

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM
VIETNAM ACADEMY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

TẠP CHÍ HÓA HỌC

VIETNAM JOURNAL OF CHEMISTRY

ISSN 0866-7144

3e12 53

2015

MỤC LỤC
TABLE OF CONTENTS

	<i>Trang</i>
1 Nghiên cứu khả năng quang xúc tác của vật liệu BiFeO ₃ phân hủy xanh metylen và metyl da cam dưới ánh sáng trong vùng khả kiến. Photocatalytic activity of BiFeO ₃ for the degradation of methylene blue and methyl orange under visible-light irradiation. <i>Nguyễn Thị Hà Chi, Đoàn Trung Dũng, Nguyễn Đức Văn, Đào Ngọc Nhiệm</i>	1
2 Tổng hợp oxit hỗn hợp CeO ₂ -Fe ₂ O ₃ bằng phương pháp sol-gel xitrat. Synthesis of mixed oxides CeO ₂ -Fe ₂ O ₃ by the citrate sol-gel method. <i>Đoàn Trung Dũng, Nguyễn Thị Hà Chi, Phạm Ngọc Chức, Nguyễn Đức Văn, Đặng Thị Thanh Lê, Đào Ngọc Nhiệm</i>	5
3 Ảnh hưởng của tỉ lệ diện tích điện cực trên thể tích dung dịch điện phân đến đặc tính nano bạc điều chế bằng phương pháp điện hoá. Influences of ratio electrode area on electrolyte volume to features nano silver prepared by electrochemical method. <i>Trương Anh Khoa, Phạm Trung Sơn, Nguyễn Hoàng, Nguyễn Thu Hiền, Lê Lan Anh</i>	8
4 Vai trò của chất phân tán trong tổng hợp tinh thể nano mangan dioxit theo phương pháp cơ hóa. Roles of dispersers on the synthesis of nanocrystalline manganese dioxide by a machenochemical method. <i>Dương Phước Đạt, Nguyễn Xuân Thơm, Trương Thị Beta, Bùi Trung</i>	13
5 Tổng hợp thủy tinh hoạt tính sinh học 45SiO ₂ - 24,5Na ₂ O - 24,5CaO - 6P ₂ O ₅ sử dụng một phần nguyên liệu cát trắng nghiên cứu thực nghiệm "in vitro". Synthesis of bioactive glass 45SiO ₂ - 24.5Na ₂ O - 24.5CaO - 6P ₂ O ₅ using a white sand as a part of precursor material experimental study "in vitro". <i>Bùi Xuân Vương, Đỗ Quang Minh, Nguyễn Ngọc Thy, Nguyễn Đăng Quang, Nguyễn Hoài Phương, Võ Thúy Vi</i>	19
6 Tổng hợp vật liệu nano LiAVO ₄ (A = Co, Ni, Zn) bằng phương pháp sol-gel xitrat. Synthesis nano-crystalline LiAVO ₄ (A = Co, Ni, Zn) by sol-gel citrate process. <i>Nguyễn Văn Hải, Hoàng Văn Hùng</i>	25
7 Nghiên cứu ảnh hưởng của phức chất đất hiếm với axit lactic kích thích sinh trưởng trên cây cà chua ở Đơn Dương - Lâm Đồng. Study the effects of rare earth complexes with lactic acid stimulating growth of the potatoes in Dong Duong, Lam Dong. <i>Nguyễn Thành Anh, Lưu Minh Đại, Phạm S</i>	30
8 Tổng hợp phối tử N'-(2-hydroxybenzylidene)-2-(p-tolyloxy)acetohydrazide và phức chất của	34

- nó với Ni(II) và Cu(II).
Synthesis n'-(2-hydroxybenzylidene)-2-(p-tolyloxy)acetohydrazide ligand and it's complexes with Ni(II) and Cu(II).
Nguyễn Hoa Du, Nguyễn Tiến Công
- 9 Nghiên cứu tổng hợp canxi hydroxyapatit từ vỏ sò bằng phương pháp phản ứng pha rắn. 39
Synthesis of calcium hydroxyapatite from cockle shells using solid- state reaction.
Nguyễn Bình Dương, Nguyễn Đình Vinh, Đỗ Thị Hồng Nhung, Đào Quốc Hương, Nguyễn Thị Hạnh
- 10 Điều chế TiO₂ từ dịch chiết phân giải quặng ilmetit bằng tác nhân axit flohydric. 43
Preparation TiO₂ from extract of the ilmenite ore after decomposition in hydrofluoric acid solution.
Nguyễn Tấn Lâm, Trần Duy Dâm, Hồ Thị Nhật Linh, Nguyễn Thị Diệu Cẩm, Nguyễn Văn Nội
- 11 Tổng hợp và nghiên cứu khả năng phát quang phức chất 2-hydroxynicotinat của một số nguyên tố đất hiếm. 47
Syntheses and luminescence investigation of 2-hydroxynicotinate complexes of some rare earth elements.
Nguyễn Thị Hiền Lan, Phạm Thị Quỳnh Nga
- 12 Tổng hợp và nghiên cứu tính chất phức chất 2-thiophenaxetat của một số nguyên tố đất hiếm nhẹ. 51
Syntheses and study on characterization of thiopheneacetate complexes of some light rare-earth elements.
Nguyễn Thị Hiền Lan, Đào Thị Thu Hương
- 13 Nghiên cứu khả năng xử lý khí H₂S của vật liệu nanocomposite Fe₂O₃/MgO trên chất mang bentonite. 56
Removal of H₂S in solid-gas process using Fe₂O₃/MgO/bentonite nanocomposite.
Quản Thị Thu Trang, Phạm Văn Lâm, Phan Thị Ngọc Bích
- 14 Ảnh hưởng của hàm lượng chất cơ silic đến tính chất của vật liệu composít zeolit. 61
Effects of the content of the organic silicon compounds on the property of zeolite composite materials.
Nguyễn Thị Hương, Võ Hoàng Phương, Lê Thanh Sơn, Trần Hồng Côn
- 15 Tổng hợp composít SnO₂/oxit graphit có khả năng lưu trữ Li cao. 66
Synthesis of SnO₂/graphite oxide composite with high lithium storage.
Nguyễn Thị Tường Vy, Nguyễn Thị Kim Chung, Nguyễn Thị Hồng Hà, Trần Thị Minh Hiền, Nguyễn Thị Vương Hoàn, Võ Viễn
- 16 Nghiên cứu tổng hợp và đặc trưng dung dịch rắn GaN-ZnO. 70
Study on preparation characterization of solid solution.
Nguyễn Văn Kim, Nguyễn Thanh Liêm, Nguyễn Thị Việt Nga, Lê Trường Giang, Võ Viễn
- 17 Quá trình khử gypsum bằng cacbon hoạt tính kết hợp với silic dioxit ở nhiệt độ cao. 75
Reduction of gypsum by active carbon and silica dioxide at high temperature.
Nguyễn Văn Quang, La Văn Bình, La Thế Vinh

- 18 Tổng hợp nghiên cứu tính chất phức chất của lantan, gadolini với hỗn hợp phối tử L-phenylalanin và o-phenantrolin. 79
 Synthesis, characterized studies complexes of lanthanum, gadolinium with mixed ligand L-phenylalanine and o-phenantroline.
Lê Hữu Thiêng, Lê Thị Thanh Thủy
- 19 Nghiên cứu tính chất cơ lý và cấu trúc của bê tông chịu lửa sử dụng chất kết dính keo silica. 84
 Study mechano-physical properties and microstructures of castables using colloidal silica.
Vũ Đình Ngọc, Hà Quang Ánh, Đàm Thành Hương, Nguyễn Thanh Đoàn
- 20 Tổng hợp, nghiên cứu, thăm dò hoạt tính sinh học phức chất của gadolini, holmi với hỗn hợp phối tử L-aspartic và o-phenaltrolin. 89
 Synthesis, studies and approach on biolactivity of complexes of gadolinium, holmium with mixed ligand từ L-aspartic và o-phenaltroline.
Lê Hữu Thiêng, Bế Thị Hồng Lê
- 21 Chế tạo, đặc trưng và ứng dụng nano oxit hỗn hợp $\text{La}_2\text{O}_3\text{-LaMn}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}\text{O}_3$ để hấp phụ As(V) từ dung dịch. 93
 Preparation, characterization of nano mixed oxides $\text{La}_2\text{O}_3\text{-LaMn}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}\text{O}_3$ for As(V) adsorption.
Vũ Thế Ninh, Lưu Minh Đại, Đào Ngọc Nhiệm
- 22 Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất hai nhân của Pt(II) với phối tử benzamidin/thiosemicabazon ba càng. 98
 Synthesis and structural studies of a dinuclear Pt(II) complex with tridentate benzamidine/thiosemicabazone.
Nguyễn Hùng Huy, Nguyễn Minh Hải
- 23 Tổng hợp, xác định cấu trúc và thăm dò hoạt tính sinh học của hai phức chất paladi với phối tử benzamidin/thiosemicabazon ba càng. 102
 Synthesis, stuctural sudies and biological evaluation of two palladium complexes with tridentate benzamidine/thiosemicabazone.
Nguyễn Hùng Huy, Triệu Thị Nguyệt
- 24 Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc phức chất hỗn hợp của Tecbi(III) với benzoyltrifloaxetat với α, α' -dipyridin. 106
 Study of synthesis of Terbium (III) ternary complex with benzoyltrifluoroacetone and α, α' -dipyridine.
Nguyễn Thu Hà, Triệu Thị Nguyệt, Nguyễn Hùng Huy, Lê Hữu Trung, Nguyễn Thị Vân Anh
- 25 Ảnh hưởng của thông số điện phân đến hiệu quả xử lý nước thải cá cơm khô hấp bằng phương pháp oxi hóa điện hóa. 110
 Influence of electrochemical parameters on COD removal efficiency of boiled anchovies wastewater br electrochemical oxidation.
Phạm Trung Sơn, Nguyễn Hoàng, Trương Anh Khoa, Lê Thị Nhung, Nguyễn Thu Hiền
- 26 Xử lý nước thải cá cơm hấp bằng phương pháp keo tụ điện hóa. 114
 Treatment wastewater of boiled anchovies by electrocoagulation.
Phạm Trung Sơn, Nguyễn Hoàng, Trương Anh Khoa, Lê Thị Nhung, Nguyễn Thu Hiền
- 27 Ảnh hưởng của chiều dày đến cấu trúc và tính chất của màng Cu_2O . 119

- Effects of thickness on structural and electrical properties of Cu_2O thin films.
Nguyễn Mạnh Hùng, Triệu Thị Nguyệt, Nguyễn Hùng Huy, Nguyễn Thành Thọ
- 28 Ảnh hưởng của chiều dày đến cấu trúc và tính chất điện của màng mỏng ZnO . 123
 Influence of thickness on structural and electrical properties of ZnO thin films.
Nguyễn Mạnh Hùng, Triệu Thị Nguyệt, Nguyễn Hùng Huy, Đặng Xuân Chát
- 29 Nghiên cứu xác định Sn^{4+} bằng phương pháp von-ampe hòa tan hấp phụ sử dụng resorcinol. 128
 Study on the determination of Tin(IV) by adsorptive stripping voltammetry method using resorcin.
Cao Văn Hoàng
- 30 Silver nanoparticles deposited in zeolite framework: synthesis by gamma ray irradiation and their antibacterial activity. 134
Le Anh Quốc, Dang Van Phu, Nguyen Ngoc Duy, Nguyen Thuy Ai Trinh, Bui Duy Du, Nguyen Quoc Hien
- 31 Nghiên cứu tổng hợp hạt nano selen từ Na_2SeSO_3 sử dụng tác nhân khử axit ascorbic. 139
 Synthesis of selenium nanoparticles using ascorbic acid reductant in presence of alginate.
Quản Thị Thu Trang, Trương Công Doanh, Phan Thị Ngọc Bích
- 32 Nghiên cứu tính chất hoàn nguyên gián tiếp bằng khí CO với quặng sắt magnetit Nà Rua - Cao Bằng. 144
 The indirect reduction of magnetite ore from Na Rua, Cao Bang province, Vietnam by carbon monoxide.
Nguyễn Sơn Lâm, Bùi Anh Hòa, Nguyễn Thanh Hoàn
- 33 Chế tạo, đặc trưng và ứng dụng nano oxit hỗn hợp $\text{CeO}_2\text{-Mn}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$ để hấp phụ As(V) từ dung dịch. 148
 Preparation, characterization and As(V) adsorption on nano mixed oxides $\text{CeO}_2\text{-Mn}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$.
Vũ Thế Ninh, Lưu Minh Đại, Đào Ngọc Nhiệm, Nguyễn Đoàn Trung Hiếu
- 34 Tổng hợp $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ cấu trúc nano bằng phương pháp đốt cháy và thăm dò khả năng quang xúc tác trên phản ứng phân hủy xanh metylen. 153
 Synthesis $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ nano structures by combustion method and exploration burning possibility of reaction photocatalytic decomposition methylene blue.
Lê Hữu Thiêng, Đàm Thu Hiếu
- 35 Nghiên cứu tổng hợp và tính chất của vật liệu nano phát quang chuyển ngược $\text{NaYF}_4\text{:Er(III)/Tm(III)/Yb(III)}@O\text{-carboxymethylchitosan}$. 158-5
 Synthesis and characterization of up-conversion luminescent nanomaterials $\text{NaYF}_4\text{:Er(III)/Tm(III)/Yb(III)}@O\text{-carboxymethylchitosan}$.
Hà Thị Phương, Trần Thu Hương, Lê Thị Vinh, Trần Kim Anh, Lê Quốc Minh
- 36 Các yếu tố ảnh hưởng đến quá trình điều chế vật liệu nano ferit ytri. 163
 The effect of the synthesis process on the characters of nanosized yttrium ferrite material.
Nguyễn Anh Tiến, Bùi Thị Li Na
- 37 Nghiên cứu tổng hợp vật liệu phát lân quang $\text{SrAl}_2\text{O}_4\text{:Eu(II), Dy(III)}$ sử dụng tiền chất tinh bột. 168

Synthesis of material SrAl_2O_4 phosphorescence: Eu(II), Dy(III) using the substance starch.

Trần Dương, Phạm Thị Bé

- 38 Nghiên cứu đặc trưng của vật liệu khung cơ kim trong hấp phụ khí. 173
Studies on properties of metal-organic frameworks materials using on gas adsorption.
*Trần Văn Chính, Nguyễn Duy Anh, Đoàn Thị Ngôi, Nguyễn Thị Hoài Phương,
Lê Thanh Bắc, Phan Thanh Xuân, Nguyễn Công Thống*
- 39 Khảo sát một số yếu tố ảnh hưởng đến quá trình tổng hợp vật liệu MOF Cr-BDC bằng phương pháp thủy nhiệt. 177
Investigation on the affect factors to preparation process of MOF Cr-BDC by hydrothermal method.
Nguyễn Thị Hoài Phương, Ninh Đức Hà, Đoàn Thị Ngôi
- 40 Nghiên cứu ảnh hưởng của vật liệu nano SiO_2 điều chế từ tro trấu đến cường độ của bê tông xi măng nhiều tro bay. 182
Study on effect of nano SiO_2 prepared from rice husk ash to strength of fly-ashed cement concrete.
*Đặng Thị Thanh Lê, Vương Đặng Lê Mai, Vũ Việt Cường, Hoàng Anh Tuấn,
Nguyễn Văn Hưng*
- 41 Phương pháp đơn giản điều chế vật liệu nano TiO_2 pha tạp đồng thời bởi N và W có hoạt tính quang xúc tác cao trong vùng ánh sáng nhìn thấy. 189
Simple method of preparing N, W co-doped TiO_2 nanomaterials of hight photocatalytic activity under visible light.
Nguyễn Văn Hưng, Phạm Minh Xuân, Lê Thế Tâm, Đặng Thị Thanh Lê
- 42 Điều chế hydroxit kép Mg-Fe từ nguồn dung dịch Fe(II) bằng phương pháp đồng kết tủa hợp oxi hóa. 194
Preparation of Mg-Fe layered double hydroxide by combined co-precipitation and oxidation from aqueous solution of Fe^{2+} .
Phạm Minh Xuân, Nguyễn Quốc Chính, Lê Thế Tâm, Đặng Thị Thanh Lê, Nguyễn Văn Hưng
- 43 Ảnh hưởng của TiO_2 và MgO đến cấu trúc gốm hàm lượng oxit nhôm cao. 199
Effects of TiO_2 and MgO to the structure of high aluminum oxide ceramics.
Ngô Minh Tiến, Vũ Minh Thành, Phạm Tuấn Anh, Điền Trung Nghĩa, Lê Văn Thu
- 44 Một số yếu tố ảnh hưởng đến khả năng chống thấm, chịu lực của bê tông khi sử dụng xi măng nanocompozit ba thành phần: clinke – nanoclay - ống nanocarbon. 204
Some factors effect to waterproof, loaded capabilities of concrete using three components nanocomposite cement: clinke – nanoclay – carbon nanotubes.
Nguyễn Văn Thao, Vũ Minh Thành, Ngô Minh Tiến, Lê Văn Thu
- 45 Nghiên cứu ảnh hưởng của giá trị đường khử (DE) đến sự hình thành vật liệu phức hợp sắt-polysaccarit. 208
Influence of dextrose equivalent (DE) on the formation of iron polysaccharide complex.
*Nguyễn Đình Vinh, Đào Quốc Hương, Phan Thị Ngọc Bích,
Nguyễn Thị Hạnh, Vũ Duy Hiến*
- 46 Nghiên cứu phản ứng benzyl hóa *p*-xylen bằng benzyl clorit trên xúc tác Fe-bentonit. 213

- Study on benzylation of *p*-xylene by benzyl chloride over Fe-bentonite catalyst.
*Nguyễn Lê Mỹ Linh, Hoàng Văn Đức, Dương Tuấn Quang
 Lê Thị Hòa, Đinh Quang Khiếu, Nguyễn Hữu Phú*
- 47 Tổng hợp hydroxyapatit từ vỏ sò bằng phương pháp kết tủa và khảo sát động học hấp phụ đồng thời ion Zn^{2+} và Ni^{2+} trong dung dịch. 218
 Synthesis of hydroxyapatite from oyster shell by precipitate method and evaluation on adsorptive removal of Zn^{2+} and Ni^{2+} from solution.
Nguyễn Xuân Sang, Phạm Thanh Thiên, Lê Minh Viễn, Trương Lê Bích Trâm
- 48 Nghiên cứu ảnh hưởng tỉ lệ tiền chất đến quá trình tổng hợp dung dịch rắn GaN-ZnO. 223
 A study on effect of molar ratio of precursors on the synthesis of GaN-ZnO solid solution.
Nguyễn Văn Kim, Nguyễn Thanh Liêm, Nguyễn Thị Việt Nga, Lê Trường Giang, Võ Viễn
- 49 Tổng hợp nanocompozit hydroxyapatit trên chất nền tinh bột sắn (Tapioca). 228
 Synthesis of hydroxyapatite/tapioca nanocomposites.
*Nguyễn Thị Lan Hương, Đào Quốc Hương, Phan Thị Ngọc Bích, Hoàng Thị Tinh,
 Vũ Duy Hiến, Nguyễn Thị Hạnh*
- 50 Nghiên cứu chế tạo và tính chất của các hạt nano $SiO_2@NaYF_4:Er^{3+},Yb^{3+}$ cấu trúc lõi/vỏ để điều khiển các phát xạ chuyển đổi ngược trong vùng xanh lá cây đến đỏ. 233
 Fabrication and characterization of the core/shell nanoparticles $SiO_2@NaYF_4:Yb^{3+},Er^{3+}$ for tunable green-to-red upconversion emissions.
Lâm Thị Kiều Giang, Nguyễn Vũ, Trần Kim Anh, Trần Thu Hương, Lê Quốc Minh
- 51 Hấp phụ cadimi trong dung dịch bằng mercaptopropyl/diatomit. 238
 A study on the cadimium adsorption over 3-mercaptopropylmethosilan modified diatomite from aqueous solution.
Võ Quang Mai, Bùi Hải Đăng Sơn, Đặng Xuân Dư, Lê Công Nhân, Đinh Quang Khiếu
- 52 Nghiên cứu tổng hợp ZnO pha tạp Ag có kích thước nanomet bằng phương pháp đốt cháy. 242
 Study on the synthesis of nanometric Ag doped ZnO by method combustion.
*Phan Thị Minh Huyền, Nguyễn Xuân Dũng, Nguyễn Thị Hòa, Nguyễn Thảo Linh,
 Mai Thị Phương*
- 53 Tổng hợp spinel $ZnFe_2O_4$ có kích thước nanomet bằng phương pháp đốt cháy gel và khả năng quang xúc tác. 248
 Synthesis of nanometric $ZnFe_2O_4$ spinel by method combustion and their photocatalytic activity.
Nguyễn Xuân Dũng, Phan Thị Minh Huyền, Nguyễn Văn Quốc
- 54 Nghiên cứu quá trình hòa tách nhôm oxit trong cao lanh Phú Thọ bằng $KHSO_4$. 254
 Alumina extraction from kaolin of Phu Tho province by $KHSO_4$.
*Vũ Minh Khôi, La Thế Vinh, Lê Thị Mai Hương, Hà Thị Hồng Yến, Nguyễn Đình Lộc,
 Nguyễn Thị Vân Anh*
- 55 Nghiên cứu các đặc tính nguồn nguyên liệu quặng sắt Nà Rua Cao Bằng. 258
 Characterization of magnetite ore from Na Rua, Cao Bang province Vietnam.
Nguyễn Sơn Lâm, Bùi Anh Hòa, Nguyễn Thanh Hoàn
- 56 Tổng hợp và đặc trưng của oxit perovskit $NdFeO_3$ kích thước nanomet bằng phương pháp 262

đốt chảy gel.

Synthesis and characterization of NdFeO_3 perovskite oxide by the combustion process method.

Lưu Minh Đại, Phạm Ngọc Chức, Đào Ngọc Nhiệm, Nguyễn Đức Văn

- 57 Nghiên cứu tổng hợp vật liệu N, S- TiO_2 từ quặng ilmenit để xử lý phẩm màu Rhodamine B. 266
Preparation of N, S- TiO_2 from ilmenite for Rhodamine B degradation.
*Trần Thị Tâm, Chu Thị Trà, Ngô Tiến Tường, Lục Đức Việt, Nguyễn Quang Vinh,
Nguyễn Minh Phương, Nguyễn Đình Bằng*
- 58 Nghiên cứu điều chế và hoạt tính quang xúc tác nano TiO_2 pha tạp neodym. 270
Study of synthesis and photocatalytic activity of neodymium doped nano TiO_2 .
Võ Văn Tân, Trần Thị Lệ Huyền
- 59 Nghiên cứu chế tạo chất lỏng từ Fe_3O_4 bằng phương pháp thủy nhiệt cho định hướng ứng dụng y sinh. 275
Synthesis of Fe_3O_4 ferrofluid by hydrothermal method towards biomedical application.
*Vương Thị Kim Oanh, Trần Đại Lâm, Đỗ Hùng Mạnh, Lê Trọng Lưu, Lê Hải Đăng,
Đỗ Văn Tuấn, Nguyễn Xuân Phúc*
- 60 Tổng hợp và đánh giá khả năng loại bỏ Cu(II) , Cd(II) trong nước của graphene oxit (GO) và nano composit $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{GO}$. 279
Synthesis and ability for Cu(II) , Cd(II) removal of graphene oxide (GO) and $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{GO}$ nanocomposite.
Hà Quang Ánh, Lê Hà Giang, Nguyễn Kế Quang, Vũ Đình Ngọc, Vũ Anh Tuấn
- 61 Nghiên cứu khả năng loại bỏ asen trong nước của nano composit $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{GO}$ và $\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{GO}$. 285
Study arsenic removal ability of $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{GO}$ and $\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{GO}$ nanocomposite.
*Hà Quang Ánh, Lê Hà Giang, Nguyễn Kế Quang, Quán Thị Thu Trang, Vũ Đình Ngọc,
Vũ Anh Tuấn*
- 62 Chế tạo các chấm lượng tử CdTe, CdSe và CdS trong môi trường nước. 291
Aqueous syntheses of CdTe, CdSe and CdS quantum dots.
Ứng Thị Diệu Thúy, Trần Thị Kim Chi, Nguyễn Quang Liêm
- 63 Nghiên cứu sự hấp phụ As(V) trong dung dịch nước trên vật liệu Al-bentonite và Al-CTAB-bentonite. 296
Adsorption of arsenate from aqueous solution by Al-bentonite and Al-CTAB-bentonite.
*Nguyễn Lê Mỹ Linh, Hoàng Văn Đức, Dương Tuấn Quang,
Lê Thị Hòa, Đinh Quang Khiếu, Nguyễn Hữu Phú*
- 64 Nghiên cứu động học và đẳng nhiệt hấp phụ phenol đỏ trong dung dịch nước trên vật liệu bentonite biến tính. 303
Studies on kinetics and isotherms of phenol red adsorption on modified bentonite.
*Nguyễn Lê Mỹ Linh, Nguyễn Thị Anh Thư, Dương Tuấn Quang,
Đinh Quang Khiếu, Nguyễn Hữu Phú*
- 65 Nghiên cứu lựa chọn maltodextrin và tổng hợp vật liệu phức hợp sắt-maltodextrin (DE = 25). 310
Study on selection of maltodextrin and preparation of iron-maltodextrin complex (DE = 25).
*Nguyễn Thị Xuyên, Đào Quốc Hương, Nguyễn Thị Hạnh, Nguyễn Đình Vinh,
Vũ Duy Hiến*

- 66 Synthesis, structural characterization of complexes of Zn(II), Cd(II) with quinoline's derivatives by a combination of spectroscopy and density functional theory calculation. 315
Le Thi Hong Hai, Ngo Tuan Cuong, Nguyen Thi Hai
- 67 Tổng hợp, xác định cấu trúc và nghiên cứu tính chất huỳnh quang phức chất 1,10-phenantrolin erbi(III) nitrat. 321
 Synthesis and study on fluorescence of 1,10-phenantroline erbium (III) nitrate complex.
Nguyễn Đức Vương, Nguyễn Mậu Thành, Nguyễn Đình Luyện, Nguyễn Thị Hải Yến
- 68 Đánh giá hàm lượng đất hiếm trong đất trồng và trong quả bưởi năm roi huyện Bình Minh - Vĩnh Long. 326
 Evaluation of rare earth element content in soil and in Namroi grapefruit of Bình Minh - Vĩnh Long.
Nguyễn Hoa Du, La Thị Hằng
- 69 Nghiên cứu chiết một số nguyên tố đất hiếm bằng hỗn hợp triphenylphosphin oxit, axit di-(2-etylhexyl)phosphoric từ môi trường axit axetic và các dẫn xuất clo của nó. 330
 Study of the extraction of rare earth elements by mixture of triphenylphosphine oxid and di-(2-ethylhexyl)phosphoric acid from acetic acid and its chloride derivatives solution.
Nguyễn Đình Luyện, Ngô Văn Từ, Phạm Yên Khang, Trần Đức Trí
- 70 Nghiên cứu khả năng hấp phụ ion flo trong dung dịch nước của oxit CeO₂ cấu trúc nano tổng hợp bằng phương pháp đốt cháy gel polyvinyl ancol. 335
 Study of removing fluoride ion from aqueous solution by the CeO₂ nano structure prepared by combustion method using polyvinyl alcohol.
Dương Thị Lịm, Đào Ngọc Nhiệm, Lưu Minh Đại
- 71 Separation of zirconium from impurities in HNO₃ by solvent extraction with TBP, D2EHPA, PC88A for determination of them by ICP-MS. 340
Chu Manh Nhung, Le Ba Thuan, Nguyen Xuan Chien
- 72 Nghiên cứu khả năng xúc tác của vật liệu MnO₂ trên pyroluzit cho phản ứng oxi hóa xanh metylen. 346
 The catalytic ability oxidation reaction for methylene blue dye by nano-sized MnO₂ on pyroluzite.
Lê Mạnh Cường, Nguyễn Trọng Uyển, Nghiêm Xuân Thung
- 73 Hoạt tính xúc tác của phức Fe^{III}NTA trong quá trình oxi hóa các hợp chất hữu cơ ở pH trung tính. 350
 The catalytic activity of Fe^{III}NTA complexes for oxidation process of organic compounds at neutral pH.
Nguyễn Ngọc Tùng, Lê Trường Giang, Đào Hải Yến
- 74 Khảo sát các yếu tố ảnh hưởng tới quá trình trao đổi ion để tổng hợp vật liệu Ag/NM-ZSM-5 và đánh giá khả năng khử khuẩn của vật liệu. 355
 Study on the condition of Ag/NM-ZSM-5 and its antibacterial performance.
Nguyễn Sáng, Chu Xuân Quang, Trần Hùng Thuận, Nguyễn Thị Thu Trang, Phạm Tuấn Linh, Nguyễn Thị Nhiệm, Bùi Quang Hiếu, Phạm Minh Đức, Nguyễn Thị Bích Hồng, Lê Kim Lan, Trần Quang Vinh, Lê Thị Hoài Nam
- 75 Cải thiện khả năng phân tán sắt trên vật liệu graphen oxit. 360

- Improves dispersion of iron on the graphene oxide materials.
Nguyễn Thị Vương Hoàn, Nguyễn Ngọc Minh, Cao Văn Hoàng, Võ Viễn
- 76 Nghiên cứu sự ảnh hưởng của giá trị pH và nhiệt độ đến sự hình thành goethite. 365
 Influence of pH value and temperature on the formation of goethite.
Nguyễn Đình Vinh, Ngô Thị Hồng Thu, Đào Quốc Hương, Nguyễn Thị Hạnh
- 77 Nghiên cứu tổng hợp vật liệu lai hữu cơ-vô cơ pha phức chất đất hiếm europium định hướng ứng dụng cho tinh thể quang tử. 370
 Study of synthesis and properties of europium complex doped hybrid organic-inorganic materials for photonic crystals.
Hoàng Thị Khuyên, Nguyễn Thanh Hương, Nguyễn Mạnh Hùng, Vũ Doãn Miên, Tống Quang Công, Lại Ngọc Diệp
- 78 Nghiên cứu chế tạo xúc tác cacbon hóa xenlulozơ, ứng dụng cho quá trình chuyển hóa dầu hạt cao su thành biodiesel. 375
 Preparation of cellulose based catalyst for converting rubber seed oil to biodiesel.
Nguyễn Khánh Diệu Hồng, Vũ Đình Duy
- 79 Nghiên cứu cải thiện tính ổn định nhiệt của vật liệu ziconi oxit sunfat hóa dạng mao quản trung bình. 382
 Study on improving thermal stability of mesoporous sulfated ziconia.
Nguyễn Khánh Diệu Hồng, Phạm Văn Phong
- 80 Nghiên cứu chế tạo vật liệu phát quang trên nền LaPO_4 pha tạp Eu(III). 387
 Study of the synthesis luminescent materials doped Eu(III) in LaPO_4 .
Võ Văn Tân, Lê Minh Tiến
- 81 Nghiên cứu tổng hợp nano CeO_2 bằng phương pháp sol-gel và thử khả năng quang xúc tác. 393
 Study synthesis of nano CeO_2 by sol-gel method and testing capability photocatalyst.
Võ Văn Tân, Nguyễn Thị Trang
- 82 Tổng hợp, nghiên cứu cấu trúc và thăm dò hoạt tính sinh học của phức chất Cu(I) với thiosemicacbazon menton. 398
 Synthesis, characterization and biological activity of Cu(I) complex with methone thiosemicarbazone.
Phan Thị Hồng Tuyết, Hà Phương Thư, Lê Thế Tâm
- 83 Tổng hợp vật liệu nano phát quang $\text{Gd}_2\text{O}_3:\text{Eu}$ bằng phương pháp phản ứng nổ. 403
 Combustion synthesis of $\text{Gd}_2\text{O}_3:\text{Eu}$ nanophosphors.
Phạm Đức Roãn, Hoàng Văn Thiệu, Bùi Thị Kim Cúc, Trần Thị Kim Chi, Nguyễn Vũ
- 84 Tổng hợp và tính chất quang của vật liệu nano $\text{YBO}_3:\text{Eu}$. 407
 Combustion synthesis and optical properties of $\text{YBO}_3:\text{Eu}$ nanophosphors.
Mẫn Hoài Nam, Trần Thị Kim Chi, Đinh Mạnh Tiến, Phạm Đức Roãn, Hoàng Thị Lan, Nguyễn Thị Thu Hiền, Bùi Thị Kim Cúc, Nguyễn Vũ
- 85 Nghiên cứu làm giàu quặng apatit Lào Cai loại II theo phương pháp nung - hydrat hóa và gạn. 412
 A study of beneficiation of type II - Lao Cai apatite ore by calcination - hydration and

- decanting
Bùi Quốc Huy, Nguyễn Thị Thanh, Trần Thị Ngọc Vân, Hoàng Anh Tuấn, Lê Xuân Thành
- 86 Phương pháp khử sâu đồng và sắt ra khỏi dung dịch sunfat niken. 416
 Method of removal of copper and iron from sunphate nickel solution.
Phạm Đức Thắng, Ngô Huy Khoa, Nguyễn Sơn Lâm, Nguyễn Trung Kiên
- 87 Tổng hợp, đặc trưng cấu trúc vật liệu xFe-30Ti-SBA-15 và ứng dụng làm xúc tác phân hủy phenol trong môi trường nước. 420
 Synthesis and characterization of xFe-30Ti-SBA-15 materials used as photocatalysts for phenolic degradation in water.
Vũ Văn Nhung, Nguyễn Văn Nội, Nguyễn Tiến Thảo
- 88 Tổng hợp và khảo sát tính nhạy với ion chì(II) của màng tổ hợp graphen/poly(1,5-diaminonaphtalen). 427
 Fabrication and sensitive detection of lead(II) ions based on graphene/poly(1,5-diaminonaphtalen) composite film.
Nguyễn Văn Chúc, Nguyễn Tuấn Dung, Cao Thị Thanh, Đặng Thị Thu Huyền, Trần Đại Lâm, Phan Ngọc Minh
- 89 Ảnh hưởng của phương pháp điều chế đến đặc trưng cấu trúc và hoạt tính quang xúc tác phân hủy metyl da cam của hạt nano AgInS₂. 433
 Effects of preparation methods on structural properties and photocatalytic activity for degradation of methyl orange of AgInS₂ nanoparticles.
Bùi Đức Nguyên, Nguyễn Đình Cường, Đặng Thị Thanh Lê
- 90 Tổng hợp, nghiên cứu đặc trưng cấu trúc và so sánh hoạt tính quang xúc tác phân hủy metyl da cam của vật liệu nano AgIn₃S₈. 437
 Preparation, characterization and comparison photocatalytic activity of AgIn₃S₈ nanomaterials for degradation of methyl orange.
Bùi Đức Nguyên, Nguyễn Văn Ánh
- 91 Nghiên cứu chế tạo lớp phủ ormosil trên bề mặt thủy tinh. 441
 Studying the production of ormosil coating on glass surface.
Nguyễn Văn Dũng, Võ Thị Thanh Kiều
- 92 Nghiên cứu làm giàu quặng apatit Lào Cai loại II bằng axit phosphoric. 445
 A study of beneficiation of type II-Lao Cai apatite ore by phosphoric acid.
Bùi Quốc Huy, Trần Thị Hương, Nguyễn Thanh Tùng, Lê Thị Nga, Bùi Hữu Trung, Lê Xuân Thành, Trương Văn
- 93 Tổng hợp, đặc trưng và tính chất vật liệu ZnO pha tạp C, Mn. 449
 Synthesis and characterization and properties of Mn, C co-doped ZnO material.
Lưu Minh Đại, Đào Ngọc Nhiệm, Lưu Thị Việt Hà
- 94 Nghiên cứu quá trình điều chế và ứng dụng chất keo tụ từ bùn đỏ để xử lý hiệu quả một số nguồn nước thải có hàm lượng cao PO₄³⁻, COD. 453
 Study on preparation of coagulants from sludge and its application in treatment efficiently of resources of wastewater with high PO₄³⁻ and COD concentrations.
Nguyễn Văn Tiến, Lê Thị Mai Hương, Lê Thị Lan, Đỗ Thế Văn, Nguyễn Nam Giang, Trần Thị Hồng
- 95 Tổng hợp và thăm dò hoạt tính sinh học các phức chất của Zn(II) với một số 459

thiosemicabazon.

Zinc(II) thiosemicabazonates: synthesis, characterization and biological activity study.

Nguyễn Thị Bích Hương, Trịnh Ngọc Châu

- 96 Tổng hợp nano vàng từ dịch chiết lá mướp đắng và HAuCl_4 . 464

Synthesis of gold nanoparticles from *Momordica charantia* leaves extract and HAuCl_4 .

Nguyễn Thị Mai Thơ, Trần Nguyễn Minh Ân

- 97 Phản ứng bất thường giữa kali triclopiperidinplatinat(II) với *p*-nitroanilin. 468

The unusual reaction between kali triclopiperidinplatinat(II) with *p*-nitroaniline.

Phạm Văn Thống, Hoàng Văn Trường, Lê Thị Duyên, Nguyễn Thị Thanh Chi

- 98 Tổng hợp, cấu trúc và hoạt tính sinh học của hai phức chất platin(II) chứa metyleugenol và 8-hidroxiquinolin. 473

Synthesis, structure and biological activity of two platinum(II) complexes bearing methyleugenol and 8-hydroxyquinoline.

Nguyễn Thị Thanh Chi, Nguyễn Quỳnh Chi, Trần Thị Đà

- 99 Điều chế và tính chất của zeolit từ tro bay. 479

Preparation and characterization of zeolites from fly ash.

Bùi Văn Thắng, Nguyễn Hữu Nghị, Trần Thị Xuân Mai

- 100 Hấp phụ arsen trên vật liệu oxit hỗn hợp hệ Fe-Ti. 483

Arsenic adsorption on the nanosized Fe-Ti mixed oxide.

Lưu Minh Đại, Phạm Ngọc Chúc, Đào Ngọc Nhiệm, Nguyễn Đức Văn

- 101 Nano-oxit LaNiO_3 chế tạo bằng phương pháp sol-gel dùng trong điện cực nhạy khí của cảm biến điện hoá. 488

Nano-oxide LaNiO_3 with sol-gel synthesis utilized for gas sensing electrode of electrochemical gas sensor.

Nguyễn Đức Thọ, Đỗ Văn Hương, Phạm Quang Ngân, Đỗ Thị Thu, Đỗ Thị Anh Thư, Hồ Trường Giang, Hoàng Nam Nhật

- 102 Khảo sát quá trình điều chế sét hữu cơ từ bentonit (Trung Quốc) với tetradecyltrimetyl amoni bromua trong dung dịch rượu nước. 493

Investigation on the process of synthesis organoclays from bentonite (China) and tetradecyltrimethyl ammonium bromide in water-alcohol solution.

Phạm Thị Hà Thanh, Lý Thị Thêm

NGHIÊN CỨU PHẢN ỨNG BENZYL HÓA *p*-XYLEN BẰNG BENZYL CLORIT TRÊN XÚC TÁC Fe-BENTONIT

Nguyễn Lê Mỹ Linh^{1*}, Hoàng Văn Đức¹, Dương Tuấn Quang¹,
Lê Thị Hòa², Đinh Quang Khiếu², Nguyễn Hữu Phú³

¹Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

²Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

³Hội Xúc Tác và Hấp Phụ Việt Nam

Đến Toà soạn 28-4-2015; Chấp nhận đăng 10-6-2015

Abstract

The benzylation of *p*-xylene by benzyl chloride over Fe-bentonite was investigated. The influence of various parameters such as the ratio of $n_{p\text{-xylene}} / n_{\text{benzyl chloride}}$, the amount of the catalyst and temperature affecting the activity of the catalyst on the benzylation of *p*-xylene using benzyl chloride was investigated. The reaction kinetics of *p*-xylene over Fe-bentonite catalyst was also investigated. The results indicated that Fe-bentonite catalyst showed both high conversation and high selectivity for the benzylation of *p*-xylene.

Keywords. Fe-bentonite, benzylation, benzyl chloride, *p*-xylene.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Các phản ứng Friedel-Crafts được xem là một trong những phản ứng quan trọng nhất trong tổng hợp hữu cơ, đặc biệt là phản ứng benzyl hóa aren trong tổng hợp các dẫn xuất diaryl metan với xúc tác axit Lewis và Brønsted đồng thể. Tuy nhiên, việc sử dụng xúc tác đồng thể như AlCl_3 , H_2SO_4 , H_3PO_4 có nhiều nhược điểm như có nhiều phản ứng phụ (phản ứng polyalkyl hoá hay các phản ứng tái sắp xếp), sự ăn mòn, độc hại, hoàn nguyên xúc tác đồng thể khá khó khăn [1]. Do vậy, sự thay thế các xúc tác axit lỏng trong các phản ứng Friedel-Crafts bằng các xúc tác rắn là một hướng nghiên cứu triển vọng. Để khắc phục những nhược điểm của xúc tác đồng thể, nhiều loại xúc tác rắn đã được nghiên cứu, trong đó việc biến tính kim loại và oxit các loại trên các chất nền như bentonite, zeolit, MCM-41, MCM-48... đã được một số tác giả nghiên cứu [1-5].

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng vật liệu Fe-bentonite làm chất xúc tác trong phản ứng benzyl hóa *p*-xylen. Động học phản ứng và các yếu tố ảnh hưởng đến phản ứng benzyl hóa *p*-xylen sẽ được thảo luận.

2. THỰC NGHIỆM

2.1. Tổng hợp vật liệu Fe-bentonit

- Lấy dung dịch NaOH 0,1M chuẩn và dung dịch $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ theo tỉ lệ mol $\text{OH}^-/\text{Fe}^{3+}$ bằng 1,5, khuấy 2 giờ, làm già 24 giờ ở nhiệt độ phòng thu được dung dịch 1. Cho 1,0 g bentonit tinh chế vào 100 ml H_2O khuấy trong 5 h thu được huyền phù 2.

- Cho dung dịch 1 vào huyền phù 2, khuấy 24 giờ ở nhiệt độ phòng. Sản phẩm thu được bằng cách rửa, ly tâm nhiều lần và sấy ở 100 °C trong 10 giờ.

Mẫu tổng hợp được ký hiệu 1,5FeM.

2.2. Phản ứng benzyl hóa *p*-xylen bằng benzyl chlorid

Phản ứng benzyl hóa *p*-xylen bằng benzyl chloride được thực hiện trong bình cầu 2 cổ dung tích 250 ml, một cổ được nối vào hệ thống sinh hàn hồi lưu, một cổ được nút kín để dùng lấy lượng sản phẩm. Hệ thống bình cầu được đặt trên máy khuấy từ gia nhiệt. Cho m g Fe-bentonite vào bình cầu 2 cổ, sau đó cho V_1 ml *p*-xylen vào. Điều chỉnh nhiệt độ của hệ phản ứng ở nhiệt độ xác định, rồi cho tiếp V_2 ml benzyl chlorid vào bình cầu, xem đây là thời gian bắt đầu phản ứng. Độ chuyển hóa của benzyl chloride theo thời gian được xác định bằng phương pháp GC-MS. Độ chuyển hóa của benzyl chloride được tính theo công thức:

$$\text{Độ chuyển hóa (\%)} = \frac{S_o - S_t}{S_o} \cdot 100 \quad (1)$$

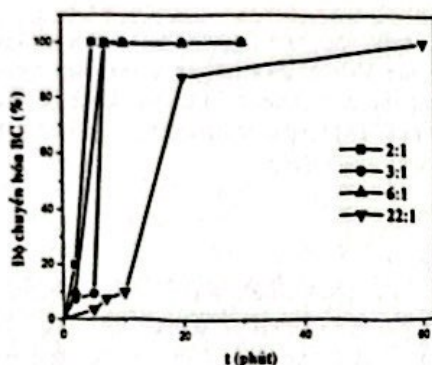
Trong đó S_0 và S_t lần lượt là diện tích pic của benzyl chloride tại thời điểm ban đầu và tại thời điểm t phản ứng.

Khảo sát các yếu tố ảnh hưởng đến phản ứng benzyl hóa p -xylene bằng benzyl clorit: tỉ lệ mol p -xylene: benzyl clorit (22:1, 6:1, 3:1, 2:1), hàm lượng chất xúc tác (0,01 g, 0,02 g, 0,05 g) và nhiệt độ phản ứng (70 °C, 80 °C, 90 °C).

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Các đặc trưng của vật liệu Fe-bentonit sẽ được trình bày ở một bài báo khác. Trong bài báo này, chúng tôi tập trung giới thiệu tính chất xúc tác của vật liệu Fe-bentonite đã tổng hợp.

3.1. Ảnh hưởng của tỉ lệ mol các chất phản ứng



Hình 1: Độ chuyển hóa benzyl clorit theo thời gian trên xúc tác 1,5FeM ở các tỉ lệ mol p -xylene và benzyl clorit khác nhau ($T = 343$ K, khối lượng chất xúc tác: 0,02 g)

Hình 1 trình bày độ chuyển hóa benzyl clorit theo thời gian trên xúc tác 1,5FeM ở các tỉ lệ mol p -xylene và benzyl clorit khác nhau. Sản phẩm phản ứng thu được cũng chỉ có sản phẩm thể một lần monoalkyl. Kết quả cho thấy khi tăng tỉ lệ mol p -xylene: benzyl clorit từ 22:1 đến 2:1, độ chuyển hóa của benzyl clorit tăng. Với tỉ lệ mol nhỏ 6:1 đến 2:1, độ chuyển hóa đạt gần 100% chỉ sau 10 phút. Ở tỉ lệ mol p -xylene: benzyl clorit 22:1, độ chuyển hóa benzyl chloride tăng nhẹ ở thời gian trước 10 phút, sau đó độ chuyển hóa tăng nhanh từ 10 đến 20 phút. Kết quả này cho thấy độ chuyển hóa benzyl clorit phụ thuộc nhiều vào tỉ lệ mol các chất tham gia phản ứng. Tỉ lệ mol p -xylene: benzyl clorit càng lớn, nghĩa là lượng p -xylene dư nhiều so với benzyl clorit, sự tiếp xúc giữa các chất tham gia phản ứng với các tâm xúc tác giảm dẫn đến độ chuyển hóa thấp. Tuy nhiên, để nghiên cứu động học phản ứng ở những phần tiếp theo, chúng tôi lựa chọn tỉ lệ mol p -xylene:

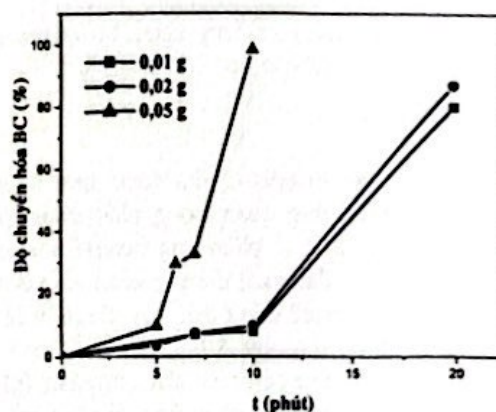
benzyl clorit là 22:1. Lúc này, nồng độ của p -xylene dư nhiều so với benzyl clorit nên tốc độ phản ứng thực tế xem như chỉ phụ thuộc vào nồng độ benzyl chloride.

3.2. Ảnh hưởng của lượng chất xúc tác và động học phản ứng

3.2.1. Ảnh hưởng của lượng chất xúc tác

Trong nghiên cứu này, khối lượng chất xúc tác thay đổi từ 0,01 đến 0,05 g. Kết quả khảo sát sự phụ thuộc của độ chuyển hóa benzyl clorit theo thời gian trình bày ở hình 2.

Từ hình 2 nhận thấy khi tăng hàm lượng chất xúc tác, độ chuyển hóa benzyl clorit tăng, sản phẩm thu được vẫn là monoalkyl. Điều này có thể giải thích là do khi tăng hàm lượng chất xúc tác, số tâm xúc tác tăng nên tương tác giữa các chất phản ứng với các tâm hấp phụ nhiều hơn, do đó độ chuyển hóa tăng.



Hình 2: Độ chuyển hóa benzyl clorit theo thời gian trên xúc tác 1,5FeM với hàm lượng chất xúc tác khác nhau ($T = 343$ K, tỉ lệ mol p -xylene:benzyl clorit 22:1)

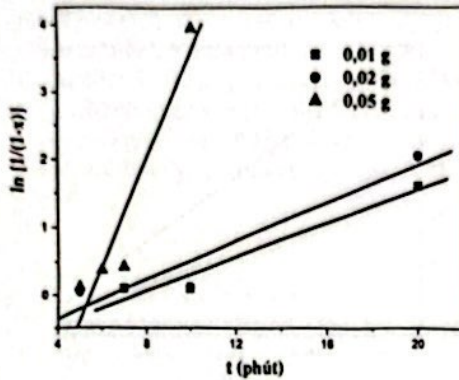
3.2.2. Động học phản ứng

Tại một nhiệt độ đã cho, tốc độ của phản ứng benzyl hóa p -xylene là hàm số phụ thuộc vào nồng độ của các chất tham gia phản ứng, lượng xúc tác và thời gian phản ứng. Tuy nhiên, trong điều kiện khảo sát, động học xem như chỉ phụ thuộc vào nồng độ benzyl chloride. Các dữ kiện động học của phản ứng benzyl hóa p -xylene khi cho dư p -xylene phù hợp với mô hình động học bậc nhất:

$$\ln\left(\frac{1}{1-x}\right) = k \cdot (t - t_0) \quad (2)$$

Trong đó, k (phút⁻¹) là hằng số tốc độ của phản ứng bậc 1, x là độ chuyển hóa của benzyl clorit, t là thời gian phản ứng (phút), t_0 thời gian cảm ứng (phút).

Đồ thị biểu diễn mối quan hệ $\ln[1/(1-x)]$ theo t được trình bày ở hình 3. Các tham số thu được từ phương trình động học bậc 1 của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM với hàm lượng khác nhau được tóm tắt ở bảng 1.



Hình 3: Đồ thị mô hình động học bậc 1 của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM với hàm lượng khác nhau (T = 343 K, tỉ lệ mol *p*-xylen:benzyl clorit 22:1)

Bảng 1: Các tham số thu được từ phương trình động học bậc 1 của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM

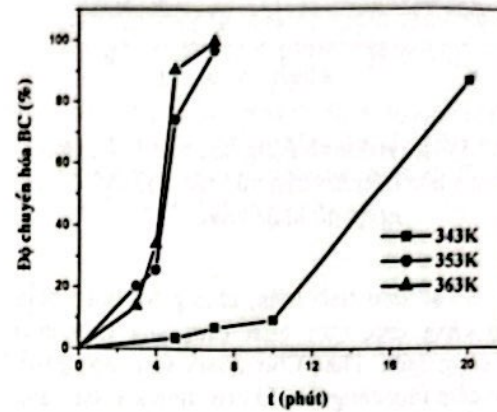
Khối lượng 1,5FeM (g)	Thời gian cảm ứng (phút)	Thời gian bán phân ứng, $\tau_{1/2}$ (phút)	k (phút ⁻¹)	R^2
0,01	7,7	8,4	0,126	0,954
0,02	6,6	11,4	0,142	0,919
0,05	5,5	6,2	0,805	0,904

Từ kết quả thu được nhận thấy khi tăng hàm lượng chất xúc tác, thời gian cảm ứng giảm và hằng số tốc độ phản ứng benzyl hóa *p*-xylen tăng. Với khối lượng chất xúc tác 0,05 g, hằng số tốc độ lớn nhất 0,805 phút⁻¹ tương ứng với thời gian bán phân ứng ngắn nhất 6,2 phút. Hằng số tốc độ của phản ứng này trong nghiên cứu của Hentit và cộng sự [6] trên xúc tác FAPO₄, Bachari và cộng sự [7] trên xúc tác Fe-HMS, Sn-HMS (tỉ lệ mol *p*-xylen: benzyl clorit 15:1, khối lượng xúc tác 0,1 g) lần lượt là 0,0477 phút⁻¹, 0,0275 phút⁻¹, 0,0238 phút⁻¹, nhỏ hơn khoảng 20 và 30 lần so với hằng số tốc độ trên xúc tác Fe-bentonite. Ngoài ra, trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng khối lượng chất xúc tác ít 0,01-

0,05 g so với các công bố khác thường sử dụng là 0,1 g. Đây là một kết quả khá quan trọng chứng tỏ xúc tác Fe-bentonit có hoạt tính cao.

3.3. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Hình 4 trình bày độ chuyển hóa của benzyl clorit theo thời gian trên xúc tác 1,5FeM ở các nhiệt độ khác nhau.

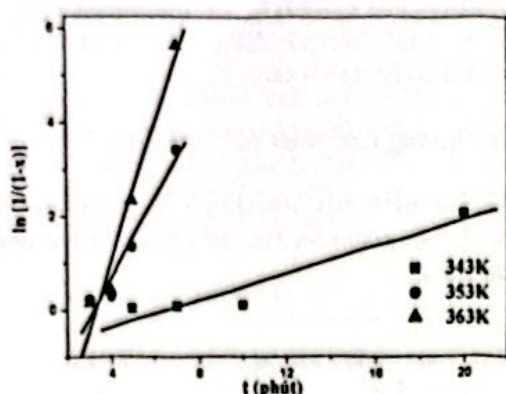


Hình 4: Độ chuyển hóa của benzyl clorit theo thời gian trên xúc tác 1,5FeM ở các nhiệt độ khác nhau (tỉ lệ mol *p*-xylen: benzyl clorit 22:1, khối lượng xúc tác 0,02 g)

Từ hình 4 nhận thấy độ chuyển hóa benzyl clorit tăng khi tăng nhiệt độ từ 343 đến 363 K trên cả hai xúc tác khảo sát. Sản phẩm dialkyl cũng không thấy xuất hiện trên phổ GC-MS. Như vậy, với các yếu tố đã khảo sát, sản phẩm duy nhất thu được trong phản ứng benzyl hóa *p*-xylen là BMDM. Thời gian để chuyển hóa hết 99 % benzyl clorit trên xúc tác 1,5FeM là 7 phút. Các dữ kiện thực nghiệm cho thấy mô hình động học bậc nhất phù hợp với phản ứng benzyl hóa *p*-xylen khi dư *p*-xylen. Hình 5 là đồ thị mô hình động học bậc nhất của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen ở các nhiệt độ khác nhau trên xúc tác khảo sát. Các tham số thu được từ phương trình động học bậc 1 được tóm tắt ở bảng 2.

Bảng 2: Các tham số thu được từ phương trình động học bậc 1 benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM

Nhiệt độ (K)	Thời gian cảm ứng (phút)	Thời gian bán phân ứng, $\tau_{1/2}$ (phút)	k (phút ⁻¹)	R^2
343	6,6	11,4	0,142	0,919
353	3,2	4,0	0,842	0,959
363	3,3	3,8	1,448	0,944



Hình 5: Đồ thị mô hình động học bậc 1 của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM ở các nhiệt độ khác nhau

Từ các số liệu tính toán, chúng tôi nhận thấy nhiệt độ càng cao, thời gian cảm ứng trên mẫu 1,5FeM càng ngắn. Theo Choudhary và cộng sự [4], thời gian cảm ứng càng dài thì hoạt tính xúc tác càng thấp. Sự tồn tại của thời gian cảm ứng là do các tâm xúc tác trong môi trường không khí ẩm bị hấp phụ bởi các phân tử nước. Sau đó, tiếp xúc với môi trường phản ứng thì benzyl clorit hay *p*-xylen hấp phụ cạnh tranh đẩy phân tử nước ra khỏi các tâm xúc tác nói trên nên nhiệt độ càng cao, độ ẩm càng nhỏ, thời gian cảm ứng càng ngắn. Điều này cho thấy mẫu 1,5FeM có hoạt tính xúc tác tốt ở nhiệt độ cao. Hoạt tính xúc tác cao của mẫu 1,5FeM còn thể hiện ở hằng số tốc độ lớn và thời gian bán phản ứng nhanh trong cùng điều kiện như trình bày ở Bảng 3. Nhiệt độ càng cao, thời gian bán phản ứng càng ngắn, cụ thể với xúc tác 1,5FeM, $\tau_{1/2}$ (phút) giảm theo nhiệt độ 343 K ($\tau_{1/2} = 11,4$ phút) > 353K (4,0 phút) > 363 K (3,8 phút). Trong khi đó, hằng số tốc độ càng tăng theo nhiệt độ, cụ thể với xúc tác 1,5FeM, k (phút⁻¹) tăng theo thứ tự 343K ($k = 0,142$ phút⁻¹) > 353 K (0,842 phút⁻¹) > 363K (1,488 phút⁻¹). So với kết quả công bố của các nghiên cứu khác, vật liệu 1,5FeM có hoạt tính xúc tác cao trong phản ứng benzyl hóa *p*-xylen.

Bảng 3: Hằng số tốc độ của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM và so sánh với một số kết quả của các tác giả khác

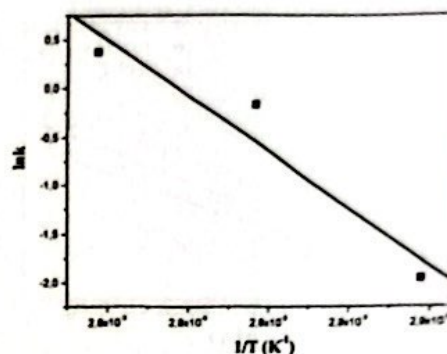
Chất xúc tác	k (phút ⁻¹)	Tài liệu tham khảo
FAPO ₄ -5	0,0477	[6]
Fe-HMS-50	0,0275	[7]
In ₂ O ₃ -H β zeolit	0,140	[]
1,5FeM	1,448	Nghiên cứu này

Năng lượng hoạt hóa

Từ bảng 3 nhận thấy khi tăng nhiệt độ, hằng số tốc độ k tăng. Do đó, dựa vào phương trình Arrhenius, ta tính được năng lượng hoạt hóa của phản ứng theo biểu thức:

$$\ln k = -\frac{E_a}{RT} + \ln A \quad (3)$$

Trong đó E_a là năng lượng hoạt hóa; k là hằng số tốc độ phản ứng, A là thừa số tần số.



Hình 6: Sự phụ thuộc lnk vào 1/T của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác 1,5FeM

Từ hình 6, năng lượng hoạt hóa của phản ứng trên xúc tác 1,5FeM tính được là 120,76 kJ/mol nên có thể kết luận phản ứng xảy ra trong miền động học. Chúng tôi không tìm thấy giá trị năng lượng hoạt hóa của phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên các xúc tác khác đã công bố nên không có sự so sánh. Tuy nhiên, năng lượng hoạt hóa của phản ứng benzyl hóa benzen thì có nhiều công bố. Lin và cộng sự [5] xác định được năng lượng hoạt hóa của phản ứng này trên xúc tác 8-FeZ và 2.5-FeZ lần lượt là 132,6 và 140,2 kJ/mol. Kết quả của chúng tôi chứng tỏ vật liệu Fe-bentonit có hoạt tính xúc tác cao trong phản ứng benzyl hóa *p*-xylen.

4. KẾT LUẬN

Vật liệu Fe-bentonit tổng hợp được là chất xúc tác tốt cho phản ứng benzyl hóa *p*-xylen với độ chọn lọc và độ chuyển hóa cao. Tốc độ phản ứng benzyl hóa *p*-xylen trên xúc tác Fe-bentonit tăng theo tỉ lệ mol các chất tham gia phản ứng, hàm lượng xúc tác và nhiệt độ. Năng lượng hoạt hóa của phản ứng này trên xúc tác Fe-bentonit xác định được 120,76 kJ/mol. Kết quả này mở ra triển vọng trong việc sử dụng bentonit Cố Định chống các polyme kim loại hay oligome kim loại làm chất xúc tác cho các phản ứng Friedel-Crafts tương tự.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. On D. T., Desplandier-Giscard D., Danumah C., Kaliaguine S. *Perspectives in catalytic applications of mesostructured materials*, Applied Catalysis A: General, **253**, 545-602 (2003).
2. Bachari K., Cherifi O. *Benzylation of benzene and other aromatics by benzyl chloride over copper-mesoporous molecular sieves materials*, Catalysis communications, **7**, 926-930 (2006).
3. Choudary B. M., Kantam M. L., Sateesh M., Rao K. K., Santhi P. L. *Iron pillared clays-efficient catalysts for Friedel-Crafts reactions*, Applied Catalysis A: General, **149**, 257-264 (1997).
4. Choudhary V. R., Jha R. *GaAlCl₂-grafted Mont.K-10 clay: Highly active and stable solid catalyst for the Friedel-Crafts type benzylation and acylation reactions*, Catalysis Communications, **9**, 1101-1105, (2008).
5. Lin T., Lang X., Li R., Bai T. Yang S. *Synergistic catalysts of isolated Fe³⁺ and Fe₂O₃ on FeO/HZSM-5 catalysts for Friedel-Crafts benzylation of benzene*, Chinese Chemical Letters, **22**, 639-642 (2011).
6. Hentit H., Bachari K., Ouali M. S., Womes M., Benaichouba B., J. C. Jumas. *Alkylation of benzene and other aromatics by benzyl chloride over iron-containing aluminophosphate molecular sieves*, Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, **275**, 158-166 (2007).
7. Bachari K., Millet J. M. M., Cherifi B., Cherifi O., *Benzylation of benzene by benzyl chloride over iron mesoporous molecular sieves materials*, Journal of Catalysis, **221**, 55-61 (2003).
8. Choudhary V. R., Jana S. K. *Benzylation of benzene by benzyl chloride over Fe-, Zn-, Ga- and In-modified ZSM-5 type zeolite catalysts*, Applied Catalysis A: General, **224**, 51-62 (2002).

Liên hệ: Nguyễn Lê Mỹ Linh

Khoa Hóa học, Trường Đại học sư phạm – Đại học Huế

34 - Lê Lợi, Huế

E-mail: linsophie309@yahoo.fr; Điện thoại: 0914 488 430