ngac, Trinh Thi Loan, (2024),"Construction dual active sites on

SnO₂ via Fe doping for effective Ciprofloxacin photodegradation", *Journal of Alloys and Compounds*, (1005), pp. 176020, (IF =5.8)

- **Vu Hoang Huong**, Nguyen Thanh Binh, Trinh Thi Loan, Ngac An Bang, *Oxygen vacancy related luminescence properties of SnO₂ nanorods and nanoparticles*, *Advances in Optics, Photonics, Spectroscopy & Applications XII*, ISBN: 978-604-357-120.
- **Vu Hoang Huong**, Trinh Thi Loan, A Comparison Study of Photocatalytic Performance of TiO₂ Anatase Phase Prepared from Different Procedures, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics*, Vol. 40, No. 3 (2024) 1-10.

Date: 06 June 2025

On behalf of academic supervisors

PhD. Student

Assoc. Prof. Trinh Thi Loan

Vu Hoang Huong