



Nghiên cứu động học quá trình hấp phụ Cd(II) bởi vật liệu than sinh học từ bã mía Investigation of the adsorption kinetic of Cd(II) from aqueous solution using biochar derived from sugarcane bagasse

Nguyễn Thị Phương Tú^{1,2}, Lê Nguyễn Trung Tín³, Dương Bích Ngọc^{1,2},
Lê Nguyễn Quang Tú^{1,2}, Phạm Nguyễn Kim Tuyến⁴, Đinh Văn Phúc^{1,2,*}

¹ Viện Khoa học liên ngành, trường Đại học Nguyễn Tất Thành, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

² Trung tâm Phát triển Công nghệ cao Đại học Nguyễn Tất Thành, Khu Công nghệ cao Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

³ Viện Môi trường và Tài nguyên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

⁴ Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, trường Đại học Sài Gòn, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

* Email: dvphuc@ntt.edu.vn

ARTICLE INFO

Received: 23/07/2026

Accepted: 15/09/2026

Published: 30/09/2026

Keywords:

Biochar; biosorption; Cd(II);
adsorption kinetic; sugarcane
bagasse.

ABSTRACT

In this report, adsorption kinetics of Cd(II) onto biochar derived from sugarcane bagasse from an aqueous solution were investigated using 3 kinetic models: pseudo-first-order, pseudo-second-order, and intraparticle diffusion. The obtained results show that the uptake of Cd(II) using biochar derived from sugarcane bagasse occurs in 4 stages: (i) bulk diffusion; (ii) surface process; (iii) intraparticle diffusion; and (iv): surface interaction. By comparing RMSE, χ^2 and R^2 values calculated via the least squares method and the Solver Add-in function in Excel software, the pseudo-second-order model gave the best fit with the experimental data with RMSE = 0.3877, $\chi^2 = 0.2790$ and $R^2 = 0.9918$. This study is useful in determining the possible pathways and mechanisms during the adsorption process

Giới thiệu chung

Sự phát triển mạnh mẽ của các ngành công nghiệp mạ điện, sản xuất pin, khai thác khoáng sản và luyện kim đã giải phóng một lượng lớn kim loại nặng độc hại vào hệ sinh thái nước [1-3]. Trong số các chất ô nhiễm vô cơ này, Cadmium Cd(II) được coi là một mối đe dọa nghiêm trọng đối với sức khỏe con người và sinh vật do tính chất không bị phân hủy sinh học, khả năng tích lũy sinh học cao qua chuỗi thức ăn và độc tính cấp tính lẫn mãn tính cực kỳ nghiêm trọng, gây suy thận, rối loạn chức năng gan, hủy hoại cấu trúc xương và các bệnh lý ung thư nguy hiểm [4-6]. Do đó, việc nghiên cứu các

giải pháp kỹ thuật hiệu quả nhằm loại bỏ Cd(II) khỏi nguồn nước bị ô nhiễm là một nhiệm vụ cấp thiết trong bảo vệ môi trường.

Để xử lý Cd(II), phương pháp hấp phụ nổi lên như một giải pháp ưu việt nhờ tính đơn giản trong vận hành, hiệu quả xử lý cao, chi phí đầu tư thấp và khả năng thu hồi kim loại nặng [7]. Hiệu quả của công nghệ này phụ thuộc chủ yếu vào đặc tính của vật liệu hấp phụ. Mặc dù than hoạt tính là lựa chọn thương mại phổ biến nhất, giá thành cao và hiệu suất chưa thực sự vượt trội đã hạn chế phạm vi ứng dụng ở quy mô công nghiệp, đưa than sinh học trở thành vật liệu thay thế giàu tiềm năng [8]. Xu hướng nghiên cứu đương đại tập trung mạnh mẽ

vào việc tận dụng các nguồn phế phụ phẩm nông nghiệp dồi dào như bã mía từ ngành công nghiệp sản xuất mía đường đem lại lợi ích kép về mặt môi trường và kinh tế [8,9]. Quá trình nhiệt phân bã mía diễn ra trong điều kiện thiếu hoặc không có oxy chuyển hóa cấu trúc lignocellulose mạch thẳng thành cấu trúc carbon vòng thơm có độ xốp phát triển, diện tích bề mặt lớn và mật độ nhóm chức phong phú chứa oxy [10].

Để thiết kế và vận hành hệ thống hấp phụ hiệu quả, việc thấu hiểu tường tận về động học hấp phụ là một yêu cầu bắt buộc, vì nó cung cấp thông tin cốt lõi về tốc độ phản ứng và các cơ chế cản trở truyền khối kiểm soát toàn bộ quá trình. Thông thường, các đánh giá động học truyền thống thường chỉ dừng lại ở việc kiểm tra độ phù hợp của các mô hình thông qua phương pháp tuyến tính hoá vốn tiềm ẩn nguy cơ làm biến dạng cấu trúc sai số thực nghiệm, vì phạm giả định phân phối chuẩn và dẫn đến những dự báo không chính xác về mặt hóa lý [11].

Để giải quyết khoảng trống nghiên cứu trên, nghiên cứu này tập trung vào việc áp dụng phương pháp tối ưu hóa phi tuyến tính trực tiếp thông qua công cụ Solver Add-in trong phần mềm Microsoft Excel kết hợp với bộ tiêu chí thống kê đa biến (R^2 , RMSE, χ^2) để khảo sát động học hấp phụ Cd^{2+} lên than sinh học từ bã mía nhằm triệt tiêu sai số lũy tiến và xác định chính xác các tham số động học. Ba mô hình động học tiêu chuẩn bao gồm giả bậc một (pseudo-first-order), giả bậc hai (pseudo-second-order) và khuếch tán nội hạt (intraparticle diffusion) được áp dụng đồng thời để phân tích dữ liệu thực nghiệm. Các kết quả nghiên cứu này đóng góp những hiểu biết sâu sắc về các giai đoạn truyền khối màng biên, khuếch tán mao quản và tương tác hóa học bề mặt, hỗ trợ đắc lực trong việc tối ưu hóa các tháp hấp phụ thực tế.

Thực nghiệm và phương pháp nghiên cứu

Chế tạo và đặc trưng hóa lý của vật liệu

Bã mía sau khi thu hoạch được rửa sạch bụi bẩn bằng nước máy. Sau đó, bã mía được cắt thành từng khúc nhỏ có kích thước khoảng 1 cm rồi sấy ở nhiệt độ 100 °C đến khi khô hoàn toàn. Bã mía đã được sấy khô đem nung trong điều kiện yếm khí ở nhiệt độ 700 °C trong 60 phút. Sau khi nung và để nguội đến nhiệt độ phòng, than bã mía được ngâm, rửa sạch và pH đạt khoảng trung tính. Sau đó than sẽ được chuyển vào các thiết bị thủy nhiệt chuyên dụng và thủy nhiệt trong điều kiện 180 °C, 6 giờ. Sản phẩm được lọc, rửa sạch và sấy ở nhiệt độ 100°C cho đến khi khô hoàn toàn. Cuối cùng, than bã mía sẽ được nghiền đến khi thu được bột mịn hoàn toàn và cho vào các lọ thủy tinh đậy kín để lưu trữ phục vụ cho quá trình thực nghiệm.

Các đặc trưng cấu trúc của than sinh học được đánh giá thông qua phương pháp kính hiển vi điện tử quét (SEM) kết hợp phổ tán sắc năng lượng tia X (EDX) để phân tích hình thái bề mặt và thành phần nguyên tố. Diện tích bề mặt cụ thể và cấu trúc lỗ xốp được xác định bằng phép đo đẳng nhiệt hấp phụ-giải hấp khí N_2 ở 77 K theo thuyết Brunauer-Emmett-Teller (BET). Sự tồn tại của các nhóm chức hóa học trên bề mặt than sinh học trước và sau khi hấp phụ được phân tích bằng quang phổ hồng ngoại biến đổi Fourier (FTIR) trong vùng số sóng từ 4000 đến 400 cm^{-1} .

Quy trình hấp phụ $Cd(II)$ và phương pháp nghiên cứu

Các thí nghiệm động học hấp phụ được tiến hành hệ thống trong các bình tam giác dung tích 100 mL. Một lượng than sinh học bã mía xác định (0,05 g) được bổ sung vào 50 mL dung dịch $Cd(II)$ có nồng độ ban đầu 50 mg/L. Giá trị pH của hệ phản ứng được điều chỉnh về giá trị tối ưu 7,0. Các bình phản ứng được đặt trong máy lắc ổn nhiệt và lắc đều với tốc độ 250 vòng/phút ở nhiệt độ phòng. Sau khoảng thời gian khảo sát từ 5 phút đến 4320 phút (72 giờ), các bình tương ứng được lấy ra khỏi máy lắc. Pha lỏng được tách nhanh khỏi chất hấp phụ bằng cách lọc qua giấy lọc. Nồng độ $Cd(II)$ còn dư trong dung dịch sau khi lọc được phân tích chính xác bằng máy quang phổ hấp thụ nguyên tử (AAS). Dung lượng hấp phụ tại thời điểm t (q_t , mg/g) được tính toán theo phương trình:

$$q_t = \frac{(C_0 - C_e) \times V}{m} \quad (1)$$

Trong đó: C_0 và C_e (mg/L) lần lượt là nồng độ $Cd(II)$ ban đầu và tại thời điểm khảo sát t ; V (L) là thể tích của dung dịch phản ứng; và m (g) là khối lượng của vật liệu than sinh học khô được sử dụng.

Các mô hình động học và hàm sai số phi tuyến

Để đánh giá bản chất động học và xác định giai đoạn quyết định tốc độ phản ứng, dữ liệu thực nghiệm q_t theo thời gian t được mô tả bằng ba mô hình toán học động học phi tuyến tính [12]:

✓ Mô hình giả bậc một (Pseudo-First-Order - PFO): Giả định tốc độ hấp phụ phụ thuộc tuyến tính vào số lượng vị trí hoạt tính còn trống trên bề mặt. Phương trình tích phân phi tuyến tính có dạng:

$$q_t = q_e \cdot (1 - e^{-k_1 t}) \quad (2)$$

✓ Mô hình giả bậc hai (Pseudo-Second-Order - PSO): Giả định bước khống chế tốc độ là hấp phụ hóa học, liên quan đến các lực liên kết hóa trị, trao đổi electron hoặc tương tác tĩnh điện giữa các cation kim loại và nhóm chức bề mặt. Phương trình tích phân phi tuyến tính có dạng:

$$q_t = \frac{k_2 \cdot q_e^2 \cdot t}{1 + k_2 \cdot q_e \cdot t} \quad (3)$$

✓ Mô hình khuếch tán nội hạt Weber-Morris (Intraparticle Diffusion - IPD): Được sử dụng để kiểm tra vai trò của quá trình khuếch tán mao quản bên trong hạt than đối với tốc độ hấp phụ. Phương trình có dạng:

$$q_t = k_{id} \cdot t^{1/2} + C \quad (4)$$

Trong các phương trình trên, q_e (mg/g) là dung lượng hấp phụ cân bằng lý thuyết; k_1 (1/phút) và k_2 (g/mg·phút) lần lượt là hằng số tốc độ giả bậc một và giả bậc hai; k_{id} (mg/g·phút^{1/2}) là hằng số tốc độ khuếch tán nội hạt; và C (mg/g) là hằng số liên quan đến ảnh hưởng của lớp màng biên.

Để tránh các sai lệch toán học do việc tuyến tính hóa các phương trình động học gây ra, các tham số động học (q_e , k_1 , k_2 , k_{id} , C) được tối ưu hóa trực tiếp thông qua công cụ Solver Add-in trong Microsoft Excel bằng cách cực tiểu hóa các hàm sai số thống kê phi tuyến tính bao gồm sai số căn trung bình bình phương (RMSE) và giá trị kiểm định Chi-bình phương phi tuyến (χ^2), đồng thời cực đại hóa hệ số tương quan (R^2):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (q_{exp,i} - q_{cal,i})^2}{\sum_{i=1}^n (q_{exp,i} - \overline{q_{exp}})^2} \quad (5)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n-f} \sum_{i=1}^n (q_{exp,i} - q_{cal,i})^2} \quad (6)$$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(q_{exp,i} - q_{cal,i})^2}{q_{cal,i}} \quad (7)$$

Trong đó: $q_{exp,i}$ là giá trị dung lượng hấp phụ thực nghiệm tại thời điểm i , $q_{cal,i}$ là giá trị dự báo từ mô hình động học tương ứng; $\overline{q_{exp}}$ là giá trị trung bình của dữ liệu thực nghiệm; n là số lượng điểm dữ liệu thực nghiệm và f là số lượng tham số tự do trong mô hình động học được hiệu chỉnh.

Kết quả và thảo luận

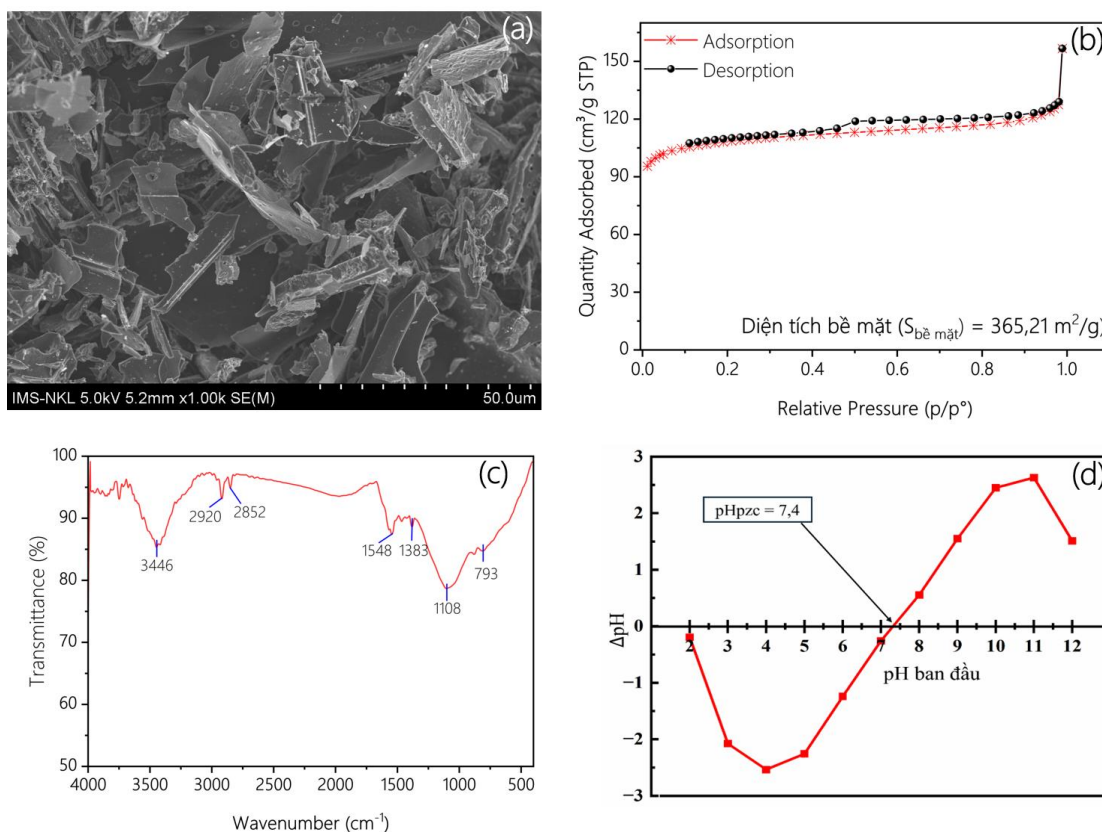
Đặc trưng hình thái và cấu trúc hóa lý của than sinh học bã mía

Ảnh SEM ở Hình 1a cho thấy than sinh học chế tạo từ bã mía có cấu trúc dạng mảnh, phiến vỡ với kích thước không đồng đều. Bề mặt xuất hiện các vết nứt, độ gồ ghề cao. Với bề mặt gồ ghề và nhiều góc cạnh này là một lợi thế lớn, giúp tăng diện tích tiếp xúc vật lý và tạo ra nhiều vị trí tâm hấp phụ, tạo điều kiện thuận lợi cho các ion Cd(II) dễ dàng thâm nhập vào sâu bên trong cấu

trúc nội hạt của vật liệu. Kết quả phân tích đẳng nhiệt hấp phụ N₂ ở Hình 1b cho thấy đường hấp phụ - giải hấp nitơ (N₂) có xu hướng tăng mạnh ở vùng áp suất tương đối thấp ($P/P_0 < 0.5$, sau đó đi ngang tạo thành một đường bằng phẳng kéo dài và tăng vọt ở vùng áp suất sát giới hạn ($P/P_0 \approx 1$). Đường cong này mang đặc tính tổng hợp của đường đẳng nhiệt loại I (Type I) theo phân loại của IUPAC, chứng tỏ vật liệu sở hữu hệ thống lỗ xốp vi mô (micropores) rất lớn [13]. Sự gia tăng ở vùng áp suất cao cũng gợi ý sự tồn tại của một số lỗ xốp trung bình (mesopores) hoặc lỗ xốp lớn do sự tích tụ giữa các hạt mảnh. Diện tích bề mặt riêng đạt giá trị khá cao ($S_{BET} = 365,21 \text{ m}^2/\text{g}$). Hình 1c là phổ FTIR của than sinh học bã mía xác nhận sự tồn tại của các nhóm chức đặc trưng của vật liệu. Đỉnh hấp thụ rộng ở vùng số sóng khoảng 3446 cm^{-1} đặc trưng cho dao động kéo giãn của nhóm hydroxyl (-OH); các đỉnh ở vùng 2920 cm^{-1} và 2852 cm^{-1} đặc trưng cho dao động kéo giãn đối xứng và bất đối xứng của liên kết C-H trong các nhóm aliphatic (-CH₂, -CH₃). Tại các vị trí 1548 , 1383 , 1108 và 793 cm^{-1} lần lượt là dao động của liên kết đôi C=C trong vòng thơm hoặc nhóm carboxylate, dao động của nhóm -COO⁻, dao động kéo giãn của liên kết -C-O (trong alcohol, ether hoặc acid) và dao động biến dạng ngoài mặt phẳng của -C-H vòng thơm [14-16]. Sự hiện diện của các nhóm chức đặc trưng tạo nên một bề mặt tích điện âm phân cực ở điều kiện pH thích hợp, đóng vai trò là các trung tâm phối trí hóa học để liên kết bền vững với ion Cd(II). Kết quả từ đồ thị Hình 1d cho thấy giá trị điểm điện tích không (pH_{pzc}) của than sinh học bã mía đạt 7,4. Trong nghiên cứu này, các thí nghiệm hấp phụ được tiến hành tại pH = 7.0. Giá trị này thấp hơn nhẹ so với pH_{pzc} và bề mặt vật liệu mang điện tích dương, chứng tỏ tương tác tĩnh điện sẽ không phải là tương tác chính thúc đẩy quá trình hấp phụ ion kim loại của than sinh học từ bã mía. Hơn nữa, việc duy trì pH = 7 giúp Cadmium tồn tại hoàn toàn ở dạng ion tự do Cd²⁺, đồng thời tránh được nguy cơ kết tủa Cd(OH)₂ khi pH vượt quá ngưỡng 7,5 – 8,0 [17], điều này hoàn toàn phù hợp với các kết quả công bố trước đây về pH tối ưu cho quá trình hấp phụ ion Cd²⁺ của than sinh học [18,19].

Động học hấp phụ và tối ưu hóa phi tuyến tính bằng công cụ Solver

Động học hấp phụ Cd(II) trên than sinh học bã mía được tiến hành phân tích chi tiết bằng cách so sánh mức độ tương thích của ba mô hình động học phi tuyến tính. Đồ thị của các mô hình động học này được thể hiện trên Hình 2a. Các kết quả tối ưu hóa trực tiếp thông qua công cụ Solver trong phần mềm Excel, sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu để tối thiểu hóa sai số hệ thống, được thể hiện rõ ràng trong Bảng 1.



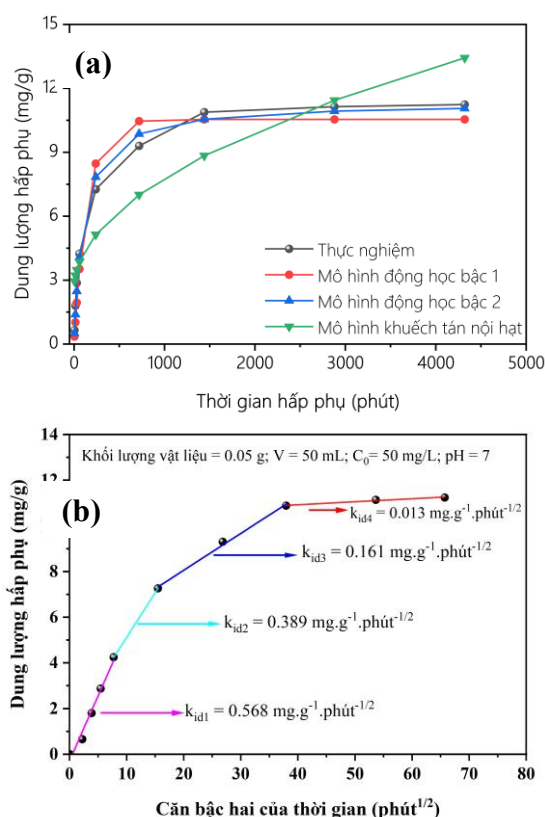
Hình 1: Kết quả phân tích đặc trưng của vật liệu than sinh học từ bã mía: Ảnh SEM (a); Đường hấp phụ - giải hấp N_2 (b); Phổ FT-IR (c) và điểm điện tích không (pH_{pzc}) (d)

Dựa trên các kết quả so sánh thống kê trong Bảng 1, mô hình giả bậc hai (PSO) thể hiện sự vượt trội hoàn toàn so với mô hình giả bậc một (PFO) và mô hình khuếch tán nội hạt (IPD) trong việc mô tả động học của hệ hấp phụ này. Hệ số xác định thu được cho mô hình giả bậc hai đạt giá trị lớn nhất ($R^2 = 0,9918$), đồng thời các chỉ số thống kê lỗi đạt mức tối thiểu rất thấp với $RMSE = 0,3877$ và $\chi^2 = 0,2790$. Ngược lại, mô hình giả bậc một cho thấy sự sai lệch với giá trị R^2 chỉ đạt 0,9600 với sai số $RMSE = 0,8543$ và $\chi^2 = 1,427$, phản ánh sự không tương thích của mô hình này đối với toàn bộ thời gian thực nghiệm. Sự phù hợp của mô hình giả bậc hai (PSO) với dữ liệu thực nghiệm cho phép dự đoán bước kiểm soát tốc độ của toàn bộ quá trình hấp phụ $Cd(II)$ lên than sinh học bã mía là cơ chế hấp phụ hóa học (chemisorption) [17]. Quá trình này liên quan đến các tương tác hóa học có chọn lọc cao thông qua việc chia sẻ electron hoặc liên kết lực tĩnh điện mạnh mẽ giữa ion $Cd(II)$ với các nhóm chức bề mặt hoạt động. Bên cạnh đó, giá trị dung lượng hấp phụ cân bằng tính toán từ mô hình giả bậc hai là 11,33 mg/g khớp rất sát với dữ liệu thực nghiệm là 11,25, cho phép dự báo chính xác khả năng hấp phụ của vật liệu ở điều kiện khảo sát. Hơn nữa, việc sử dụng hồi quy phi tuyến tính trực tiếp thông qua công cụ Solver trong Excel đã loại bỏ hoàn toàn các lỗi sai số toán học tích lũy vốn thường xảy ra khi chuyển

đổi phương trình giả bậc hai sang dạng tuyến tính truyền thống (ví dụ: dạng t/q_t theo t), đảm bảo các tham số động học thu được phản ánh đúng bản chất vật lý của hệ. Theo khuyến nghị từ các nghiên cứu động học hấp phụ hiện đại [11,12], việc chuyển đổi các mô hình động học sang dạng tuyến tính thường làm biến dạng cấu trúc phân phối sai số thực nghiệm. Do đó, nghiên cứu này áp dụng phương pháp tối ưu hóa phi tuyến tính trực tiếp bằng công cụ Solver để xác định các tham số động học trực tiếp trên miền dữ liệu gốc, đảm bảo tính khách quan và phản ánh trung thực bản chất truyền khối của hệ thống.

Cơ chế truyền khối qua bốn giai đoạn động học nối tiếp

Mặc dù mô hình giả bậc hai xác nhận vai trò quyết định của phản ứng hóa học bề mặt, nhưng quá trình động học tổng thể của một hệ dị thể lỏng - rắn luôn bị ảnh hưởng bởi các trở lực truyền khối vật lý. Khi áp dụng mô hình khuếch tán nội hạt Weber-Morris, kết quả biểu diễn đồ thị q_t theo $t^{1/2}$ không tạo thành một đường thẳng đi qua gốc tọa độ. Thay vào đó, đường cong thực nghiệm phân tách rõ rệt thành cấu trúc đa tuyến tính phức tạp. Phân tích chi tiết chỉ ra rằng quá trình hấp thu $Cd(II)$ bằng than sinh học bã mía diễn ra thông qua bốn giai đoạn truyền khối động học nối tiếp nhau (Hình 2b).



Hình 2: Đồ thị các mô hình động học phi tuyến (a) và đồ thị các giai đoạn động học của quá trình hấp phụ Cd(II) bởi than sinh học từ bã mía (b).

Bảng 1: Các tham số động học và các chỉ số thống kê lỗi phi tuyến tính tối ưu hóa bằng Solver cho quá trình hấp phụ Cd(II) trên than sinh học bã mía

Mô hình	Các thông số động học	
	C_0 (mg/L)	50,47
Động học giả bậc 1	Q_{max} (thực nghiệm)	11,25
	Q_e (mg/g)	10,54
	k_1 (1/phút)	0,0068
	RMSE	0,8543
	R^2	0,9600
	χ^2	1,427
Động học giả bậc 2	Q_e (mg/g)	11,33
	k_2 (g/(mg.phút))	0,00082
	RMSE	0,3877
	R^2	0,9918
	χ^2	0,279
Khuếch tán nội hạt	k_{id} (mg/(g.phút ^{1/2}))	0,1652
	k_{id1} (mg/(g.phút ^{1/2}))	0,568
	k_{id2} (mg/(g.phút ^{1/2}))	0,389
	k_{id3} (mg/(g.phút ^{1/2}))	0,161
	k_{id4} (mg/(g.phút ^{1/2}))	0,013
	C	2,577
	RMSE	1,8234
	R^2	0,8180
	χ^2	11,44

Thứ nhất, giai đoạn khuếch tán khối (Bulk diffusion): Đây là giai đoạn các ion Cd(II) tự do ngậm nước di chuyển từ pha lỏng đồng thể trong lòng dung dịch để đi đến lớp màng biên chất lỏng bao quanh các hạt than sinh học. Tốc độ truyền khối ở giai đoạn này diễn ra cực kỳ nhanh chóng trong thời gian 60 phút đầu, với hằng số tốc độ khuếch tán $k_{id1} = 0,568 \text{ mg/(g.phút}^{1/2})$.

Thứ hai, giai đoạn quá trình bề mặt (Surface process / Film diffusion): Tại giai đoạn này, các ion Cd(II) phải khắc phục lực cản và khuếch tán xuyên qua lớp màng biên chất lỏng tĩnh bao quanh hạt để tiếp cận bề mặt ngoài của chất hấp phụ. Tốc độ của quá trình này chịu ảnh hưởng lớn bởi độ dày màng chất lỏng, kích thước hạt than sinh học và tương tác tĩnh điện màng biên. Trở lực ở bước này thường thể hiện qua hằng số chặn $C \neq 0$ trong mô hình Weber-Morris; giá trị tính toán được $C = 2,5772$ cho thấy ảnh hưởng đáng kể của khuếch tán màng biên đối với tốc độ hấp phụ trong giai đoạn đầu phản ứng.

Thứ 3, giai đoạn khuếch tán nội hạt (Intraparticle diffusion): Sau khi bám dính vào bề mặt ngoài, các ion Cd(II) tiếp tục khuếch tán dọc theo thành mao quản hoặc qua pha lỏng vào bên trong hệ thống lỗ xốp mesopores và micropores của than sinh học. Trở lực không gian của thành mao quản hẹp kết hợp với lực ma sát chất lỏng làm tốc độ khuếch tán giảm đi rõ rệt so với giai đoạn màng ngoài. Giai đoạn này được biểu thị bởi đoạn tuyến tính thứ ba trên đồ thị Weber-Morris với hằng số tốc độ khuếch tán nội hạt tương đối thấp.

Cuối cùng là giai đoạn tương tác hóa học bề mặt (Surface interaction): Đây là bước động học cuối cùng khi các ion Cd(II) đã khuếch tán đến các vị trí hoạt tính nằm sâu trong lỗ xốp và thực hiện tương tác liên kết hóa học trực tiếp với các nhóm chức hóa học bề mặt thông qua các nhóm chức đặc trưng. Giai đoạn 4, đặc trưng cho giai đoạn tiến tới cân bằng hấp phụ. Tại thời điểm này, phần lớn các tâm hấp phụ trên bề mặt ngoài và bên trong cấu trúc xốp đã bị chiếm giữ hoàn toàn, biểu thị quá trình hấp phụ đã đạt trạng thái bão hòa với tốc độ hấp phụ chậm. Để đánh giá hiệu quả xử lý, dung lượng hấp phụ Cd²⁺ thực nghiệm của than sinh học bã mía trong nghiên cứu này ($q_{exp} = 11,25 \text{ mg/g}$) được so sánh với một số loại than sinh học nhiệt phân từ sinh khối nông nghiệp chưa biến tính đã được công bố: than bã mía của Haghighatjou và Shirvani (19,03 mg/g) [15], than thân cây ngô nhiệt phân ở 500°C của Zhao và cộng sự (39,94 mg/g) [14], than trấu của Chowdhury và Saha (19,36 mg/g) [11], và thấp hơn đáng kể so với các hệ vật liệu composite biến tính từ tính hoặc phủ polymer [4]. Kết quả so sánh này khẳng định than sinh học bã mía chế tạo bằng phương pháp nhiệt phân đơn giản sở hữu dung lượng hấp phụ kim loại nặng ở mức cạnh tranh, mở ra tiềm năng ứng dụng thực tiễn cao nhờ nguồn nguyên liệu sẵn có và chi phí thấp.

Kết luận

Nghiên cứu đã chứng minh than sinh học chế tạo từ phụ phẩm nông nghiệp bã mía là một vật liệu hấp phụ sinh học có hiệu năng cao và thân thiện với môi trường trong việc loại bỏ kim loại nặng Cd(II) khỏi dung dịch nước. Việc áp dụng phương pháp tối ưu hóa phi tuyến tính trực tiếp bằng công cụ Solver trong Excel đã xác định chính xác các tham số động học mà không gặp các sai số toán học lũy tiến. Kết quả thực nghiệm phù hợp tốt nhất với mô hình động học giả bậc hai (PSO) với hệ số tương quan đạt $R^2 = 0,9918$, sai số RMSE = 0,3877 và $\chi^2 = 0,2790$, khẳng định quá trình hấp phụ Cd(II) được kiểm soát bởi cơ chế hấp phụ hóa học thông qua các phản ứng tạo phức phối trí bề mặt, trao đổi ion với khoáng tro than và tương tác tĩnh điện. Dựa trên sự tương thích cao của mô hình động học giả bậc hai (PSO) cùng với các đặc trưng hóa lý bề mặt, cơ chế hấp phụ Cd(II) lên than sinh học bã mía được đề xuất diễn ra đồng thời qua các con đường tiềm năng (i) phản ứng tạo phức phối trí bề mặt giữa ion kim loại với các nhóm chức chứa oxy (hydroxyl, carboxyl); và (ii) khả năng trao đổi ion với các cation khoáng trong tro than. Các tương tác hóa học chuyên sâu này cung cấp cơ sở định hướng quan trọng để tiếp tục kiểm chứng định lượng bằng các kỹ thuật quang phổ phân giải cao trong các nghiên cứu tiếp theo.

Phân tích động học khuếch tán nội hạt bằng mô hình Weber-Morris làm sáng tỏ rằng quá trình hấp thu diễn ra nối tiếp qua bốn giai đoạn truyền khối vật lý và hóa học đặc trưng, bao gồm khuếch tán khối, truyền khối qua màng biên chất lỏng, khuếch tán mao quản nội hạt và tương tác liên kết tại các trung tâm hoạt tính. Việc tận dụng nguồn phế thải bã mía dồi dào để chế tạo vật liệu xử lý môi trường chất lượng cao không chỉ giải quyết vấn đề ô nhiễm chất thải rắn nông nghiệp mà còn mở ra một hướng đi bền vững, giá trị kinh tế cao, đóng góp thiết thực vào chiến lược phát triển kinh tế tuần hoàn xanh.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu được tài trợ bởi trường Đại học Nguyễn Tất Thành, Thành phố Hồ Chí Minh trong khuôn khổ đề tài mã số 2024.01.107/HĐ-KHCN.

Tài liệu tham khảo

1. A. Hamdy, M.K. Mostafa, M. Nasr, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 26(25) (2019) 25372–25387. <https://doi.org/10.1007/s11356-019-05850-3>
2. M. Nur-E-Alam, M.A.S. Mia, F. Ahmad, M.M. Rahman, *Appl. Water Sci.*, 10(9) (2020) 205. <https://doi.org/10.1007/s13201-020-01286-0>

3. W. Wei, R. Ma, Z. Sun, A. Zhou, J. Bu, X. Long, Y. Liu, *Int. J. Environ. Res. Public Health*, 15(9) (2018) 1987. <https://doi.org/10.3390/ijerph15091987>
4. H.M. Meena, S. Kukreti, *Inorg. Chem. Commun.*, 189 (2026) 116715. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2026.116715>
5. R. Khanam, A. Kumar, A.K. Nayak, M. Shahid, R. Tripathi, S. Vijayakumar, D. Bhaduri, U. Kumar, S. Mohanty, P. Panneerselvam, D. Chatterjee, B.S. Satapathy, H. Pathak, *Sci. Total Environ.*, 699 (2020) 134330. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.134330>
6. C.D. Klaassen, J. Liu, B.A. Diwan, *Toxicol. Appl. Pharmacol.*, 238(3) (2009) 215–220. <https://doi.org/10.1016/j.taap.2009.03.026>
7. R. Rashid, I. Shafiq, P. Akhter, M.J. Iqbal, M. Hussain, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 28(8) (2021) 9050–9066. <https://doi.org/10.1007/s11356-021-12395-x>
8. Y. Ren, H. Liu, R. Ma, J. Li, Y. Chen, *Carbon Lett.*, 36(6) (2026) 1223–1244. <https://doi.org/10.1007/s42823-026-01056-z>
9. J.O. Eniola, B. Sizirici, Y. Fseha, J.F. Shaheen, A.M. Aboulella, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 30(39) (2023) 88245–88265. <https://doi.org/10.1007/s11356-023-28399-8>
10. F. Moradi-Choghamarani, A.A. Moosavi, M. Baghernejad, J. *Therm. Anal. Calorim.*, 138(1) (2019) 331–344. <https://doi.org/10.1007/s10973-019-08186-9>
11. S. Chowdhury, P. Saha, *CLEAN – Soil, Air, Water*, 39(3) (2011) 274–282. <https://doi.org/10.1002/clen.201000170>
12. K.Y. Foo, B.H. Hameed, *Chem. Eng. J.*, 156(1) (2010) 2–10. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.09.013>
13. K. Sing, *Pure Appl. Chem.*, 54(11) (1982) 2201–2218. <https://doi.org/10.1351/pac198254112201>
14. L. Zhao, Y. Zha, W. Miao, B. Wang, Y. Han, J. Tang, *Front. Environ. Sci.*, 14 (2026) 1815592. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2026.1815592>
15. M. Haghghatjou, M. Shirvani, *Commun. Soil Sci. Plant Anal.*, 51(10) (2020) 1391–1406. <https://doi.org/10.1080/00103624.2020.1763383>
16. L. Ma, J. Ren, Z. Li, X. Pei, J. Liu, T. Zheng, B. Yang, Y. Liu, *SSRN Electron. J.*, (2025). <https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.5911822>
17. I.D. Smičiklas, S.K. Milonjić, P. Pfendt, S. Raičević, *Sep. Purif. Technol.*, 18(3) (2000) 185–194. [https://doi.org/10.1016/S1383-5866\(99\)00066-0](https://doi.org/10.1016/S1383-5866(99)00066-0)
18. H. Tran, S.-J. You, H.-P. Chao, *Waste Manage. Res.*, 34(2) (2016) 129–138. <https://doi.org/10.1177/0734242X15615698>
19. N. Hussain, S. Chantrapromma, T. Suwunwong, K. Phoungthong, *Mater. Res. Express*, 7(8) (2020) 085503. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/abae27>
20. M.M.A. Bakr, Y. Wang, P. Hao, M.M.A. Dawoud, L. Peng, Y. Wang, *Biomass Convers. Biorefin.*, 15(15) (2025) 19487–19501. <https://doi.org/10.1007/s13399-025-06594-6>