



Chế tạo biochar từ thân cây dừa với sự hỗ trợ của hydrochloric acid và đánh giá khả năng hấp phụ methyl red và ion đồng

Synthesis of hydrochloric acid-assisted coconut trunk biochar and evaluation of its adsorption capacity for methyl red and copper ions

Hồ Sỹ Thắng¹, Trần Quốc Trị¹, Lê Thị Thanh Xuân¹, Đặng Kim Tại¹, Phạm Minh Xuân¹, Trần Hoài Lam², Nguyễn Thị Lan Hương^{3,4}, Phan Trung Cang¹, Lý Huy Hoàng¹, Nguyễn Minh Thảo^{1*}

¹ Trường Đại học Đồng Tháp, 783 Phạm Hữu Lầu, Phường Cao Lãnh, tỉnh Đồng Tháp, Việt Nam

² Trường Đại học Công Thương Thành phố Hồ Chí Minh, 140 Lê Trọng Tấn, Phường Tân Thạnh, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

³ Trường Đại học Tài nguyên và Môi trường Thành phố Hồ Chí Minh, 236B Lê Văn Sỹ, Phường Tân Sơn Hòa, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

⁴ Viện Nghiên cứu ứng dụng, Tài nguyên thiên nhiên, Vật liệu và Môi trường, 58/4 Trần Văn Dư, Phường Tân Bình, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

* Email: nmthao@dthu.edu.vn

ARTICLE INFO

Received: 27/07/2026

Accepted: 30/09/2026

Published: 30/09/2026

Keywords:

Adsorption; Biochar;

Coconut tree; Copper; DFT;

Methyl red.

ABSTRACT

In this study, biochar derived from coconut tree biomass was successfully synthesized with the assistance of a hydrochloric acid solution. The structural and morphological characterizations of the material were obtained by X-ray diffraction, SEM, EDS, BJH, BET method. The prepared biochar exhibited a specific surface area of 166 m²/g and adsorption capacities of 41.63 mg/g for methyl red and 35.86 mg/g for Cu(II), demonstrating effective adsorption performance toward both organic and inorganic pollutants. The density functional theory calculations using the PBE functional and the def2-TZVP basis set were performed to simulate the molecular interactions between the biochar structure and the methyl red and copper ion. The results revealed that methyl red adsorption is mainly stabilized through hydrogen-bond interactions with surface hydroxyl groups, whereas Cu(II) adsorption involves coordination with oxygen-containing functional groups, resulting in stronger adsorption. The combined experimental and theoretical results provide molecular-level insights into the adsorption behavior of hydrochloric acid-assisted coconut trunk biochar and demonstrate its potential as a sustainable adsorbent for wastewater treatment.

Giới thiệu

Ô nhiễm nguồn nước đang trở thành một trong những thách thức nghiêm trọng nhất đối với môi trường toàn cầu, đặc biệt là sự hiện diện của các chất

hữu cơ độc hại và kim loại nặng phát sinh từ các hoạt động công nghiệp. Trong số đó, thuốc nhuộm azo như methyl red và các ion kim loại nặng như Cu²⁺ trong nước thải dệt nhuộm và xi mạ, gây ra những hệ lụy khôn lường cho hệ sinh thái thủy sinh cũng như sức

khỏe con người nếu không được xử lý triệt để. Trước thực trạng này, việc tìm kiếm các vật liệu xử lý nước có nguồn gốc tự nhiên, giá thành thấp và thân thiện với môi trường đang trở thành xu hướng nghiên cứu chủ đạo. Biochar là một sản phẩm giàu carbon thu được từ quá trình nhiệt phân sinh khối, đã chứng minh được tiềm năng vượt trội trong việc loại bỏ các chất ô nhiễm nhờ vào cấu trúc mao quản đặc trưng và các nhóm chức bề mặt đa dạng.

Tận dụng nguồn phụ phẩm nông nghiệp dồi dào, việc chuyển hóa thân cây dừa thành biochar không chỉ giúp giảm thiểu lượng chất thải rắn mà còn tạo ra một loại vật liệu hấp phụ có giá trị kinh tế cao [1-4]. Tuy nhiên, để tối ưu hóa hiệu quả xử lý và hiểu rõ bản chất của quá trình loại bỏ các tác nhân gây ô nhiễm, việc kết hợp giữa thực nghiệm và lý thuyết là vô cùng cần thiết. Nghiên cứu này không dừng lại ở việc đánh giá khả năng hấp phụ thông qua các thông số thực nghiệm mà còn đi sâu vào phân tích cơ chế ở cấp độ phân tử. Bằng cách ứng dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT – Density Functional Theory) [5], các tương tác tĩnh điện, liên kết hydro và sự thay đổi cấu trúc hình học khi các phân tử methyl red và ion đồng tiếp xúc với bề mặt biochar có thể được mô phỏng rõ ràng hơn. Những dữ liệu mô phỏng này cung cấp cái nhìn chi tiết về độ bền của liên kết và ái lực hấp phụ, từ đó làm nền tảng khoa học vững chắc cho việc ứng dụng vật liệu biochar từ thân cây dừa vào thực tiễn xử lý nước thải.

Thực nghiệm

Hóa chất

Các hóa chất được sử dụng gồm methyl red (Trung Quốc), HCl (Trung Quốc), dung dịch chuẩn Cu(II) 1000 mg/L (Merck, Đức) và nước cất.

Phương pháp

Quy trình nghiên cứu được triển khai theo bốn giai đoạn chính: (1) xử lý nguyên liệu thân cây dừa để chế tạo vật liệu biochar AC-L45; (2) phân tích đặc trưng vật liệu bằng các kỹ thuật XRD, SEM, EDS, BET, BJH; (3) đánh giá khả năng hấp phụ đối với methyl red và Cu²⁺ nhằm xác định dung lượng hấp phụ ở điều kiện tối ưu; và (4) ứng dụng mô phỏng DFT để tính toán cấu trúc tối ưu cùng giá trị năng lượng tương tác. Các bước thực nghiệm cụ thể như sau:

Chế tạo biochar từ biomass thân cây Dừa

Nguyên liệu thân cây dừa được rửa sạch, chẻ nhỏ, rửa bằng nước cất để loại bỏ tạp chất, bụi bẩn bám trên bề mặt. Sau đó, 20 gram nguyên liệu được cho vào cốc thủy tinh, thêm dung dịch HCl 2M ngập bề mặt nguyên liệu, gia nhiệt ở 100 °C trong 10 giờ. Tiếp tục,

lấy phần nguyên liệu ra để ráo, cho vào cốc sứ nung, đậy nắp, nung 450 °C trong 2 giờ. Sau khi để nguội tự nhiên trong lò, biochar được đem rửa bằng nước cất đến pH trung tính. Vật liệu được sấy khô ở 105 °C, ký hiệu là AC-L45.

Đặc trưng vật liệu

Trong nghiên cứu này, vật liệu được đặc trưng thông qua các phương pháp hiển vi điện tử quét (SEM) và nhiễu xạ tia X (XRD) để xác định hình thái cấu trúc và thành phần pha tinh thể, phổ tán xạ nguyên tử (EDS) để phân tích thành phần nguyên tố, phương pháp BET và BJH để phân tích thông tin loại mao quản, diện tích bề mặt riêng, phân bố kích thước mao quản.

Đánh giá khả năng xử lý

Vật liệu biochar AC-L45 được nghiên cứu khả năng hấp phụ các chất ô nhiễm như methyl red và ion đồng. Với methyl red, điều kiện hấp phụ tối ưu được là 0,100 g AC-L45 vào 125 ml dung dịch methyl red 70 mg/l, pH ~ 4, khuấy từ với tốc độ 500 vòng/phút trong 90 phút. Lọc lấy dung dịch, xác định nồng độ. Phương pháp UV-Vis được sử dụng để phân tích nồng độ methyl red ở bước sóng 525 nm bằng thiết bị UV-Vis 2650, Labomed. Trong đánh giá khả năng hấp phụ ion đồng, điều kiện thực nghiệm tối ưu được là 0,150 gram vật liệu được cho vào 100 ml dung dịch Cu(II) 70 mg/l. Sau đó, mẫu được khuấy trong 90 phút với tốc độ 500 vòng/phút. Lọc lấy dung dịch, xác định nồng độ ion đồng còn lại trong dịch lọc bằng phương pháp hấp thụ nguyên tử (AAS) trên thiết bị AA-240FS, hãng Agilent.

Mô phỏng cấu trúc tương tác

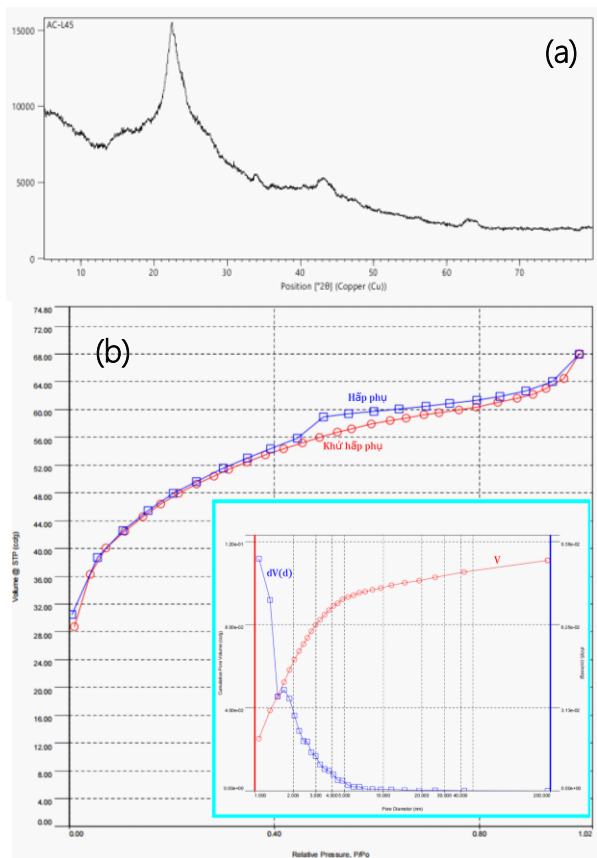
Để góp phần làm rõ sự cơ chế hấp phụ của vật liệu đối với các chất ô nhiễm, cấu trúc mô phỏng biochar, methyl red, Cu²⁺ và các cấu trúc tương tác được tối ưu hóa bằng các tính toán lý thuyết phiếm hàm mật độ [6,7] với phần mềm ORCA 4.2.1 [8,9] ở mức lý thuyết PBE/def2-TZVP [10]. Các cấu trúc được tính toán tần số dao động điều hòa để xác nhận cấu trúc thu được là cấu trúc ở điểm cực tiểu trên bề mặt thế năng.

Kết quả và thảo luận

Các đặc trưng của vật liệu biochar AC-L45

Kết quả XRD trong Hình 1a cho thấy đỉnh tại $2\theta = 22^\circ$ đặc trưng cho mặt mạng (002) của cấu trúc carbon vô định hình, cho thấy sự hình thành cấu trúc graphit hóa và các lớp graphene. Đỉnh tại $2\theta = 43^\circ$ đặc trưng cho mặt mạng (100) hoặc (101) của cấu trúc carbon graphite vô định hình. Quá trình chế tạo biochar với sự có mặt của HCl khi nhiệt phân đã hòa tan các tạp chất khoáng, được loại bỏ khi rửa mẫu. Thành phần nguyên tố C (80,37), O (17,17), Si (1,13), Cl (0,20) thu được từ kết

quả phân tích EDS (Hình 2c). Giản đồ XRD này phù hợp với phổ chuẩn JCPDS 41-1487 [11].



Hình 1: (a) Giản đồ XRD của biochar và (b) Đường đẳng nhiệt hấp phụ - khử hấp phụ N_2 và biểu đồ phân bố kích thước lỗ của mẫu AC-L45

Đường đẳng nhiệt hấp phụ - khử hấp phụ N_2 và biểu đồ phân bố kích thước lỗ của mẫu AC-L45 được thể hiện trong Hình 1b. Dựa trên phân loại của IUPAC (2015), đường đẳng nhiệt của mẫu mang đặc tính hỗn hợp giữa loại I(b) và loại IV(a). Ở vùng áp suất tương đối thấp ($P/P_0 < 0,1$), lượng khí nitrogen bị hấp phụ tăng lên một cách mạnh mẽ và đạt giá trị trên $40 \text{ cm}^3/\text{g}$, thể hiện quá trình lấp đầy đơn lớp xảy ra bên trong các mao quản siêu nhỏ (micropores) có kích thước dưới 2 nm. Đây là đặc trưng điển hình của các vật liệu carbon hoạt hóa hoặc than sinh học giàu vi xốp, đóng vai trò quyết định trong việc cung cấp diện tích bề mặt riêng lớn và các tâm hấp phụ mật độ cao.

Khi áp suất tương đối tiếp tục tăng lên vùng trung bình đến cao ($P/P_0 \sim 0,45 - 0,95$), đường đẳng nhiệt xuất hiện một vòng trễ hẹp, thuộc loại H3 cho thấy vật liệu có hệ mao quản trung bình kết hợp với vi mao quản, mao quản dạng khe nứt, được hình thành bởi sự sắp xếp không đều của các lớp carbon. Ở vùng áp suất sát giới hạn bão hòa ($P/P_0 \rightarrow 1,0$), lượng hấp phụ chỉ tăng nhẹ và không có hiện tượng dốc đứng, cho thấy sự đóng góp không đáng kể của các mao quản kích

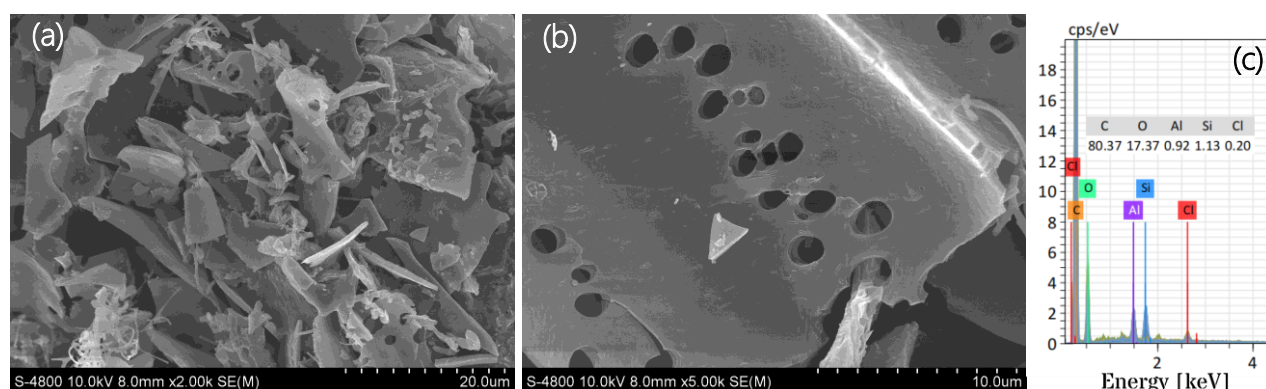
thước lớn. Kết quả phân tích đẳng nhiệt hấp phụ - khử hấp phụ N_2 cho thấy mẫu vật liệu sở hữu cấu trúc đa mao quản, trong đó hệ thống vi mao quản chiếm ưu thế vượt trội về mặt thể tích và diện tích bề mặt, kết hợp hài hòa với một lượng mao quản trung bình dạng khe đóng vai trò làm các kênh dẫn truyền. Cấu trúc này không chỉ tối ưu hóa dung lượng hấp phụ tối đa mà còn giảm thiểu trở lực khuếch tán, tạo điều kiện thuận lợi cho các chất tan dễ dàng tiếp cận sâu vào các hốc rỗng bên trong vật liệu, từ đó cải thiện đáng kể động học của quá trình hấp phụ. Diện tích bề mặt của vật liệu thu được là $166 \text{ m}^2/\text{g}$. Kết quả này cho thấy HCl góp phần đáng kể trong việc tăng diện tích bề mặt riêng của vật liệu. Diện tích bề mặt than nung ở 500°C là $3,582 \text{ m}^2/\text{g}$ và 900°C là $535,156 \text{ m}^2/\text{g}$ [12]. Tác nhân HCl giúp chế tạo vật liệu biochar nung 400°C có diện tích bề mặt lớn hơn ở vật liệu biochar nung ở 500°C . Điều này có thể giải thích bằng cơ chế ăn mòn cấu trúc biomass.

Dữ liệu từ phương pháp BJH cho thấy phân bố kích thước lỗ xốp của vật liệu tập trung chủ yếu trong khoảng từ 2 đến 50 nm, khẳng định cấu trúc mao quản trung bình chiếm ưu thế. Định phân bố sắc nét tại vị trí 3,8 nm cho thấy sự đồng nhất cao trong hệ thống mao quản, tạo điều kiện thuận lợi cho việc khuếch tán các phân tử chất bẩn có kích thước lớn vào sâu bên trong các hốc rỗng của than sinh học. Tổng diện tích bề mặt cụ thể và thể tích lỗ xốp tính toán được từ mô hình này hoàn toàn tương thích với khả năng hấp phụ tối đa được thể hiện qua các đường đẳng nhiệt. Đặc biệt, sự hiện diện của một lượng nhỏ lỗ xốp kích thước dưới 2 nm cũng đóng vai trò quan trọng trong việc tăng cường các điểm tiếp xúc cho các phân tử khí hoặc các ion kim loại nhỏ. Nhìn chung, cấu trúc đa mao quản này không chỉ tối ưu hóa khả năng lưu giữ chất tan mà còn giải thích tại sao vật liệu từ thân cây dừa lại có động học hấp phụ nhanh và hiệu quả xử lý vượt trội so với các loại sinh khối thông thường khác.

Hình 2a và 2b là ảnh SEM biểu thị rõ nét đặc trưng hình thái bề mặt của vật liệu biochar từ thân cây dừa biến tính HCl. Ở độ phóng đại $\times 2.000$, vật liệu thể hiện cấu trúc mảnh vỡ phiến không đồng đều với sự phân bố phức tạp của các phiến carbon xếp chồng và gãy nứt. Ở độ phóng đại cao hơn $\times 5.000$, quan sát thấy sự xuất hiện rõ rệt của các lỗ xốp hình tròn và bầu dục với kích thước micromet phân bố rải rác trên nền bề mặt tương đối phẳng. Sự hình thành các hệ thống lỗ xốp là kết quả của quá trình phân hủy nhiệt các thành phần lignocellulose trong thân dừa, kết hợp với tác nhân ăn mòn và hoạt hóa của acid HCl, hòa tan các tạp chất khoáng vô cơ cũng như bốc hơi các hợp chất

dễ bay hơi. Hydrochloric acid có thể đóng vai trò xúc tác acid thủy phân hemicellulose, khử nước trong cấu

trúc biomass tạo.



Hình 2: Ảnh SEM của mẫu AC-L45 với độ phóng đại (a) x2.000 và (b) x5.000. (c) phổ EDS tương ứng

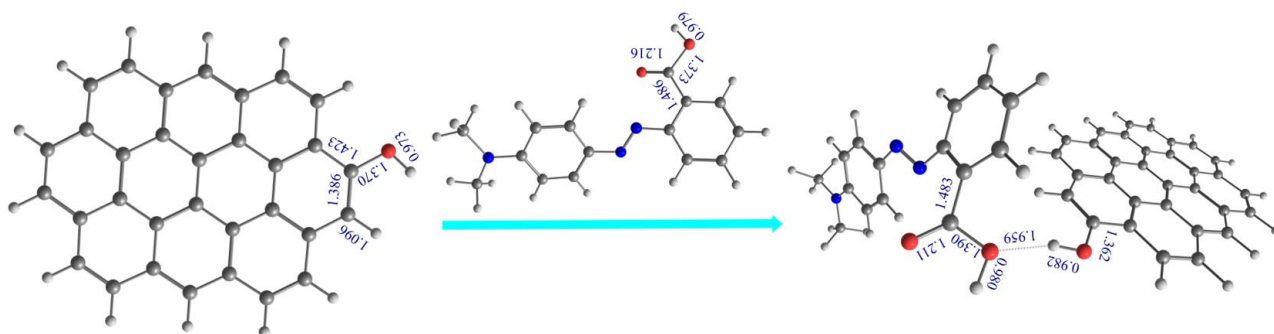
Cấu trúc dạng mảnh vỡ với các cạnh sắc nhọn cho thấy vật liệu có một độ cứng và độ kết tinh nhất định, giải thích đỉnh ở vị trí $2\theta = 22^\circ$ rõ và nhọn trong giản đồ XRD Hình 1a. Bề mặt của mảnh carbon lớn cho thấy bề mặt phẳng chiếm đa số, hầu như không có các mao quản trung bình trên các mảnh này, mao quản hình thành do sự xếp chồng các lớp carbon. Biểu đồ phân bố kích thước lỗ BJH (Hình 1b) cho thấy lượng mao quản trung bình chiếm tỉ lệ thấp. Bề mặt tuy bằng phẳng nhưng không trơn láng hoàn toàn mà có các nếp nhăn nhỏ. Sự thô nhám bề mặt ngoài này kết hợp với các vi mao quản nằm bên trong khối carbon, không thể nhìn thấy bằng SEM, là góp phần vào diện tích bề mặt của vật liệu ($S_{\text{BET}} = 166 \text{ m}^2/\text{g}$), còn tạo điều kiện thuận lợi cho các phân tử chất màu methyl red và ion Cu^{2+} dễ dàng thâm nhập, tiếp xúc và gắn kết vào các trung tâm hấp phụ bên trong vật liệu.

Nghiên cứu tương tác hấp phụ

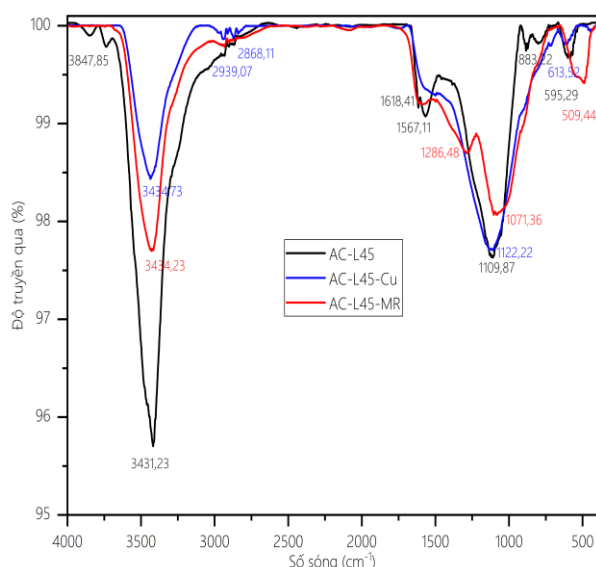
Kết quả hấp phụ methyl đỏ bằng AC-L45 trong điều kiện tối ưu có dung lượng hấp phụ tính được là 41,63 mg/g, hiệu suất khử màu đạt được xấp xỉ 47,57 %. Điều này cho thấy mẫu AC-L45 có khả năng lưu giữ các phân tử chất màu hữu cơ khá tốt ngay trong điều kiện thí nghiệm thông thường, phản ánh sự tương tác hiệu quả giữa các nhóm chức trên bề mặt carbon và các vòng thơm của methyl đỏ. Điều đó cho thấy vật liệu biochar chế tạo từ thân cây dừa với sự hỗ trợ của hydrochloric acid thể hiện tiềm năng ứng dụng thực tế cao trong việc xử lý nước thải dệt nhuộm có nồng độ ô nhiễm trung bình. Kết quả này phù hợp với đặc trưng bề mặt vật liệu qua ảnh SEM chủ yếu dạng phẳng và cấu trúc mao quản trung bình. Methyl red bị tắc nghẽn và chỉ bám được một ít lên bề mặt ngoài. Kết quả thực nghiệm hấp phụ ion đồng trong điều kiện đã tối ưu cho thấy hiệu suất hấp phụ tính được là 76,84 %, dung lượng hấp phụ là 35,86 mg/g.

Hình 3 mô phỏng sự hấp phụ của biochar với 01 nhóm chức OH với methyl red. Trong cấu trúc mô phỏng của biochar, nhóm hydroxyl đóng vai trò như một vị trí hoạt động chính, tạo điều kiện thuận lợi cho các tương tác liên kết hydro và tĩnh điện với phân tử chất màu methyl red, từ đó làm tăng đáng kể ái lực hấp phụ của vật liệu. Kết quả tính toán năng lượng liên kết cho thấy sự ổn định cao của phức hợp này, khẳng định cơ chế hấp phụ chủ đạo là quá trình hấp phụ vật lý kết hợp với các tương tác hóa học đặc hiệu giữa nhóm chức trên bề mặt biochar và phân tử chất màu. Liên kết hydrogen được hình thành giữa nguyên tử H của nhóm OH và nguyên tử O của nhóm COOH trên methyl red. Khoảng cách 1,959 Å thể hiện đây là một liên kết hydrogen có độ bền trung bình - mạnh, thường nằm trong khoảng 1,5 – 2,5 Å [13,14]. Do có sự cho – nhận electron, độ dài các liên kết đã thay đổi rõ rệt so với khi cô lập. Cụ thể, nhóm -OH có độ dài liên kết O-H bị kéo dài từ 0,973 Å lên 0,987 Å vì nguyên tử H đang bị hút mạnh về phía phân tử methyl red. Ngược lại, liên kết C-O co ngắn lại từ 1,370 Å xuống còn 1,350 Å. Trong nhóm -COOH của methyl red, liên kết C=O dẫn ra từ 1,218 Å lên 1,244 Å, cho thấy Oxy carbonyl cũng tham gia vào mạng lưới phân phối lại mật độ electron. Liên kết O-H của nhóm acid co lại thành 0,962 Å so với 0,979 Å ban đầu.

Giá trị năng lượng hấp phụ ($E_{\text{hp,bio-MR}}$) tính theo công thức: $E_{\text{hp,bio-MR}} = E_{\text{bio-MR}} - (E_{\text{biochar}} + E_{\text{MR}})$. Trong đó, $E_{\text{hp,bio-MR}}$, $E_{\text{bio-MR}}$, E_{biochar} và E_{MR} lần lượt là giá trị năng lượng hấp phụ, năng lượng của các cấu trúc hấp phụ, biochar và methyl red. Giá trị $E_{\text{hp,bio-MR}} \sim -0,246 \text{ eV}$ cho thấy quá trình hấp phụ thuận lợi về nhiệt động học. Hình 4 thể hiện sự biến đổi rõ rệt về vị trí số sóng và cường độ hấp thụ của các nhóm chức đặc trưng trên bề mặt biochar trước và sau quá trình hấp phụ ion kim loại Cu^{2+} và hấp phụ methyl red.



Hình 3: Mô phỏng tương tác giữa phân tử methyl red và biochar bằng phương pháp DFT

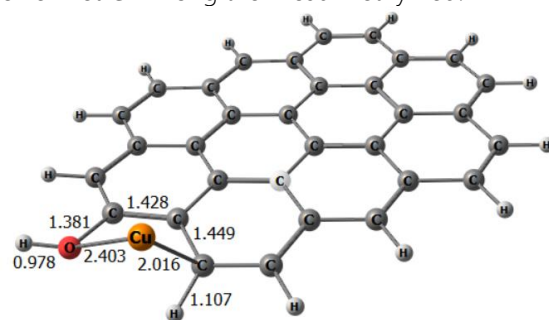


Hình 4: Phổ dao động hồng ngoại của mẫu trước và sau hấp phụ

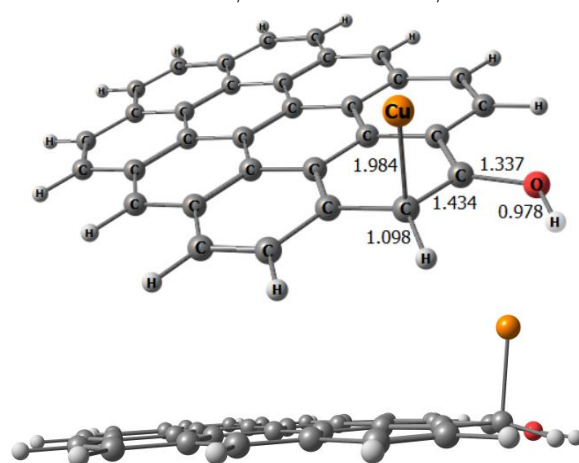
Trên phổ của mẫu AC-L45 có đỉnh hấp phụ rộng tại $3431,23\text{ cm}^{-1}$ đặc trưng cho dao động của nhóm O-H. Sau khi hấp phụ Cu^{2+} , đỉnh này dịch chuyển nhẹ lên $3434,73\text{ cm}^{-1}$ với sự giảm cường độ mạnh cho thấy nhóm O-H tham gia tạo phối trí với bề mặt Cu^{2+} , làm giảm mật độ nhóm OH tự do. Các peak tại $1618,41$ và $1567,11\text{ cm}^{-1}$ trong AC-L45 đặc trưng cho dao động của liên kết C=C trong vòng thơm. Trong mẫu AC-L45-Cu, hai đỉnh này biến thành một vai nhẹ, có thể được giải thích do ion Cu^{2+} tương tác với electron pi trong vòng thơm tạo tương tác cation-pi, được thể hiện qua hình ảnh orbital liên kết giữa Cu^{2+} và bề mặt vật liệu thu được từ mô phỏng DFT trong Hình 6. Đỉnh $1109,87$ trong AC-L45 đặc trưng cho dao động của liên kết C-O. Đỉnh này dịch chuyển lên $1122,22$ trong phổ của mẫu AC-L45-Cu cho thấy sự tạo liên kết phối trí giữa cặp electron tự do trên O của nhóm C-O với ion Cu^{2+} . Peak tại $613,52\text{ cm}^{-1}$ có thể được quy cho dao động của liên kết Cu-O, càng cho thấy vật liệu đã tạo liên kết với Cu^{2+} . [15]

Trong hấp phụ methyl red, cường độ peak tại $3434,23$ giảm so với trong mẫu AC-L45 có thể được giải thích

do sự tạo liên kết hydrogen giữa biochar và methyl red. Đặc trưng liên kết C=C tại vùng $1618,41\text{--}1567,11\text{ cm}^{-1}$ biến dạng thành vai rộng cho thấy có sự xen phủ pi-pi giữa vòng benzen của methyl red và vòng thơm trong biochar. Peak đặc trưng cho liên kết C-O giảm xuống $1071,36\text{ cm}^{-1}$. Peak xuất hiện tại $1286,48\text{ cm}^{-1}$ đặc trưng cho liên kết -N=N- nối với vòng thơm và dao động của liên kết C-N. Peak tại $509,44\text{ cm}^{-1}$ đặc trưng cho liên kết C-H vòng thơm của methyl red.



Cấu trúc của B, NLTĐ so với A: 0,049 eV

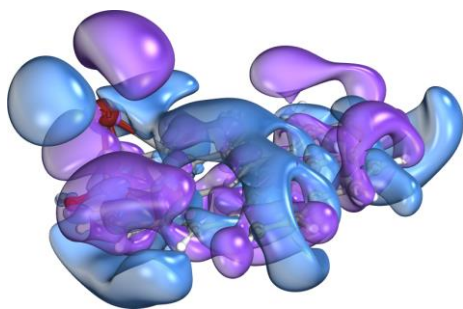


Cấu trúc A (0,000 eV)

Hình 5: Mô phỏng tương tác giữa ion Cu^{2+} và biochar bằng phương pháp DFT

Hình 5 mô phỏng cơ chế hấp phụ ion Cu^{2+} trên bề mặt biochar được làm sáng tỏ thông qua mô hình tính toán DFT. Cấu trúc A và B là hai cấu trúc có độ bền lớn nhất. Tất cả các tần số dao động điều hòa tính được

đều không âm cho thấy cấu trúc thu được ở điểm cực tiểu năng lượng trên bề mặt thế năng. Trong cấu trúc A, ion Cu^{2+} hấp phụ ở vị trí nguyên tử C, gần vòng góc với cấu trúc biochar với độ dài liên kết 1,984 Å, đồng thời liên kết C-C trên biochar thay đổi từ 1,386 lên 1,434 Å. Việc tăng độ dài liên kết này có thể được giải thích do một phần electron của liên kết giữa hai nguyên tử C đã dịch chuyển để tạo liên kết với ion Cu^{2+} , làm suy yếu liên kết C-C, nên độ dài liên kết tăng. Độ dài liên kết C-O giảm từ 1,370 xuống 1,337 Å có thể giải thích do tương tác tĩnh điện giữa ion kim loại đồng mang điện dương và nguyên tử O mang điện âm. Cấu trúc A bền nhất ứng với giá trị năng lượng thấp nhất, chọn làm mốc 0,000 eV. Cấu trúc B có năng lượng tương đối lớn hơn 0,049 eV so với cấu trúc A, được tính $E_B = (E_B - E_A) \times 27,211$ với E_A và E_B lần lượt là năng lượng tính được từ phép tính DFT. Sự gia tăng độ dài liên kết C-O từ 1,370 Å lên 1,381 Å, liên kết O-H từ 0,973 Å lên 0,978 Å, minh chứng cho sự chia sẻ mật độ electron từ nhóm hydroxyl đến ion kim loại.



Hình 6: Orbital phân tử của cấu trúc A giữa ion Cu^{2+} và biochar mô phỏng bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ

Sự hình thành khoảng cách liên kết Cu-O 2,403 Å và tương tác gần Cu-C 2,016 Å khẳng định quá trình hấp phụ diễn ra theo cơ chế hấp phụ hóa học, bao gồm sự phối hợp giữa phức chất hóa bề mặt (qua nguyên tử O) và tương tác cation-pi giữa Cu^{2+} và hệ liên kết pi trong mạng carbon thơm. Hơn thế, kích thước của ion Cu^{2+} nhỏ nên dễ dàng khuếch tán vào hệ thống vi mao quản của AC-L45 và tương tác hiệu quả với các tâm hoạt tính này. Hình 6 là orbital phân tử của cấu trúc tương tác giữa ion Cu^{2+} và biochar mô phỏng bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ. Sự xem phủ giữa orbital d của Cu^{2+} với orbital pi của biochar tạo liên kết "cation – pi".

Kết luận

Vật liệu biochar chế tạo từ thân cây Dừa ở 450 °C với sự hỗ trợ hydrochloric acid có diện tích bề mặt 166 m^2/g . Vật liệu có vòng trễ hấp phụ - khử hấp phụ N_2 mang đặc tính hỗn hợp giữa loại I(b) và loại IV(a) theo phân loại của IUPAC. Dung lượng hấp phụ thu được đối

với hấp phụ methyl red là 41,63 mg/g và Cu^{2+} là 35,86 mg/g cho thấy vật liệu có khả năng hấp phụ tương đối tốt các chất ô nhiễm hữu cơ và vô cơ trong nước. Các tính toán lý thuyết phiếm hàm mật độ cung cấp dữ liệu tương tác giữa biochar và chất ô nhiễm, làm rõ được cơ chế hấp phụ methyl red và Cu^{2+} trên biochar.

Acknowledgments

This research is supported by the project B2025-SPD-01.

References

1. H. Khurshid, M.R.U. Mustafa, U. Rashid, M.H. Isa, Y.C. Ho, M.M. Shah, *Environ. Technol. Innov.*, 23 (2021) 101563. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2021.101563>
2. T. Wen, J. Wang, S. Yu, Z. Chen, T. Hayat, X. Wang, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 5 (2017) 4371. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.7b00418>
3. U. Khalil, M. Bilal Shakoor, S. Ali, M. Rizwan, M. Nasser Alyemeni, L. Wijaya, *J. Saudi Chem. Soc.*, 24 (2020) 799. <https://doi.org/10.1016/j.jscs.2020.07.001>
4. K. Damer, I. Hamadneh, M. Abu-Dalo, A. Al-Dujali, *Adsorpt. Sci. Technol.*, 44 (2026) 1430388. <https://doi.org/10.1177/02636174261430388>
5. S.T. Ho, T.K. Nguyen, T.T.X. Le, K.T. Dang, H.H. Ly, M.T. Nguyen, H.L. Tran, T.L.H. Nguyen, T.T. Bui, *Vietnam J. Catal. Adsorpt.*, 15 (2026) 75. <https://doi.org/10.62239/jca.2026.011>
6. M. Khnifira, W. Boumya, J. Atarki, M. Sadiq, M. Achak, A. Bouich, N. Barka, M. Abdennouri, *J. Mol. Struct.*, 1310 (2024) 138247. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.138247>
7. N. Elboughdiri, I. Lakikza, A. Boublia, S.I. Aouni, N. El Houda Hammoudi, J. Georgin, D.S.P. Franco, H. Ferkous, D. Ghernaout, Y. Benguerba, *Process Saf. Environ. Prot.*, 186 (2024) 995. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.03.093>
8. F. Neese, *WIREs Comput. Mol. Sci.*, 12 (2022) e1606. <https://doi.org/10.1002/wcms.1606>
9. F. Neese, *WIREs Comput. Mol. Sci.*, 8 (2017) e1327. <https://doi.org/10.1002/wcms.1327>
10. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, 77 (1996) 3865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
11. S. Mehrotra, M. Gupta, K. Dujearic-Stephane, A. Kumar, P. Singh, B. Bharti, A.S. Mathuriya, P. Bocchetta, Y. Kumar, *Biomass Convers. Biorefin.*, 14 (2024) 17263. <https://doi.org/10.1007/s13399-023-03991-7>
12. T.T.X. Le, M.T. Nguyen, P.T. Nguyen, T.B. Le, T.K.P. Pham, *Dong Thap Univ. J. Sci.*, 14 (2025) 121. <https://doi.org/10.52714/dthu.14.04S.2025.1569>
13. T.K. Harris, A.S. Mildvan, *Proteins Struct. Funct. Genet.*, 35 (1999) 275. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1097-0134\(19990515\)35:3<275::Aid-prot1>3.0.Co;2-v](https://doi.org/10.1002/(sici)1097-0134(19990515)35:3<275::Aid-prot1>3.0.Co;2-v)
14. M. Tsujimura, H. Ishikita, K. Saito, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 27 (2025) 9794. <https://doi.org/10.1039/d5cp00511f>
15. R. Tareq, N. Akter, M.S. Azam, *Biochar from Biomass and Waste*, Elsevier (2019) 169