

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

VŨ HOÀNG HƯƠNG

CHÉ TẠO VÀ NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT CỦA VẬT LIỆU
QUANG XỨC TÁC TiO_2 , SnO_2 PHA TẠP Fe VÀ CẤU TRÚC
DỊ THỂ LIÊN QUAN

Chuyên ngành: Vật lý Chất rắn

Mã số: 9440130.02

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIÊN SĨ VẬT LÝ

Hà Nội - 2025

Công trình được hoàn thành tại: Khoa Vật Lý, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội

Người hướng dẫn khoa học:

1. PGS. TS. Ngọc An Bang
2. PGS.TS. Trịnh Thị Loan

Phản biện: GS. TS. Lê Anh Tuấn
Trường Đại Học Phenikaa.

Phản biện: PGS. TS. Đỗ Danh Bích
Trường Đại Học Sư Phạm Hà Nội.

Phản biện: PGS. TS. Lương Hữu Bắc
Trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội.

Luận án được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá luận án tiến sĩ họp tại Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - Đại học Quốc gia Hà Nội.

Vào hồi 08 giờ 30 phút ngày 28 tháng 07 năm 2025

Có thể tìm hiểu luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam;
- Trung tâm Thư Viện và Tri thức số, Đại học Quốc gia Hà Nội

MỞ ĐẦU

1. Lý do chọn đề tài

Ô nhiễm môi trường, đặc biệt là ô nhiễm nguồn nước, đã và đang trở thành vấn đề nghiêm trọng và cấp bách mà các quốc gia trên toàn thế giới phải đối mặt trong bối cảnh công nghiệp hóa và đô thị hóa phát triển mạnh mẽ [167]. Các hoạt động sản xuất và sinh hoạt của con người, đặc biệt các ngành công nghiệp dệt may, mỹ phẩm, chế biến thực phẩm đã và đang thải ra môi trường một lượng lớn các chất ô nhiễm, trong đó thuốc nhuộm màu và kháng sinh là hai nhóm chất điển hình. Trong các chất gây ô nhiễm môi trường, Rhodamine B (RhB) là chất đại diện cho thuốc nhuộm màu và kháng sinh Ciprofloxacin (CIP) phổ biến có mặt rộng rãi trong môi trường nước, đặc biệt là trong các nguồn nước thải từ công nghiệp và y tế [55, 59]. Các chất này gây ô nhiễm nguồn nước nghiêm trọng và có ảnh hưởng không tốt trực tiếp đến sức khỏe của con người và hệ sinh thái [59]. Vì vậy, việc phát triển và ứng dụng các phương pháp xử lý ô nhiễm hiệu quả, bền vững, thân thiện với môi trường là yêu cầu cấp thiết được đặt ra trong các nghiên cứu hiện nay.

Phương pháp quang xúc tác đang thu hút sự chú ý đặc biệt nhờ khả năng phân hủy các chất ô nhiễm dưới ánh sáng mặt trời, đồng thời hạn chế các tác động tiêu cực đến môi trường [21, 182]. Các vật liệu quang xúc tác bán dẫn như TiO_2 , SnO_2 đã được nghiên cứu rộng rãi trong các ứng dụng xử lý nước thải chứa thuốc nhuộm màu và các hợp chất hữu cơ khác. Tuy nhiên, do có độ rộng vùng cấm lớn nên khả năng quang xúc tác của TiO_2 và SnO_2 trong vùng ánh sáng khả kiến kém. Để khắc phục nhược điểm này, nhiều nghiên cứu đã tập trung vào việc pha tạp các kim loại chuyển tiếp, phi kim như Fe, Cu, Ag, N, S vào chúng

[79, 87]. Thêm vào đó, nút khuyết oxy (OVs) cũng gây được sự chú ý, vì nó có khả năng hình thành các trạng thái năng lượng mới nằm trong vùng cấm, hỗ trợ quá trình phân tách điện tử và lỗ trống, giúp tăng cường khả năng phân hủy các chất ô nhiễm trong môi trường nước [65]. Mặt khác, việc kết hợp TiO_2 và SnO_2 tạo cấu trúc dị thể đã chứng minh khả năng cải thiện hiệu quả phân hủy các chất ô nhiễm do sự truyền điện tích ở lớp tiếp xúc, giảm thiểu hiện tượng tái hợp của điện tử - lỗ trống ($e^- - h^+$) [50]. Bên cạnh đó, việc sử dụng tính toán lý thuyết hàm mật độ (DFT) có thể xây dựng cơ chế truyền điện tích trên chuyển tiếp dị thể giúp hiểu rõ được các cơ chế quang xúc tác của vật liệu [165].

Tại Việt Nam, vật liệu quang xúc tác đã được nhiều nhóm nghiên cứu thực hiện, chủ yếu tập trung vào việc chế tạo các vật liệu như ZnO , TiO_2 , $g\text{-C}_3\text{N}_4$, WO_3 ... ứng dụng trong xử lý phân hủy các loại chất hữu cơ làm ô nhiễm nguồn nước như phẩm màu hoặc các loại kháng sinh [57, 111, 141]. Phương pháp biến tính vật liệu như pha tạp kim loại và phi kim nhằm mở rộng vùng hấp thụ ánh sáng khả kiến cũng đã được quan tâm nghiên cứu. Tuy nhiên, các công trình nghiên cứu trong nước chủ yếu mới dừng lại ở mức khảo sát hoạt tính quang xúc tác cơ bản, hiệu suất còn hạn chế, ít chú trọng đến việc nghiên cứu cơ chế truyền điện tích cũng như ảnh hưởng của nút khuyết oxy. Đặc biệt, các nghiên cứu về hệ dị thể TiO_2 pha tạp Fe/SnO_2 và $\text{TiO}_2/g\text{-C}_3\text{N}_4$ còn rất ít và hầu như chưa có công trình nào kết hợp giữa thực nghiệm và tính toán lý thuyết hàm mật độ. Chính vì vậy, đề tài này có ý nghĩa thiết thực trong việc góp phần bổ sung khoảng trống nghiên cứu trong nước, đồng thời nâng cao năng lực ứng dụng vật liệu quang xúc tác vào xử lý ô nhiễm môi trường. Trên cơ sở đó, luận án lựa chọn đề tài “**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” nhằm góp phần bổ sung những khoảng trống nghiên cứu và nâng cao hiệu quả ứng dụng vật liệu quang xúc tác. Trong số các ion kim loại chuyển tiếp, Fe^{3+} là đối tượng thích hợp với các mạng nền TiO_2 và SnO_2 . Vì trong trường bán điện, bán kính ion hiệu dụng của Fe^{3+} (0,645 Å) gần với bán kính ion hiệu dụng của Ti^{4+} (0,605 Å) và Sn^{4+} (0,69 Å) nên Fe^{3+} dễ dàng thay thế các ion chủ trong tinh thể nền mà không gây biến dạng lớn [4, 150]. Mặt khác, lớp điện tử ngoài cùng được lấp đầy một nửa ($[\text{Ar}]3d^5$), tạp chất Fe^{3+} sẽ tạo ra các mức năng lượng mới trong vùng cấm giúp thu hẹp vùng cấm, mở rộng phạm vi hấp thụ ánh sáng vào vùng nhìn thấy của các mạng nền TiO_2 và SnO_2 . Điều này không chỉ tăng cường khả năng hấp thụ năng lượng từ ánh sáng mặt trời mà còn cải thiện hiệu quả phân tách các hạt tích điện, giảm thiểu hiện tượng tái hợp các cặp $e^- - h^+$. Để mở rộng, phát triển và tối ưu hóa nhằm tăng cường khả năng xử lý các chất ô nhiễm RhB hoặc CIP trong môi trường nước, các chuyển tiếp dị thể $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2\text{-OVs}$ và $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ với các nồng độ Fe^{3+} và hàm lượng $\text{g-C}_3\text{N}_4$ khác nhau đã được chế tạo. Các tính chất đặc trưng, khả năng quang xúc tác của chúng đã được khảo sát, đánh giá.

2. Mục tiêu nghiên cứu

Căn cứ vào tình hình nghiên cứu trong nước và trên thế giới, luận án đã được nghiên cứu với các mục tiêu sau:

- 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 $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Nghiên cứu 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 $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.

-Khảo sát khả năng quang xúc tác 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 sự phân hủy các chất ô nhiễm RhB hoặc CIP trong môi trường nước dưới sự kích thích của ánh sáng. Từ đó tìm các điều kiện tối ưu cho hiệu quả quang xúc tác tốt nhất đối với từng hệ mẫu.

3. Các kết quả chính và ý nghĩa khoa học, thực tiễn của luận án:

- 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 $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Ảnh hưởng của điều kiện chế tạo, nồng độ tạp chất Fe^{3+} đến các tính chất cấu trúc, hình thái học và tính chất quang 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 $\text{OVs-TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ đã được khảo sát, phân tích và thảo luận.
- Khả năng quang xúc tác 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 sự phân hủy các chất ô nhiễm RhB hoặc CIP trong môi trường nước đã được đánh giá. Các điều kiện tối ưu cho hiệu suất quang xúc tác tốt nhất đối với từng hệ mẫu đã được xác định. Bằng cách kết hợp phân tích các kết quả thực nghiệm và tính toán DFT, vai trò của OV, tâm tạp Fe^{3+} đến sự tăng cường hiệu suất quang xúc tác của các vật liệu đã được làm rõ.
- 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, ứng dụng tốt trong việc loại bỏ các chất gây ô nhiễm hữu cơ, mở ra một hướng nghiên cứu mới, chưa được khai thác ở Việt Nam cũng như trên thế giới. 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 SnO_2 -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 OVs- $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ 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 $\text{g-C}_3\text{N}_4$.

4. Tính mới của luận án

- Chế tạo thành công các hệ vật liệu mới gồm $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ -OVs và OVs- $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ với nồng độ Fe^{3+} và mật độ nút khuyết oxy (OVs) được điều khiển, tạo ra cấu trúc vật liệu có vùng tiếp xúc dị thể rõ ràng và giàu tâm hoạt tính.
- Xác định được vai trò của Fe^{3+} và OVs trong việc cải thiện tính chất quang, khả năng hấp thụ ánh sáng vùng khả kiến và nâng cao hiệu quả phân tách – chuyển tải điện tích, từ đó làm tăng đáng kể hiệu suất quang xúc tác phân hủy RhB và CIP.
- Làm rõ cơ chế quang xúc tác của các hệ dị thể, cho thấy quá trình truyền điện tích diễn ra theo cơ chế S-scheme, trong đó các nút khuyết oxy và tâm tạp Fe^{3+} đóng vai trò định hướng dòng điện tích tại bề mặt dị thể.
- Ghi nhận hiệu suất quang xúc tác cao vượt trội: hệ $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ -OVs đạt hằng số phân hủy RhB bằng $17,03 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$ (cao gấp

8,4 lần so với SnO₂-OVs); hệ OV_s-TiO₂/g-C₃N₄ vừa phân hủy RhB hiệu quả, vừa sinh H₂ với tốc độ 150 μmol/h, AQY 15,4%.

- Đề xuất hướng thiết kế vật liệu xúc tác quang mới, kết hợp dị thể và OV_s nhằm tối ưu hóa vùng tiếp xúc, tâm hoạt hóa và hiệu quả truyền điện tích – mở ra khả năng ứng dụng trong xử lý nước thải và sản xuất năng lượng sạch.

5. Cấu trúc của luận án

Luận án gồm 164 trang, gồm các phần chính: Phần Mở đầu (6 trang); Chương 1: Tổng quan về vật liệu TiO₂, SnO₂, g-C₃N₄ (24 trang); Chương 2: Các phương pháp thực nghiệm (11 trang); Chương 3: Tính chất và khả năng quang xúc tác của các mẫu TiO₂ và TiO₂:Fe³⁺ (17 trang); Chương 4: Tính chất và khả năng phân hủy chất kháng sinh cipro của các mẫu SnO₂:Fe³⁺ (24 trang); Chương 5: Tính chất và khả năng quang xúc tác của các chuyển tiếp dị thể TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OV_s và OV_s-TiO₂/g-C₃N₄ (48 trang); Phần Kết luận chung (1 trang); Danh mục các công trình công bố sử dụng trong luận án (1 trang), và tài liệu tham khảo (23 trang) gồm 182 tài liệu tham khảo. Luận án bao gồm 52 hình và 11 bảng số liệu.

CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN

Chương này trình bày ba phần chính, bao gồm:

- Các tính chất cơ bản về cấu trúc tinh thể, tính chất vật lý và cấu trúc vùng năng lượng của các vật liệu bán dẫn TiO₂, SnO₂ và g-C₃N₄.
- Cơ chế hoạt động quang xúc tác của các chất bán dẫn.
- Tổng quan các kết quả đã được nghiên cứu bởi các nhà khoa học về các vật liệu TiO₂:Fe³⁺, SnO₂:Fe³⁺, TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OV_s và OV_s-TiO₂/g-C₃N₄.

CHƯƠNG 2. THỰC NGHIỆM CHẾ TẠO MẪU VÀ KỸ THUẬT PHÂN TÍCH

Chương này trình bày 4 nội dung chính:

- Các quy trình chế tạo các vật liệu các vật liệu TiO_2 , SnO_2 cũng như các quy trình chế tạo các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ và $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Các phép đo thực nghiệm nghiên cứu tính chất đặc trưng của các vật liệu.
- Các hệ thiết kế dùng để khảo sát khả năng quang xúc tác cho các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ và $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Các mô hình cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái năng lượng của các vật liệu $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ và $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ sẽ được xác định qua lý thuyết hàm mật độ DFT nên phần mềm và các thông số tính toán cụ thể cho từng hệ vật liệu được nêu ra trong chương này.

CHƯƠNG 3. TÍNH CHẤT VÀ KHẢ NĂNG QUANG XÚC TÁC CỦA VẬT LIỆU $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$

Chương này trình bày và thảo luận các kết quả nghiên cứu về ảnh hưởng của các tiền chất, các quy trình chế tạo cũng như nồng độ tạp chất Fe^{3+} lên hình thái học, cấu trúc tinh thể, tính chất quang và khả năng quang xúc tác của các mẫu TiO_2 và $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$.

3.1. Tính chất và khả năng quang xúc tác của các mẫu TiO_2 chế tạo theo các quy trình và tiền chất khác nhau.

3.1.1. Hình thái học và tính chất cấu trúc của các mẫu TiO_2

Ảnh FESEM của mẫu S1 trình bày trên hình 3.1(a) cho thấy hình thái học của mẫu là các dây nano. Kích thước trung bình của các dây

nano của mẫu S1 xác định được khoảng 38,6 nm. Ảnh TEM của mẫu S2 và S3 trình bày lần lượt trên các hình 3.1(b) và 3.1(c) cho thấy rõ hình thái học của mẫu S2 và S3 là các hạt nano bất đối xứng. Kích thước các hạt nano của mẫu S3 nhỏ hơn so với mẫu S2. Kích thước hạt nano trung bình của mẫu S2 và S3 xác định được lần lượt là 12,8 nm và 13,7 nm.

3.1.2 Tính chất quang và tính chất quang điện của các mẫu TiO₂

Độ rộng vùng cấm quang với ứng với chuyển mức nghiêng và thẳng xác định được từ phổ phản xạ khuếch tán của các mẫu S1, S2, S3 lần lượt là 3,25 eV, 3,26 eV, 3,21 eV và 3,56 eV, 3,57 eV, 3,54 eV, tương ứng; tại bước sóng kích thích 300 nm, cường độ huỳnh quang của mẫu của mẫu S1 là lớn nhất, trong khi S2 và S3 tương tự nhau.

3.1.3. Hoạt tính và cơ chế quang xúc tác của các mẫu TiO₂

Sau 120 phút chiếu sáng, hiệu suất phân hủy RhB dưới ánh sáng khả kiến của các mẫu S1, S2 và S3 lần lượt là 17,40%, 17,93% và 33,04%. Phù hợp với các kết quả phân tích tính chất của các mẫu. Cơ chế quang xúc tác của mẫu S3 được trình bày chi tiết trong phần này.

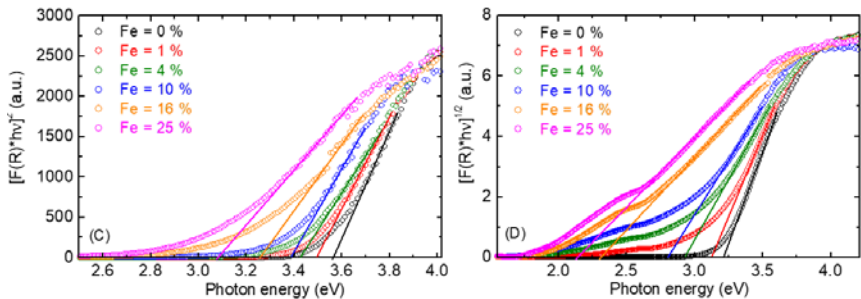
3.2. Tính chất và khả năng quang xúc tác của TiO₂:Fe³⁺

3.2.1. Tính chất cấu trúc và hình thái học của TiO₂:Fe³⁺

Hình 3.9. Giải đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu TiO₂ pha tạp chất Fe³⁺ với các nồng độ: (a)- 0 %mol, (b)- 1 %mol, (c)- 4 %mol, (d)- 8 %mol, (e)- 10 %mol, (f)- 16 %mol and (g)- 25 %mol.

Kết quả khảo sát XRD của các mẫu TiO_2 pha tạp Fe^{3+} với các nồng độ khác nhau trình bày trên hình 3.9 cho thấy: mẫu pha tạp chất Fe^{3+} với nồng độ 10 %mol là đơn pha anatase; với nồng độ tạp chất $\text{Fe}^{3+} \leq 8$ %mol, xuất hiện thêm một đỉnh nhiễu xạ rất yếu ở góc 2θ bằng $30,7^\circ$ ứng với mặt (121) của pha TiO_2 brookite; với mẫu pha tạp chất $\text{Fe}^{3+} 16$ %mol chỉ thấy rõ sự hiện diện của các đỉnh nhiễu xạ đặc trưng cho pha rutile. Đáng chú ý, đối với mẫu pha tạp chất Fe^{3+} lên tới 16 %mol, sự xuất hiện của các pha khác như Fe , Fe_2TiO_5 , FeTiO_3 , Fe_2O_3 và Fe_3O_4 vẫn không được quan sát thấy. Kết quả tính toán cho thấy thể tích ô cơ sở trung bình của các mẫu có xu hướng tăng khi nồng độ tạp chất Fe^{3+} tăng, chứng tỏ các ion Fe đã được kết hợp đúng cách vào và phân bố đều trong mạng TiO_2 .

3.2.2. Tính chất quang của $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$



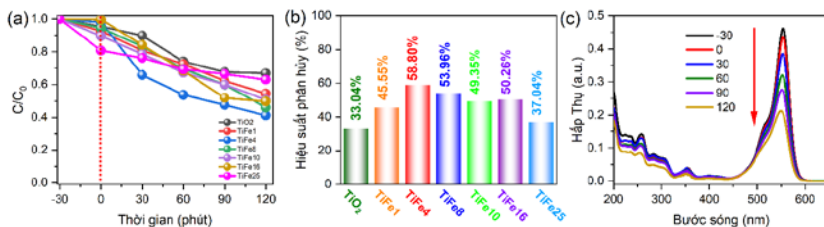
Hình 3.11. (a)- Phổ phản xạ khuếch tán của các mẫu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, (b)- Hàm Kubelka-Munk $F(R)$ xác định từ phổ phản xạ khuếch tán, (c) và (d)- Đồ thị của $[F(R).hv]^2$ và $[F(R)hv]^{1/2}$ theo năng lượng photon hv .

Hình 3.11 trình bày các phổ phản xạ khuếch tán, hàm Kubelka-Munk $F(R)$ và các đồ thị hàm $[F(R)hv]^2$, $[F(R)hv]^{1/2}$ theo hv xác định từ các phổ phản xạ khuếch tán của các hạt nano TiO_2 pha tạp Fe^{3+} với các nồng độ khác nhau. Độ rộng vùng cấm quang E_g xác định được của các

mẫu TiO_2 pha tạp Fe^{3+} với các nồng độ khác nhau được trình bày trong bảng 3.5. Kết quả cho thấy độ rộng vùng cấm quang trong trường hợp chuyển mức thẳng giảm từ 3,57 xuống 3,06 eV và trong trường hợp chuyển mức nghiêng giảm từ 3,21 xuống 2,14 eV khi nồng độ Fe^{3+} tăng từ 0 đến 25 mol.

3.2.3. Tính chất quang xúc tác của các mẫu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$

Hình 3.14 (a-b) trình bày hoạt tính và hiệu suất phân hủy RhB của các chất quang xúc tác $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$ với các nồng độ khác nhau dưới ánh sáng khả kiến. Sự cải thiện đáng kể trong khả năng quang xúc tác của vật liệu TiO_2 nhờ tạp chất Fe^{3+} đã được ghi nhận. Các ion tạp chất Fe^{3+} hoạt động như các tâm bẫy bắt giữ điện tử làm giảm tốc độ tái hợp điện tử-lỗ trống, từ đó kéo dài thời gian sống của các hạt tải và tăng cường hiệu quả quang xúc tác của vật liệu. Các kết quả khảo sát đã chỉ ra mẫu TiO_2 pha tạp Fe^{3+} với nồng độ 4 %mol cho hiệu suất phân hủy RhB cao nhất, cao hơn mẫu TiO_2 không pha tạp khoảng 1,78 lần.



Hình 3.14. Hoạt tính quang xúc tác (a), hiệu suất phân hủy RhB (b) của các mẫu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, phổ hấp thụ theo thời gian của RhB khi sử dụng mẫu 4 mol% Fe^{3+} (c).

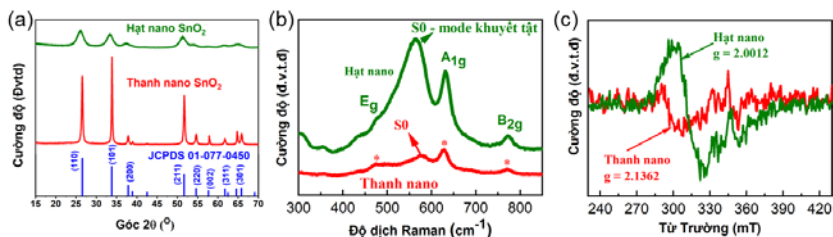
CHƯƠNG 4. TÍNH CHẤT VÀ KHẢ NĂNG QUANG XÚC TÁC CỦA VẬT LIỆU $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$

4.1. Ảnh hưởng của dung môi và điều kiện chế tạo lên hình thái học, tính chất cấu trúc và tính chất quang của vật liệu SnO_2

Trong phần này, bằng cách thay đổi lượng chất $\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ đầu vào cũng như thay đổi dung môi và điều kiện chế tạo, hai mẫu SnO_2 dạng hạt (hạt nano SnO_2) và dạng thanh (thanh nano SnO_2) đã được chế tạo

4.1.1. Hình thái học và cấu trúc tinh thể của vật liệu SnO_2

Các kết quả phân tích ảnh TEM và SEM cho thấy các hạt nano và các thanh nano SnO_2 lần lượt có đường kính trung bình lần lượt khoảng 6 nm và 65 đến 88 nm.



Hình 4.2. Giảm độ nhiễu xạ tia X (a), phổ Raman (b) phổ EPR (c) của các thanh và các hạt nano SnO_2 .

Các kết quả khảo sát giảm nhiễu xạ tia X và phổ Raman (hình 4.2(a)) cho thấy các hạt và các thanh nano SnO_2 đều có cấu trúc rutile. Trong đó, các hạt nano SnO_2 có độ kết tinh kém hơn, có nhiều sai hỏng hơn và có kích thước tinh thể nhỏ hơn so với các thanh nano SnO_2 . Sự tồn tại của các nút khuyết oxy trong các hạt nano và các thanh nano SnO_2 được đánh giá thông qua phép đo phổ cộng hưởng thuận từ điện tử EPR (hình 4.2).

4.1.2. Tính chất quang của vật liệu SnO₂

Hình 4.3. Đồ thị $(ah\nu)^2$ theo năng lượng photon (a), phổ huỳnh quang kích thích tại bước sóng 290 nm (b) và 350 nm (c) của các thanh và các hạt nano SnO₂.

Từ phổ hấp thụ, ứng với chuyển mức thẳng, độ rộng vùng cấm quang của các hạt và các thanh nano SnO₂ xác định được lần lượt là 3,62 eV và 3,77 eV. Hình 4.3 trình bày phổ huỳnh quang của các hạt và thanh nano SnO₂ kích thích tại bước sóng 290 nm và 350 nm.

4.2. Tính chất và khả năng phân hủy chất kháng sinh CIP của SnO₂:Fe³⁺

Dựa vào các kết quả trong mục 4.1, quy trình chế tạo các hạt nano SnO₂ đã được lựa chọn để chế tạo các mẫu SnO₂:Fe³⁺ với các nồng độ 1 %mol (SnFe1), 3 %mol (SnFe3) và 6 %mol (SnFe6). Trong phần này, ảnh hưởng của nồng độ tạp chất Fe³⁺ lên các tính chất hình thái học, cấu trúc, tính chất quang và khả năng quang xúc tác phân hủy chất kháng sinh Ciprofloxacin của các mẫu SnO₂:Fe³⁺ được phân tích và đánh giá.

4.2.1. Nghiên cứu cấu trúc và hình thái của hệ vật liệu SnO₂:Fe³⁺

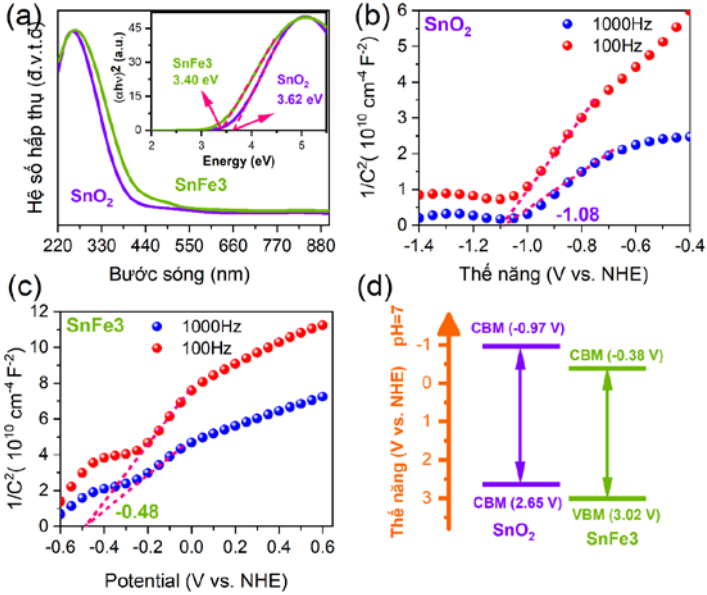
Giản đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu SnO₂, SnFe1, SnFe3 và SnFe6 trình bày trên hình 4.6a cho thấy tất cả các mẫu chế tạo được đều là đơn pha SnO₂ rutile. So với mẫu không pha tạp, trên phổ nhiễu xạ tia X của các mẫu pha tạp chất Fe³⁺ không thấy sự xuất hiện của bất cứ một đỉnh lạ nào. Hơn thế nữa, khi nồng độ tạp chất Fe³⁺ trong mẫu tăng,

cường độ các đỉnh nhiễu xạ giảm và bán độ rộng đỉnh tăng.

Hình 4.6. Ảnh TEM (a), Ảnh HRTEM (b) và ảnh SAED (c) của mẫu SnO₂; Ảnh TEM (d), ảnh HRTEM (e) và phóng to ảnh HRTEM (f) của mẫu SnFe₃.

Các ảnh TEM, HRTEM SAED của mẫu SnO₂; và các ảnh TEM, HRTEM, ảnh phóng to ảnh HRTEM của mẫu SnFe₃ được trình bày trên hình 4.8. Kích thước trung bình của các hạt nano trong mẫu SnO₂ và SnFe₃ xác định được lần lượt bằng 6 nm và 3,7 nm. Từ ảnh HRTEM, khoảng vân ứng với khoảng cách giữa các mặt phẳng mạng (110) của các mẫu SnO₂ và SnFe₃ lần lượt bằng 0,334 và 0,322 nm. Kết quả này chứng tỏ tạp chất Fe³⁺ làm giảm các thông số hằng số mạng của SnO₂:Fe³⁺. Đặc biệt hơn, sự rối loạn mạng tinh thể và các khuyết tật oxy trên bề mặt mẫu SnFe₃ đã được quan sát rõ nét dưới ảnh HRTEM. Rối loạn và các sai hỏng mạng quan sát được này cho thấy sự hiện diện của các nút khuyết oxy, do sự kết hợp của các ion Fe tạp trong mẫu SnFe₃ tạo ra.

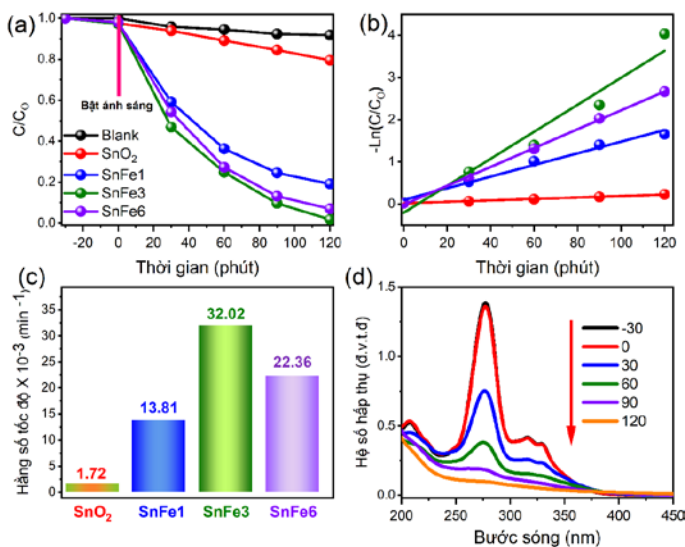
4.2.2. Tính chất quang và quang điện của hệ vật liệu SnO₂:Fe³⁺



Hình 4.10. (a) Phổ UV-vis DRS của SnO₂ và SnFe₃ (hình nhỏ kèm theo biểu đồ Tauc tương ứng, biểu diễn $(\alpha h\nu)^2$ với năng lượng $(h\nu)$); (b) Biểu đồ Mott-Schottky của SnO₂; (c) Biểu đồ Mott-Schottky của SnFe₃; and (d) cấu trúc vùng của SnO₂ và SnFe₃.

Hình 4.10 chỉ ra, độ rộng vùng cấm quang xác định được của các mẫu SnO₂ và SnFe₃ lần lượt bằng 3,62 eV và 3,40 eV. Từ độ dốc của đồ thị Mott-schottky, thế phẳng của SnO₂ và SnFe₃ được xác định lần lượt là -1,08 V và -0,48 V (so với điện cực hydro chuẩn, NHE, tại pH = 7). Thế năng vùng dẫn E_{CB} của SnO₂ và SnFe₃ được xác định lần lượt là -0,97 V và -0,38 V. Thế vùng hóa trị (E_{VB}) của SnO₂ và SnFe₃ được tính lần lượt là 2,65 V và 3,02 V.

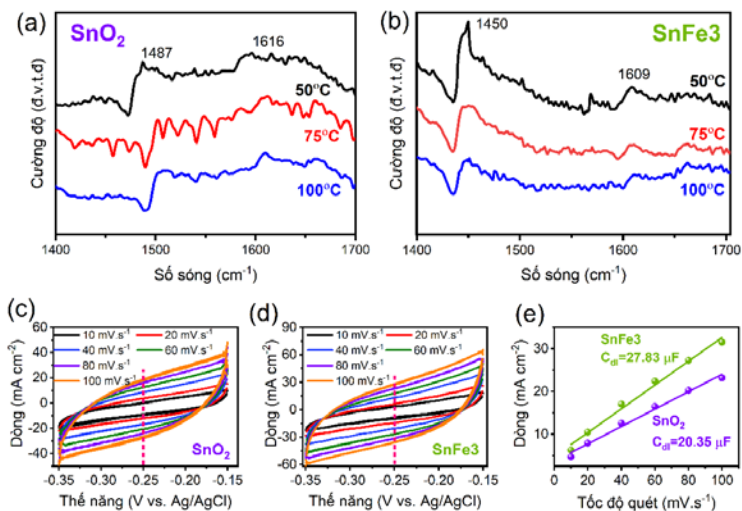
4.2.3. Hoạt tính quang xúc tác của hệ vật liệu SnO₂ pha tạp Fe³⁺



Hình 4.12. Hiệu quả phân hủy quang xúc tác CIP dưới sự chiếu xạ của ánh sáng khả kiến của hệ mẫu SnO₂:Fe³⁺; đồ thị $-\ln(C/C_0)$ phụ thuộc theo thời gian (b); hằng số tốc độ k của các mẫu SnO₂:Fe³⁺; phổ hấp thụ UV-Vis của dung dịch CIP trong quá trình phân hủy đối với chất xúc tác SnFe3.

Hiệu suất quang xúc tác của hệ mẫu SnO₂:Fe³⁺ được đánh giá qua việc phân hủy chất kháng sinh CIP dưới ánh sáng UV, ở pH = 7 và nhiệt độ 25 °C. Các kết quả thực nghiệm thu được được trình bày trên hình 4.12. Sau 120 phút chiếu sáng, hiệu suất phân hủy của các mẫu SnFe1, SnFe6 và SnFe3 lần lượt đạt 80,94%, 93,05% và 98,23%. Trong số các mẫu, SnFe3 có hằng số tốc độ phản ứng cao nhất, cao hơn SnO₂ khoảng 18,6 lần.

4.2.4. Các tâm hoạt tính



Hình 4.15. Phổ Py-FTIR của (a) SnO_2 và (b) SnFe_3 ; các chu trình CV ở các tốc độ quét khác nhau của (c) SnO_2 và (d) SnFe_3 ; (e) đồ thị tuyến tính dòng điện phụ thuộc vào tốc độ quét đối với các mẫu SnO_2 và SnFe_3 .

Tâm hoạt tính trên bề mặt chất xúc tác cải thiện hiệu suất xúc tác, việc chỉ ra sự tồn tại của tâm hoạt tính sẽ giúp có được những hiểu biết sâu sắc về cơ chế xúc tác. Kết quả khảo sát phổ hấp thụ pyridine (Py-FTIR) của SnO_2 cho thấy kết quả của sự tương tác giữa pyridine với các tâm hoạt tính axit Lewis, bao gồm các ion Sn^{4+} và các nút khuyết oxy (hình 4.15(a)). Các đỉnh hấp thụ pyridine của mẫu SnFe_3 có cường độ lớn hơn mẫu SnO_2 (hình 4.15(b)), chứng tỏ tạp chất Fe^{3+} trong mạng tinh thể SnO_2 đóng vai trò như một tâm hoạt tính, thúc đẩy sự hấp phụ và kích hoạt CIP, đồng thời cải thiện khả năng phân tách các hạt tải quang sinh trong mẫu SnFe_3 . Điện dung lớp kép điện hóa C_{dl} của SnO_2 và SnFe_3 xác định được từ phép đo chu trình CV lần lượt bằng 20,35 và 27,83 $\mu\text{F cm}^2$, thể hiện mật độ của các tâm hoạt tính trên SnFe_3 cao

hơn, nên hiệu suất phân hủy quang CIP của SnFe₃ cao hơn (hình 4.15(c-e)).

4.2.5. Cơ chế quang xúc tác phân hủy kháng sinh CIP

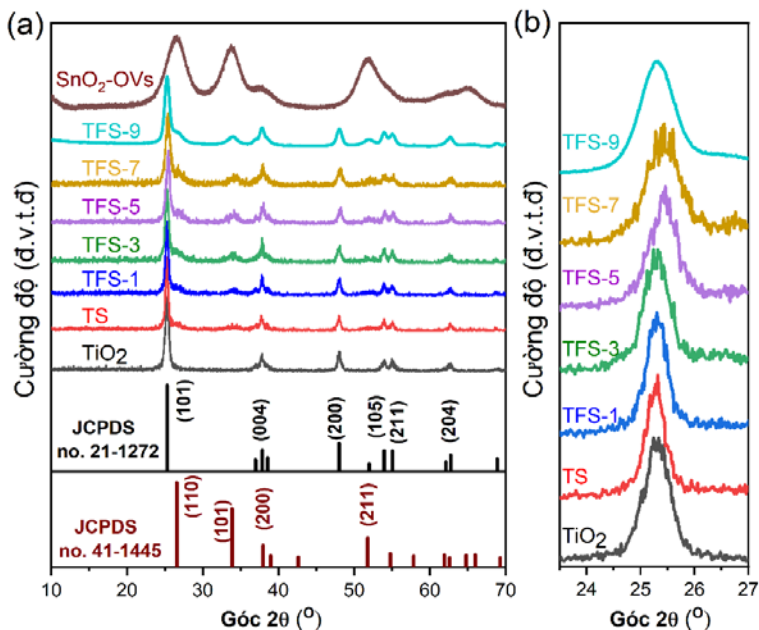
Để xác định các gốc tự do tham gia vào quá trình quang xúc tác phân hủy CIP, các thí nghiệm loại bỏ các gốc tự do •OH, h⁺ và •O₂⁻ lần lượt được thực hiện bằng cách sử dụng các chất axit iso-propanol (IPA), ethylenđiamin tetraacetic (EDTA-2Na) và benzoquinone (BQ) và phổ ESR phân tán trong nước đối với DMPO••OH và DMPO••O₂⁻ sau các khoảng thời gian chiếu sáng khác nhau đã được khảo sát. Các kết quả đều xác nhận rằng SnFe₃ thúc đẩy sự tạo thành gốc •OH và •O₂⁻ trong quá trình quang phân hủy CIP, với gốc •OH là tác nhân hoạt động chính.

CHƯƠNG 5. TÍNH CHẤT VÀ KHẢ NĂNG QUANG XÚC TÁC CỦA CÁC CHUYỂN TIẾP DỊ THỂ TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OVs VÀ OVSTiO₂/g-C₃N₄

5.1. Chuyển tiếp dị thể TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OVs

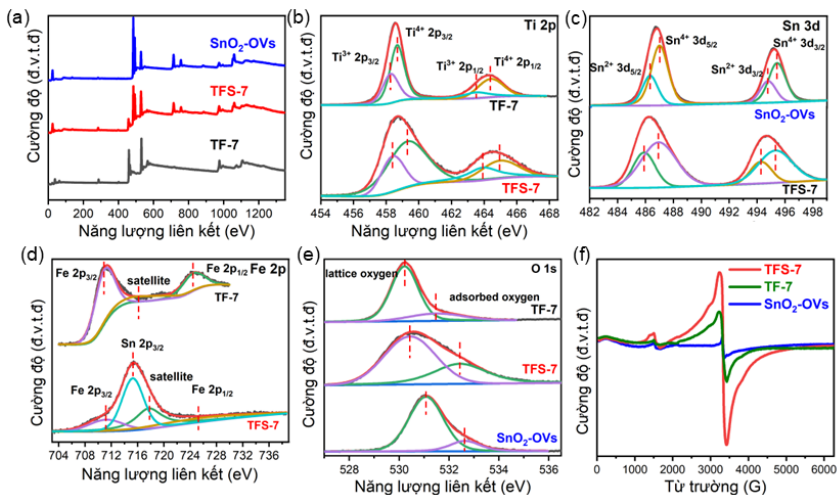
Với mục đích tăng cường hiệu suất quang xúc tác dưới ánh sáng khả kiến dựa trên các chất bán dẫn TiO₂ và SnO₂, vật liệu chuyển tiếp dị thể TiO₂:Fe/SnO₂-OVs (TFS-X) với các nồng độ tạp chất Fe³⁺ 0 %mol (TS), 1 %mol (TFS-1), 3%mol (TFS-3), 5 %mol (TFS-5), 7 %mol (TFS-7) và 9 %mol (TFS-9) đã được chế tạo theo quy trình được nêu trong mục 2.2.6 của chương 2.

5.1.1 Cấu trúc, hình thái học và tính chất hấp thụ của vật liệu TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OVs



Hình 5.1. (a) Giản đồ nhiễu xạ tia X của TiO_2 ; SnO_2 -OVs và TFS-X; (b) phóng to đỉnh nhiễu xạ (101) của TiO_2 và các mẫu TFS-X.

Hình 5.1(a) trình bày giản đồ nhiễu xạ tia X của các chuyển tiếp dị thể TFS-X với các nồng độ tạp chất Fe^{3+} khác nhau và các mẫu đơn chất TiO_2 , SnO_2 -OVs. Kết quả cho thấy trong các mẫu TFS-X chỉ bao gồm các pha TiO_2 anatase và SnO_2 rutile, với TiO_2 anatase là pha chiếm ưu thế. Hình thái học và cấu trúc vi mô của mẫu TFS-X, ảnh TEM và HR-TEM của một mẫu đại diện TFS-7 được khảo sát và trình bày trên hình 5.2. Do kích thước nhỏ (khoảng 4 nm), các hạt nano SnO_2 khó xác định được rõ ràng trên ảnh TEM. Tuy nhiên, ảnh HR-TEM đã cung cấp thông tin chi tiết về cấu trúc tinh thể và sự kết hợp giữa SnO_2 và $TiO_2:Fe^{3+}$. Phân tích mapping phổ tán xạ năng lượng tia X (EDS) trên một vùng cho thấy sự hiện diện đồng đều của các nguyên tố Ti, Fe, Sn và O trong mẫu TFS-7.



Hình 5.4. Phổ XPS tổng quát (a) và phổ phân giải cao của Ti 2p (b), Sn 3d (c), Fe 2p (d), O 1s, phổ EPR (f) của TF-7, SnO₂-OVs và TFS-7.

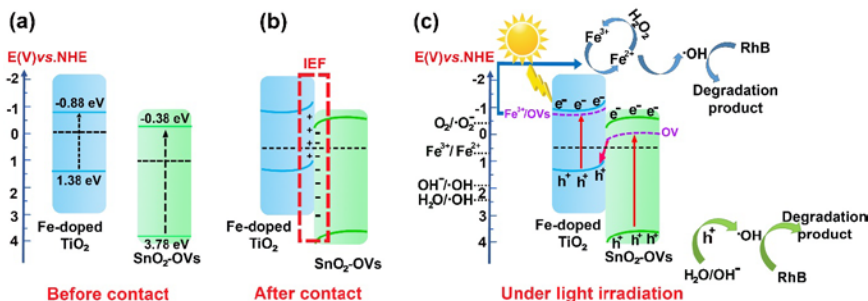
Các phổ XPS tổng quát, phân giải cao của Ti 2p, Sn 3d, Fe 2p và O 1s của TF-7, SnO₂-OVs và TFS-7 được trình bày trên hình 5.4 (a-e). Kết quả cho thấy trong các mẫu TF-7 và TFS-7 ngoài ion Ti⁴⁺, còn có các ion Ti³⁺; trong các mẫu SnO₂-OVs và TFS-7, ngoài ion Sn⁴⁺, còn có các ion Sn²⁺. Điều này chứng tỏ có sự xuất hiện các nút khuyết oxy trong các mẫu. Sự tồn tại của các ion Fe³⁺ trong các mẫu TF-7 và TFS-7 đã được ghi nhận.

5.1.2. Hoạt tính quang xúc tác của hệ vật liệu TiO₂:Fe³⁺/SnO₂-OVs

Trong phần này, phản ứng photo-Fenton được sử dụng để đánh giá hiệu quả hoạt tính quang xúc tác của vật liệu trong việc phân hủy các hợp chất hữu cơ. Để đạt được hiệu suất tối ưu trong phản ứng photo-Fenton, các nghiên cứu, đánh giá hệ thống các điều kiện phản ứng, giá trị pH và nồng độ H₂O₂ đã được thực hiện. Các điều kiện tối ưu trong phản ứng photo-Fenton của các mẫu được xác định là m_{TFS-7} = 25 mg, pH = 4,0 và nồng độ H₂O₂ bằng 12,5 mM (C_{H₂O₂} = 12,5 mM). Với

sự có mặt của H_2O_2 , hoạt tính xúc tác photo-Fenton đặc biệt của $Fe-TiO_2/SnO_2-OVs$ đã được thể hiện đối với quá trình phân hủy RhB dưới ánh sáng khả kiến.

5.1.3. Cơ chế hoạt động của chất quang xúc tác của vật liệu



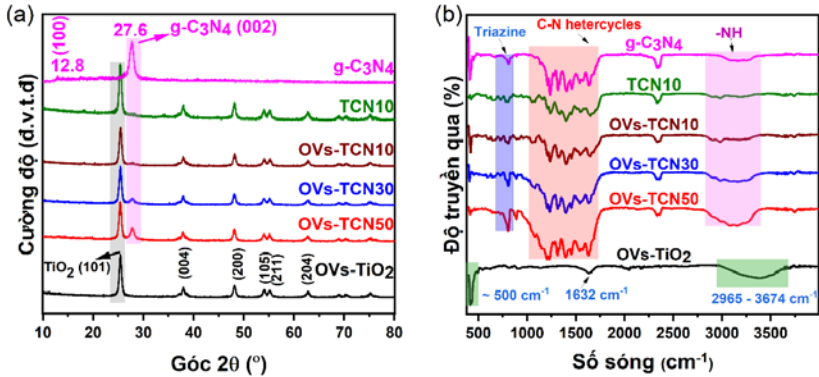
Hình 5.11. Cơ chế xúc tác quang Fenton được đề xuất cho quá trình phân hủy RhB trên chuyển tiếp dị thể TFS-7.

Các thí nghiệm loại bỏ các gốc tự do $\bullet OH$, h^+ và $\bullet O_2^-$ đã chỉ ra phản ứng photo-Fenton bao gồm cả ba loại gốc tự do $\bullet OH$, $\bullet O_2^-$ và h^+ , với tác nhân chính là $\bullet OH$. Thí nghiệm đầu dò huỳnh quang axit terephthalic (TA) cho thấy số lượng các gốc $\bullet OH$ được tạo ra trong phản ứng photo-Fenton tăng lên theo thời gian chiếu sáng. Hiện tượng truyền điện tích từ TF-7 sang SnO_2-OVs một lần nữa được hiển thị qua kết quả khảo sát phổ huỳnh quang và phổ huỳnh quang phân giải thời gian của mẫu TFS-7 và TF-7.

5.2. Chuyển tiếp dị thể $OVs -TiO_2/g-C_3N_4$

Phần này trình bày các tính chất đặc trưng cũng như khả năng quang xúc tác phân hủy RhB và sản xuất H_2 vượt trội của chuyển tiếp dị thể $OVs-TiO_2/g-C_3N_4$ ($OVs-TCN$).

5.2.1. Cấu trúc tinh thể và hình thái học của hệ vật liệu $OVs -TiO_2/g-C_3N_4$



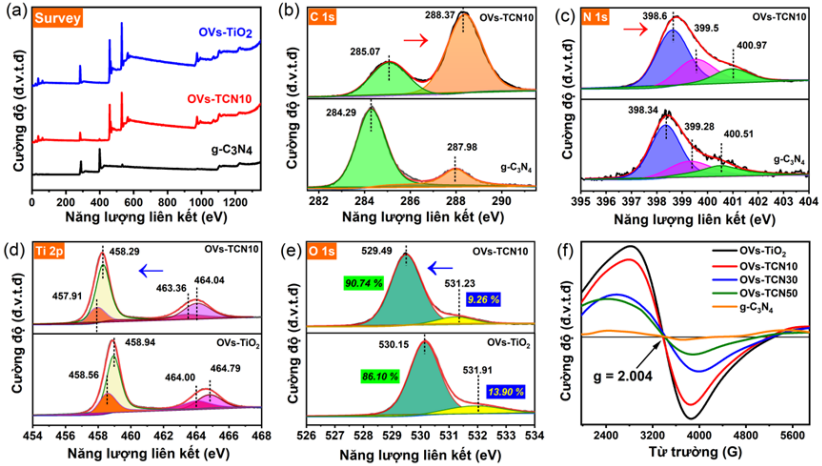
Hình 5.12: (a) Các mẫu nhiễu xạ XRD của g-C₃N₄, OV_s-TiO₂ và các dị thể (TCN10, OV_s-TCN10, OV_s-TCN30 và OV_s-TCN50).

Giản đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu OV_s-TCN với các tỷ lệ khối lượng của g-C₃N₄ và TiO₂ bằng 10% (OV_s-TCN10), 30% (OV_s-TCN30) và 50% (OV_s-TCN50) được khảo sát và trình bày trên hình 5.12(a). trên giản đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu chuyển tiếp dị thể OV_s-TiO₂/g-C₃N₄ chỉ có sự xuất hiện của các đỉnh nhiễu xạ đặc trưng của cả hai pha TiO₂ anatase và g-C₃N₄, không có đỉnh lạ nào được quan sát thấy. Đặc biệt, khi lượng g-C₃N₄ trong mẫu tăng, cường độ của đỉnh nhiễu xạ đặc trưng cho pha g-C₃N₄ ở 2θ = 27,6° tăng lên.

Các phổ XPS tổng quát của OV_s-TiO₂, g-C₃N₄, OV_s-TCN10 và XPS phân giải cao của C 1s, N 1s, Ti 2p và O 1s trình bày trên hình 5.14 (a-e) cho thấy các đỉnh C 1s và N 1s của mẫu OV_s-TCN10 có sự dịch về phía năng lượng cao hơn so với mẫu g-C₃N₄; còn các đỉnh Ti 2p và O 1s của mẫu OV_s-TCN10 lại có sự dịch về phía năng lượng thấp hơn so với mẫu OV_s-TiO₂. Điều này chỉ ra rằng sự truyền điện tích đã xảy ra từ chất bán dẫn g-C₃N₄ sang OV_s-TiO₂ tại mặt tiếp xúc giữa chúng, dẫn đến sự hình thành một trường điện nội, giúp tăng cường sự phân tách các điện tích quang sinh.

5.2.4. Cơ chế quang xúc tác phân hủy RhB của hệ OV_s-TiO₂/g-C₃N₄

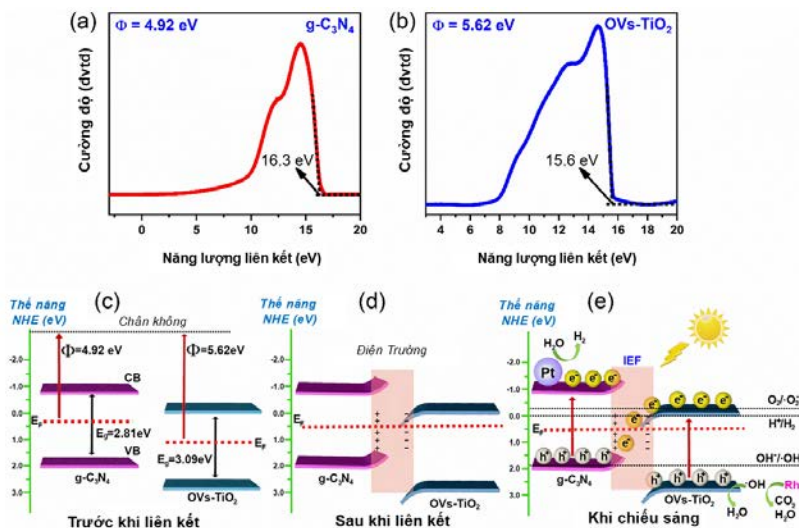
Các thí nghiệm bẫy các gốc tự do h^+ , $\bullet\text{OH}$, and $\bullet\text{O}_2^-$ và kỹ thuật cộng hưởng spin điện tử đối với chất xúc tác OV_s-TCN10 cho thấy $\bullet\text{OH}$ và $\bullet\text{O}_2^-$ là các gốc tự do hoạt động chính trong quá trình quang xúc tác phân hủy phẩm màu RhB.



Hình 5.14. (a) Phổ XPS tổng quát của OV_s-TiO₂, g-C₃N₄ và OV_s-TCN10; XPS phân giải cao của (b) C 1s, (c) N 1s, (d) Ti 2p và (e) O 1s; (f) Phổ EPR của OV_s-TiO₂, g-C₃N₄ và các chuyển tiếp dị thể (OV_s-TCN10, OV_s-TCN30 và OV_s-TCN50).

Các tính toán DFT xác định các giá trị công thoát bề mặt Φ bằng 5,76 eV đối với OV_s-TiO₂ (101) và 4,23 eV đối với g-C₃N₄ (001), nghĩa là Fermi của g-C₃N₄ cao hơn mức Fermi của OV_s-TiO₂. Do đó, khi mặt tiếp xúc giữa g-C₃N₄ và OV_s-TiO₂ hình thành, sự truyền điện tích xảy ra từ g-C₃N₄ đến OV_s-TiO₂ cho đến khi các mức Fermi đạt đến trạng thái cân bằng. Điều này có thể do sự uốn cong xuống của các vùng hóa trị và vùng dẫn của OV_s-TiO₂ và sự uốn cong lên của các vùng của g-C₃N₄. Chuyển tiếp dị thể S-scheme đối với OV_s-TiO₂/g-

C_3N_4 được hình thành khi cho $g-C_3N_4$ tiếp xúc với $OVs-TiO_2$.



Hình 5.22. Cơ chế xúc quang được đề xuất cho quá trình phân hủy RhB trên chuyển tiếp dị thể $OVs-TiO_2/g-C_3N_4$.

Ảnh hưởng của các nút khuyết oxy đến sự truyền điện tích giữa các chất bán dẫn cũng được khảo sát ở đây. Sự khác biệt về mật độ điện tích trung bình dọc theo hướng z giữa hai mô hình chuyển tiếp dị thể: $OVs-TiO_2/g-C_3N_4$ và $TiO_2/g-C_3N_4$ đã được tính toán. Kết quả cho thấy cường độ đỉnh của cả sự tích điện tích và sự suy giảm điện tích tại giao diện của $OVs-TiO_2/g-C_3N_4$ được tăng cường đáng kể khi có các nút khuyết oxy. Điều này thể hiện các nút khuyết oxy tăng cường quá trình truyền điện tích giữa các lớp tiếp xúc và sự hình thành của điện trường nội trong các cấu trúc chuyển tiếp dị thể. Bằng sự kết hợp phân tích cấu trúc vùng năng lượng với các giá trị công thoát, cơ chế xúc quang được đề xuất cho quá trình phân hủy RhB trên chuyển tiếp dị thể $OVs-TiO_2/g-C_3N_4$.

KẾT LUẬN

- Đã nghiên cứu và tìm ra quy trình chế tạo thành công các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ và $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$.
- Ảnh hưởng của điều kiện chế tạo mẫu, nồng độ tạp chất Fe^{3+} đến các tính chất cấu trúc, hình thái học và tính chất quang các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ và $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ đã được khảo sát.
- Khả năng quang xúc tác của các vật liệu $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{SnO}_2:\text{Fe}^{3+}$, $\text{TiO}_2:\text{Fe}^{3+}/\text{SnO}_2$ và $\text{TiO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ qua sự phân hủy các chất ô nhiễm RhB hoặc CIP trong môi trường nước dưới sự kích thích của ánh sáng đã được đánh giá. Các điều kiện tối ưu cho hiệu quả quang xúc tác tốt nhất đối với từng hệ mẫu đã được xác định. Bằng cách kết hợp phân tích các kết quả thực nghiệm và tính toán lý thuyết hàm mật độ, vai trò của nút khuyết oxy, tâm tạp Fe^{3+} đến sự tăng cường hiệu suất quang xúc tác của các vật liệu đã được làm rõ. Cơ chế truyền điện tích trên chuyển tiếp dị thể đã được khảo sát. Từ đó, các cơ chế quang xúc tác của các hệ vật liệu đã được xây dựng. Bên cạnh đó, độ ổn định và khả năng tái sử dụng của chất xúc tác quang cũng đã được đánh giá.

DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH CÔNG BỐ

Danh mục công bố trên tạp chí quốc tế uy tín

- 1- 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)
- 2- **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)
- 3- **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 OV-S-TiO₂/g-C₃N₄ catalyst for Efficient RhB Photodegradation and H₂ Production", *Journal of Alloys and Compounds*, (972), pp. 172722, (*IF* =5.8)
- 4- **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

- 1- **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
- 2- **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