



Nghiên cứu lý thuyết sự tương tác của một số phân tử hữu cơ lên bề mặt anatase-TiO₂ (101)

A theoretical investigation of interaction of organic molecules with anatase-TiO₂ (101) surface

Nguyễn Ngọc Trí¹, Huỳnh Thị Mỹ Phúc¹, Nguyễn Tiến Trung^{1,*}

¹Phòng thí nghiệm Hóa học tính toán và Mô phỏng, Khoa Khoa học tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn

*Email: nguyentientrung@qnu.edu.vn

-Hội nghị Xúc tác và Hấp phụ Toàn quốc lần thứ X-

ARTICLE INFO

Received: 15/8/2019

Accepted: 10/9/2019

Keywords:

Anatase-TiO₂, material surface, DFT calculations, organic molecules

ABSTRACT

Understanding on existence, stability and role of interactions on material surfaces has been paid considerable interests from scientists. In the present work, we performed a theoretical investigation into adsorption of C₆H₅-R derivatives (R = -CHO, -COOH, -NH₂, -OH, -SO₃H) on anatase-TiO₂ (101) surface using DFT calculations. The periodic model and PBE functional were used in all calculations for the investigated systems. Results indicate that the processes are evaluated as chemical adsorptions, characterized by adsorption energies ranging from -10 to -29 kcal.mol⁻¹. The Ti...O electrostatic interactions and O-H...O hydrogen bonds govern the stability of configurations. Existence and role of interactions stabilizing the configurations are analysed in detail using quantum chemistry approaches including AIM, NBO methods and MEP maps. Especially, the adsorption capacity of the organic molecules on the anatase-TiO₂ (101) surface decreases in the order of -SO₃H > -COOH > -NH₂ > -CHO > -OH derivatives.

Giới thiệu

Trong nhiều thập kỷ qua, nghiên cứu về các vật liệu tiên tiến, vật liệu nano có khả năng ứng dụng cao trong các lĩnh vực khoa học công nghệ, sản xuất và đời sống đang được các nhà khoa học chú trọng, đầu tư đáng kể. Trong số đó, TiO₂ được xem là một trong những vật liệu bán dẫn quan trọng trong các quá trình phản ứng, được ứng dụng nhiều trong các lĩnh vực như năng lượng, sức khỏe, công nghệ thực phẩm [1,2]. Vật liệu TiO₂ được sử dụng nhiều trong xúc tác quang, hấp phụ, phân hủy các hợp chất dựa trên các tính chất bề mặt đặc biệt của nó. Gần đây, nghiên cứu về sự tương tác của các chất hữu cơ, các phân tử sinh học

trên bề mặt các vật liệu oxit kim loại như TiO₂ để ứng dụng vào các lĩnh vực xúc tác, cảm biến, dẫn truyền thuốc, y học được các nhà khoa học quan tâm [3]. Các dạng tồn tại của TiO₂ như rutile, anatase và brookite đã được nghiên cứu cả về thực nghiệm và lý thuyết [2-4]. Trong đó, pha anatase mặc dù kém bền hơn nhưng có độ hoạt động và khả năng xúc tác quang cao hơn pha rutile. Với pha anatase, bề mặt (101) là bề mặt bền nhất của nó và được khảo sát, ứng dụng nhiều [4]. Nghiên cứu sự hấp phụ các phân tử hữu cơ trên các bề mặt vật liệu TiO₂ ở các dạng khác nhau đã được khảo sát trước đây [3-7]. Kết quả cho thấy, bề mặt TiO₂ có khả năng tương tác tốt với các hợp chất hữu cơ chứa các nhóm chức như -OH, -COOH.