

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO TẬP ĐOÀN HÓA CHẤT VIỆT NAM

VIỆN HÓA HỌC CÔNG NGHIỆP VIỆT NAM

TRẦN QUANG THIÊN

**NGHIÊN CỨU ĐỘNG HỌC QUÁ TRÌNH KHỬ DDT BẰNG
PHƯƠNG PHÁP ĐIỆN HÓA VÀ HÓA HỌC**

CHUYÊN NGÀNH: HÓA LÝ THUYẾT VÀ HÓA LÝ

MÃ SỐ: 62.44.01.19

NGƯỜI HƯỚNG DẪN: PGS.TS LÊ XUÂN QUẾ

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ

HÀ NỘI - 2018

Phản biện 1:

Phản biện 2:

Phản biện 3:

Luận án sẽ được bảo vệ trước hội đồng chấm luận án cấp Viện họp
tại:

Vào hồi.....giờ, ngày..... tháng.....năm 2018

Có thể tìm hiệu luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam
- Thư viện viện Hóa học Công nghiệp Việt Nam.

MỞ ĐẦU

DDT là một trong những hợp chất gây ô nhiễm hữu cơ khó phân hủy POP (Persistent Organic Pollutant), được sử dụng làm thuốc bảo vệ thực vật (BVTV). Tuy nhiên, hàm lượng DDT tồn lưu tại Việt Nam và một số nước trên thế giới trong nông nghiệp, sử dụng trong chiến tranh... là rất lớn, đã ảnh hưởng đến môi trường sinh thái, sản phẩm nông nghiệp, đặc biệt là ảnh hưởng nghiêm trọng đến sức khỏe con người.

Trên thế giới đã có những nghiên cứu phân hủy DDT như phân hủy điện hóa DDT trong hệ dung môi như CH_3CN , chất điện li TMABF_4 ; phân hủy bằng bột sắt nano, sử dụng phương pháp sinh học, phương pháp vật lý.... Tuy nhiên, những nghiên cứu về động học phân hủy DDT vẫn còn rất hạn chế, đặc biệt là động học phân hủy điện hóa và hóa học. Vì vậy, chúng tôi lựa chọn đề tài “*Nghiên cứu động học quá trình khử DDT bằng phương pháp điện hóa và hóa học*”.

1. Mục đích tiêu nghiên cứu của luận án

Mục tiêu chung: xác định được động học quá trình khử DDT bằng phương pháp điện hóa và hóa học. Cụ thể:

- Xác định được quá trình khử DDT bằng phân cực vòng đa chu kì (Cyclic Voltammetry CV) trong hệ dung môi etanol-nước.
- Xác định động học quá trình khử DDT bằng phân cực thế tĩnh (Potentiostatic – PS).
- Xác định động học quá trình khử DDT bằng bột sắt.
- Áp dụng kết quả nghiên cứu khử DDT chiết tách từ đất ô nhiễm DDT tồn dư khu vực Hòn Trơ.

2. Nội dung nghiên cứu

- Nghiên cứu động học quá trình khử điện hóa DDT bằng phương pháp CV xác định các phản ứng khử dẫn suất của DDT và các điện thế phân cực tĩnh phù hợp.
- Nghiên cứu động học quá trình khử điện hóa DDT bằng phương pháp phân cực thế tĩnh PS.
- Nghiên cứu động học quá trình khử DDT trong dung dịch bằng bột sắt kim loại.
- Nghiên cứu áp dụng kết quả nghiên cứu khử DDT chiết tách từ đất ô nhiễm khu vực Hòn Trơ bằng bột sắt kim loại.

3. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của luận án

- Khử phân hủy DDT bằng bột sắt kim loại được chế tạo tại viện Kỹ thuật Nhiệt đới, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam đang được nghiên cứu ứng dụng trong xử lý môi trường đất ô nhiễm DDT. DDT là một trong những hợp chất POP có ảnh hưởng trực tiếp đến sức khỏe con

người, tác động trực tiếp đến môi trường và sinh vật. Vì vậy, việc nghiên cứu khử DDT có tính thời sự và thực tiễn.

- Khử điện hóa DDT trong hệ dung môi etanol góp phần ứng dụng công nghệ hiện đại trong xử lý môi trường, giúp kiểm soát được sản phẩm khử, hệ dung môi thân thiện với môi trường.

4. Điểm mới của luận án

- Đã khảo sát và đánh giá được quá trình khử DDT bằng phương pháp điện hóa CV trong hệ dung môi etanol + chất điện li CaCl_2 , bằng kỹ thuật vi phân xác định được 3 phản ứng điện hóa với quá trình khử DDT, tương ứng với các điện thế phản ứng -0,46 V (khử DDT), -1,32V (khử DDD) và -1,58V, thế tới hạn E_{gh} của mỗi phản ứng làm thế phân cực tĩnh, lấy kết quả đo CV làm cơ sở khoa học cho sự lựa chọn thế phân cực PS.

- Sử dụng phương pháp phân cực điện thế tĩnh khử DDT cho hiệu quả xử lý cao.

- Xác định được động học phản ứng khử DDT bằng bột sắt $\ln C_{\text{DDT}} = -0,456.t + 4,677$ trong phòng thí nghiệm và ứng dụng để khử DDT chiết tách từ đất ô nhiễm Hòn Trơ đạt kết quả tốt, khử được trên 90% tổng lượng DDT trong dịch chiết.

5. Bố cục của luận án

Luận án gồm 108 trang với 18 bảng biểu và 73 hình vẽ, được trình bày trong các phần: Mở đầu: 3 trang, Chương 1: Tổng quan: 28 trang, chương 2: Thực nghiệm và phương pháp nghiên cứu: 13 trang, Chương 3: Kết quả và thảo luận: 50 trang, Kết luận: 1 trang, Danh mục các công trình công bố của tác giả: 1 trang và tài liệu tham khảo: 12 trang.

NỘI DUNG CỦA LUẬN ÁN

CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN

Phần Tổng quan tập hợp và phân tích các nghiên cứu trong nước và quốc tế về các vấn đề liên quan đến nội dung luận án.

- 1.1. Thuốc bảo vệ thực vật DDT
- 1.2. Bột sắt kim loại
- 1.3. Phân hủy chất hữu cơ bằng bột sắt kim loại
- 1.4. Quá trình điện hóa khử hợp chất hữu cơ
- 1.5. Khử hóa học và điện hóa DDT

CHƯƠNG 2. THỰC NGHIỆM

Trình bày các nội dung liên quan đến quá trình nghiên cứu thực nghiệm của luận án.

2.1. Hóa chất và thiết bị

2.2. Phương pháp nghiên cứu

2.2.1. Phương pháp điện hóa

- Sử dụng phương pháp quét thế tuần hoàn (CV), phương pháp thế tĩnh khử điện hóa DDT.

2.2.2. Phương pháp phân tích POP

- Phân tích hàm lượng thành phần DDT bằng hệ GC/MS.

2.2.3. Phương pháp xử lý số liệu

- Xử lý số liệu bằng phương pháp hồi quy tuyến tính trên phần mềm excel 2007 và origin 9.0.

2.3. Các bước tiến hành

2.3.1. Chuẩn bị các dung dịch nghiên cứu

2.3.2. Nghiên cứu quá trình khử điện hóa DDT bằng phương pháp CV

- Nghiên cứu khử DDT bằng phân cực điện hóa CV với các dung dịch M00, M0-01, M0-03, M0-05, M1 với khoảng thế quét $-2,1 \div 0,0$ V, tốc độ quét 10mV/s, bước nhảy thế 0,001 V. Nghiên cứu quá trình khử điện hóa DDT và tác động của chất điện li, nước đến phổ CV của quá trình khử DDT.
- Tương quan dòng động học khử DDT với tốc độ quét: Quét CV 3 chu kỳ đối với 10 ml M5 với khoảng thế quét $-1,65 \div 0,0$ V tốc độ quét 5 mV/s, 10mV/s, 15 mV/s bước nhảy thế 0,001V.
- Tương quan dòng động học khử dẫn xuất DDT với nồng độ: Quét CV 3 chu kỳ đối với 10 ml M1, M2, M3, M4, M5 với khoảng thế quét $-1,65 \div 0,0$ V tốc độ quét 10 mV/s bước nhảy thế 0,001V.

2.3.3. Nghiên cứu quá trình khử điện hóa DDT bằng phương pháp thế tĩnh

- Khảo sát tác động của điện thế tĩnh đến dung dịch điện phân: Áp điện thế phân cực $-0,85$ V vào điện cực nghiên cứu, đo dòng đáp ứng i-t theo

thời gian của 10ml dung dịch M0 và M6. Thời gian điện phân 90, 120, 150 phút.

- Khảo sát ảnh hưởng của điện thế tĩnh -0,85V, -1,55V, -2,0V tới quá trình khử DDT trong thời gian 150 phút.

2.3.4. Nghiên cứu động học phân hủy DDT bằng phương pháp hóa học

Phản ứng khử xảy ra trong 5 bình phản ứng mỗi bình chứa 20ml dung dịch chứa các chất phản ứng đã được loại bỏ oxi. Thời gian phản ứng ở từng bình lần lượt là 1h, 2h, 4h, 6h, 8h, sau thời gian phản ứng kết thúc, lọc li tâm và phân tích hàm lượng thành phần DDT. Với các thí nghiệm:

- Ảnh hưởng của pH: Tiến hành thí nghiệm với pH = 3, 4 và 5.
- Ảnh hưởng của diện tích bề mặt sắt: Tiến hành thí nghiệm với hàm lượng bột sắt là 3,5g/L, 7g/L và 10,5g/L.
- Ảnh hưởng của tốc độ khuấy: Tiến hành thí nghiệm tương tự tốc độ khuấy tương ứng là 50, 100 và 150 vòng/phút.

2.3.5. Phân hủy DDT tách từ đất ô nhiễm bằng bột sắt kim loại

- Tiến hành tương tự như mục 2.3.4 với dịch chiết từ đất ô nhiễm có hàm lượng 401,8g/L.

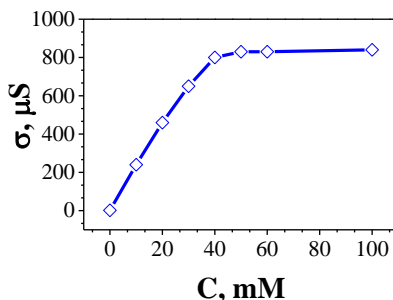
CHƯƠNG 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Nghiên cứu khử điện hóa DDT bằng phương pháp CV

3.1.1. Xác định phản ứng khử DDT

Kết quả đo độ dẫn điện của dung dịch với nồng độ của CaCl₂ khác nhau được giới thiệu trong bảng 3.1 và sự phụ thuộc của độ dẫn điện vào nồng độ của chất điện li được giới thiệu trên hình 3.1.

Nồng độ CaCl₂ càng tăng thì độ dẫn điện của dung dịch tăng.

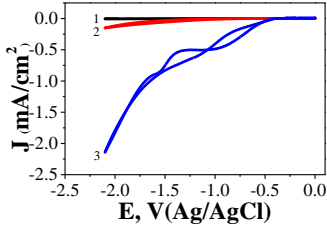


Hình 3.1. Sự phụ thuộc của độ dẫn điện dung dịch vào nồng độ của CaCl₂.

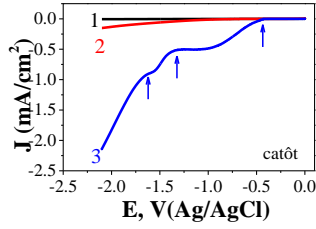
Bảng 3.1. Độ dẫn điện của dung dịch CaCl₂ trong C₂H₅OH.

Nồng độ CaCl ₂ (M)	0	0,01	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,1
Độ dẫn điện σ (μS/cm)	1,5	240	460	650	800	830	835	840

Phổ CV và đường catốt đo được của các mẫu M00, M0 và M1, chu kỳ 1, được giới thiệu trong hình 3.2 và 3.3.

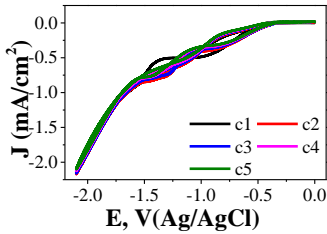


Hình 3.2. Phổ CV các dung dịch: 1 – M00, 2 – M0, 3 – M1.

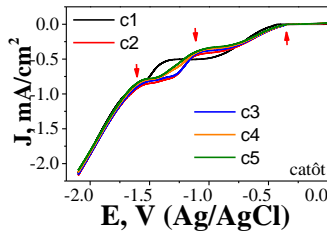


Hình 3.3. Đường catốt phổ CV các dung dịch 1 – M00, 2 – M0, 3 – M1.

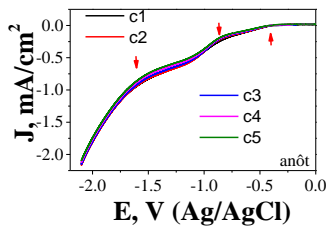
Nghiên cứu sự biến đổi của quá trình điện hóa với các chu kỳ quét khác nhau được thể hiện ở hình 3.4. Sự biến đổi dòng catốt (hình 3.5) và anốt (hình 3.6) theo số chu kỳ quét cho thấy, từ chu kỳ 1 đến chu kỳ 5 đều xuất hiện 3 phản ứng điện hóa.



Hình 3.4. Phổ CV chu kỳ 1 đến 5 của DDT.



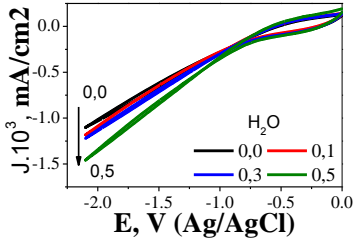
Hình 3.5. Đường catốt chu kỳ 1 đến 5 phổ CV của DDT.



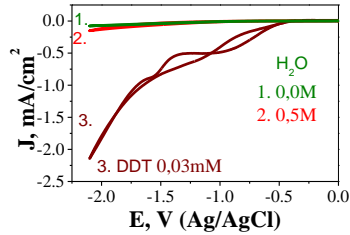
Hình 3.6. Đường anốt chu kỳ 1 đến 5 phổ CV của DDT.

Tuy nhiên, tại chu kỳ 1 sự biến đổi dòng và điện thế phản ứng có sự khác biệt so với các chu kỳ còn lại. Minh chứng là duy nhất nhánh catốt chu kỳ c1 có dòng khử lớn, còn các chu kỳ sau c2-c5 độ lặp lại cao, (hình 3.5 và 3.6).

3.1.2. Vai trò của nước với hệ dung môi etanol



Hình 3.7. Phổ CV đo trong dung dịch C_2H_5OH và $C_2H_5OH + xH_2O$ ở chu kỳ 1. Tốc độ quét $10mV/s$, khoảng thế quét $-2,1 \div 0,0V$.



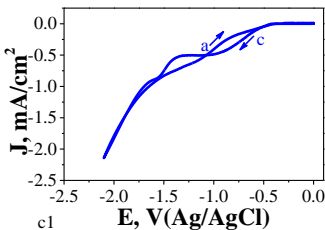
Hình 3.8. Phổ CV đo trong dung dịch C_2H_5OH , $C_2H_5OH + 0,5M H_2O$ và DDT ở chu kỳ 1. Tốc độ quét $10mV/s$, khoảng thế quét $-2,1 \div 0,0V$.

Mật độ dòng CV của M00 có và không có nước đều rất nhỏ cỡ μA ở phân cực lớn nhất $-2,1V$ và không xuất hiện thêm các pic anốt và catốt khi thay đổi nồng độ nước trong dung dịch, điều này cho thấy, nước không tham gia vào quá trình điện phân khi quét CV với dung môi etanol. Với mẫu M1, hàm lượng nước đến $0,5M$ không làm biến dạng đường CV (hình 3.8).

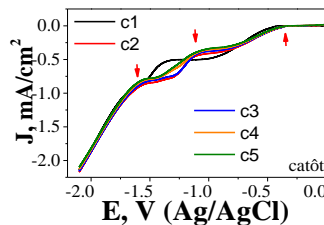
3.1.3. Xác định thế và dòng của phản ứng khử DDT

3.1.3.1. Định vị phản ứng khử DDT

Phổ phân cực CV khảo sát phản ứng khử dẫn xuất DDT, giữa các mẫu có (M1) và không có (M0) DDT đã được đánh giá trong 3.1. Kết quả đo phổ CV của mẫu M1, chu kỳ c1, được giới thiệu trong hình 3.9. Tuy nhiên dạng đường cong catốt chu kỳ 1 khác với 4 chu kỳ sau, hình 3.10.

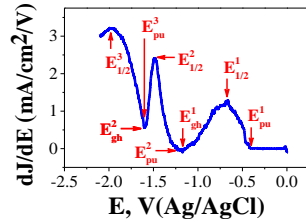


Hình 3.9. Phân cực CV chu kỳ 1.



Hình 3.10. Đường catốt phổ CV chu kỳ c1 đến c5,4 đường c2 đến c5 có dạng như nhau.

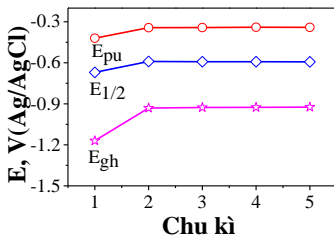
Kết quả xác định vi phân nhánh catốt (dJ/dE) được giới thiệu trong hình 3.11. Trên đường vi phân này dễ dàng xác định chính xác ba thể đặc trưng cho mỗi phản ứng: E_{pu} , thể bán sóng $E_{1/2}$ và thể xuất hiện dòng tới hạn E_{gh} . Lưu ý là E_{gh} của phản ứng trước lại chính là E_{pu} của phản ứng sau: $E_{gh}^1 = E_{pu}^2$



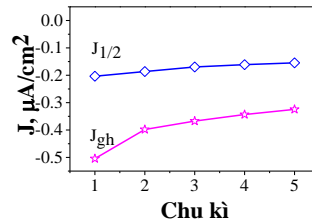
Hình 3.11. Vi phân dJ/dE đường catốt c1,3 pic là 3 bán sóng $E_{1/2}$ của 3 phản ứng 1–3.

3.1.3.2. Xác định thế và dòng phản ứng 1

Kết quả xác định thế phản ứng E_{pu} , thế điểm tới hạn E_{gh} , thể bán sóng $E_{1/2}$ tại các chu kì khác nhau của phản ứng được giới thiệu trong hình 3.12, hình 3.13.



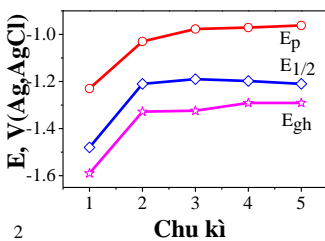
Hình 3.12. Biến thiên các giá trị thế đặc trưng phản ứng 1 nhánh catốt theo số chu kì quét.



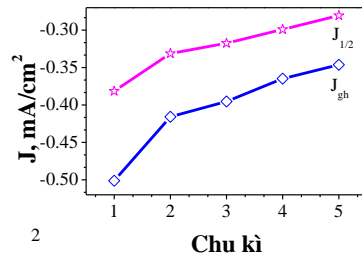
Hình 3.13. Biến thiên các giá trị dòng đặc trưng phản ứng 1 nhánh catốt theo số chu kì quét..

3.1.3.3. Xác định thế và dòng của phản ứng 2

Tương tự như phản ứng 1, kết quả xác định thế và dòng động học của các phản ứng 2 được giới thiệu trên hình 3.14 và 3.15.



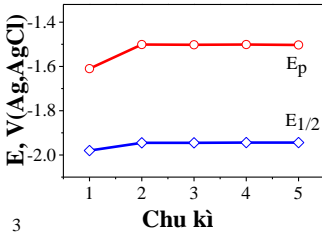
Hình 3.14. Biến thiên các giá trị thế đặc trưng phản ứng 2 nhánh catốt theo số chu kì quét.



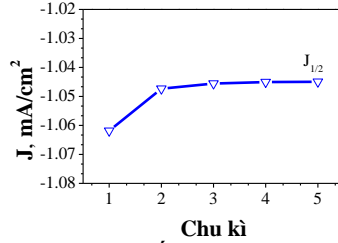
Hình 3.15. Biến thiên các giá trị dòng đặc trưng phản ứng 2 nhánh catốt theo số chu kì quét..

3.1.3.4. Xác định thế và dòng của phản ứng 3

Tương tự như phản ứng 1, kết quả xác định thế và dòng động học của các phản ứng 2 được giới thiệu trên hình 3.16 và 3.17.



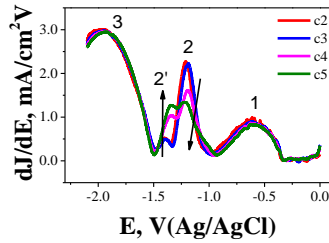
Hình 3.16. Biến thiên các giá trị thế đặc trưng phản ứng 3 nhánh catốt theo số chu kỳ quét.



Hình 3.17. Biến thiên các giá trị dòng đặc trưng phản ứng 3 nhánh catốt theo số chu kỳ quét..

3.1.3.5. So sánh các phản ứng khử dẫn xuất DDT

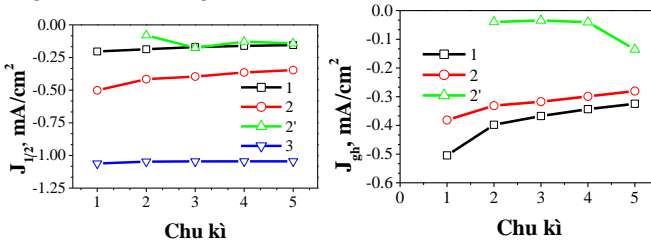
Bắt đầu từ chu kỳ 2 trên đường vi phân có thể nhận biết đến 4 phản ứng khử dẫn xuất DDT đặc trưng bởi 4 cực đại dJ/dE , phản ứng mới xuất hiện được ký hiệu là 2', hình 3.18. Việc xuất hiện thêm phản ứng 2' trên đường dJ/dE c2 cho thấy có thể đó là phản ứng thứ cấp của sản phẩm phản ứng trước đó, hoặc phản ứng trước nữa từ chu kỳ c1.



Hình 3.18. Vi phân dJ/dE nhánh catốt phổ CV, chu kỳ c2 đến c5.

❖ Dòng J đặc trưng của các phản ứng

Sự biến đổi dòng động học J của các phản ứng từ 1 đến 3 theo chu kỳ CV được giới thiệu trong hình 3.19.



Hình 3.19. Biến thiên $J_{1/2}$ và J_{gh} phản ứng catốt theo số chu kỳ quét.

Tương tự như thế phản ứng, chu kỳ c1 dòng động học nhỏ, sau đó tăng theo số chu kỳ CV, đặc biệt là J_{gh} .

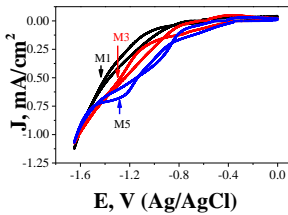
3.3.3.6. Thảo luận

Quá trình khử DDT xuất hiện 4 phản ứng điện hóa, cho thấy quá trình khử điện hóa các dẫn xuất DDT là chuỗi phản ứng phức tạp. Quá trình khử DDT nhận 2e tạo thành DDD, quá trình này ứng với phản ứng 1 được xác định trên đường phân cực CV. Quá trình điện hóa thứ 2 được xác định như là quá trình khử điện hóa DDD. Ngoài ra, phản ứng 2' có thể là phản ứng thứ cấp của sản phẩm phản ứng khử DDT và DDD.

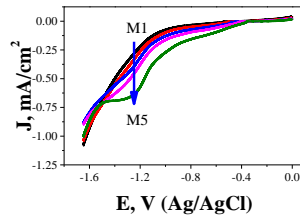
3.1.4. Tương quan dòng khử dẫn xuất DDT với nồng độ và tốc độ quét

3.1.4.1. Ảnh hưởng của nồng độ DDT

Kết quả đo phân cực CV với nồng độ DDT khác nhau được giới thiệu hình 3.20. Tăng nồng độ ban đầu của DDT thì mật độ dòng catốt và anốt đều tăng theo.

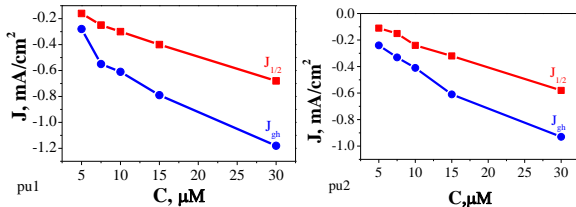


Hình 3.20. Phổ CV chu kì 1 mẫu M1, M3, M5.

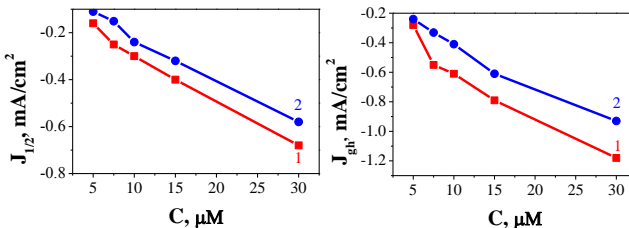


Hình 3.21. Đường catốt phổ CV chu kì 1, mẫu M1-M5.

Sự phụ thuộc của dòng động học của từng phản ứng 1 và 2 vào nồng độ được giới thiệu trong hình 3.22.



Hình 3.22. Sự phụ thuộc của dòng động học vào nồng độ DDT.

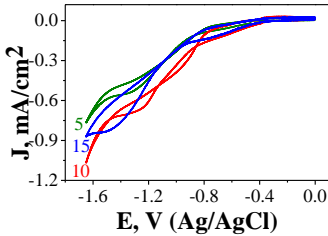


Hình 3.23. So sánh dòng động học hai phản ứng 1 và 2, theo nồng độ DDT khác nhau.

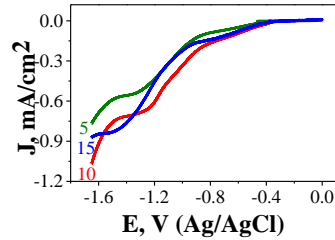
Nồng độ DDT tác động mạnh tới dòng động học, dòng bán sóng $J_{1/2}$ và dòng tới hạn J_{gh} tăng mạnh khi nồng độ của DDT tăng, hình 3.23.

3.3.4.2. Ảnh hưởng của tốc độ quét

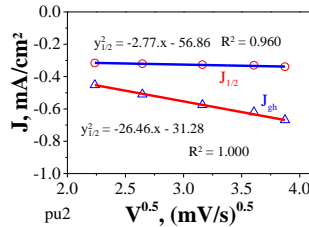
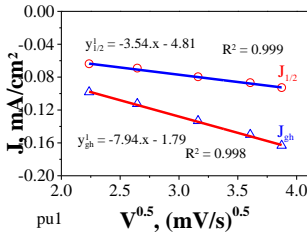
Phổ CV với tốc độ quét khác nhau được giới thiệu trên hình 3.24. Tốc độ quét 5 mV/s có mật độ dòng thấp nhất. Việc xác định các dòng động học của các phản ứng khử dẫn xuất DDT được xác định trên nhánh catốt, hình 3.25 giới thiệu nhánh catốt chu kỳ c1.



Hình 3.24. Phổ CV chu kỳ 1 với tốc độ quét khác nhau.



Hình 3.25. Nhánh catốt phổ CV chu kỳ c1, mẫu M5, tốc độ quét khác nhau.



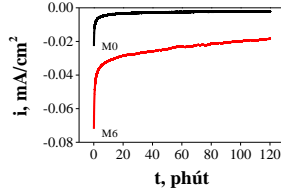
Hình 3.26. Sự phụ thuộc dòng động học phản ứng J vào $v^{0.5}$.

Đối với phản ứng 1, dòng bán sóng có sự phụ thuộc theo phương trình $y = -3,54.x - 4,81$ với hệ số tương quan $R^2 = 0,999$, dòng tới hạn có sự phụ thuộc theo phương trình $y = -7,94.x - 1,79$ với hệ số tương quan tương ứng là $R^2 = 0,998$. Đối với phản ứng 2, dòng bán sóng có sự phụ thuộc theo phương trình $y = -2,77.x - 56,86$ với hệ số tương quan $R^2 = 0,960$, dòng tới hạn có sự phụ thuộc theo phương trình $y = -26,46.x - 31,28$ với hệ số tương quan tương ứng là $R^2 = 1,000$, hình 3.26.

3.2. Nghiên cứu quá trình khử hóa DDT bằng phương pháp thế tĩnh

3.2.1. Khử điện hóa DDT tại điện thế tĩnh -0,85V

Với điện thế tĩnh -0,85V, thời gian điện phân 120 phút, đường cong đáp ứng $i-t$ khi tiến hành điện phân 10ml dung dịch M0 và 10ml dung dịch M6 được giới thiệu trên hình 3.27.

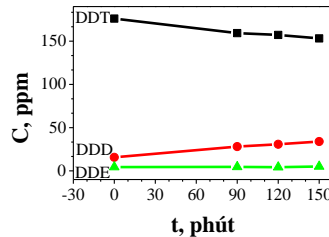


Hình 3.27. Đường cong đáp ứng $i-t$, thế tĩnh -0,85V, dung dịch M0, M6. Thời gian điện phân 120 phút.

Sau các thời gian (90, 120 và 150 phút) điện phân với thế tĩnh -0,85V mẫu dung dịch được phân tích các thành phần DDT (DDD, DDE và DDT). Kết quả hàm lượng thành phần DDT được giới thiệu trong bảng 3.2 và hình 3.28. Khi thời gian điện phân tăng lên, hàm lượng các chất DDT giảm, hàm lượng DDD và DDE tăng trong các thời gian điện phân 90, 120 và 150 phút, sự biến đổi hàm lượng DDE là rất nhỏ so với DDT, DDD trong quá trình điện phân tại điện thế -0,85V. Kết quả này cho thấy, tại điện thế -0,85V xảy ra quá trình điện phân DDT. Suy giảm hàm lượng DDT, DDD và DDE sau các thời gian điện phân 90, 120 và 150 phút được giới thiệu trên hình 3.29.

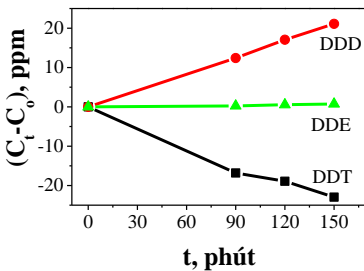
Bảng 3.2. Hàm lượng các thành phần DDT sau các thời gian điện phân., điện thế điện phân -0,85V.

Thời gian (phút)	Hàm lượng (ppm)		
	DDT	DDD	DDE
0	176,10	15,71	4,38
90	159,28	31,11	4,62
120	157,18	32,78	4,92
150	153,14	36,81	5,12



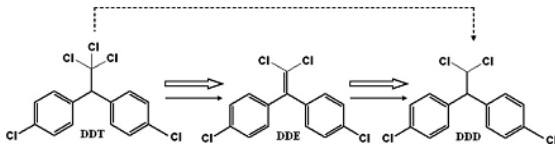
Hình 3.28. Hàm lượng DDT, DDD, DDE sau thời gian điện phân. Điện thế tĩnh -0,85V.

Kết quả cho thấy, độ giảm hàm lượng DDT càng lớn thì độ tăng hàm lượng DDD càng lớn. Tuy nhiên, độ suy giảm hàm lượng DDE tăng nhưng rất nhỏ, gần như bằng 0.



Hình 3.29. Độ suy giảm hàm lượng các chất tại các thời gian điện phân khác nhau. Điện thế tĩnh -0,85V.

Kết quả này cho thấy, tại điện thế tĩnh $-0,85V$ sự hình thành và chuyển hóa DDE bằng con đường điện hóa xảy ra ở mức độ thấp. Điều này được Adi Setyo Purnomo và cộng sự giải thích là trong quá trình phân hủy DDT, DDD và DDE có sự chuyển hóa lẫn nhau theo quá trình được giới thiệu trên hình 3.30. Kết quả này cho thấy, quá trình khử điện hóa DDT tại điện thế tĩnh $-0,85V$ đồng thời xảy ra quá trình chuyển hóa hóa học trong cân bằng trên hình 3.30 và quá trình khử điện hóa DDT.



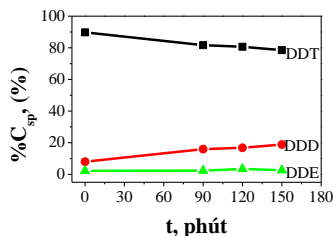
Hình 3.30. Quá trình chuyển hóa DDT, DDE và DDD [91].

3.2.2. Ảnh hưởng của quá trình khử điện hóa đến tỉ lệ thành phần DDT

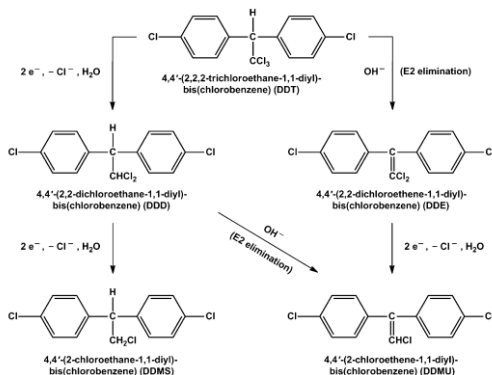
Tỷ lệ % hàm lượng các sản phẩm DDT trước và sau điện phân được giới thiệu trong bảng 3.3. Sự phụ thuộc của tỷ lệ % sản phẩm theo thời gian được giới thiệu trên hình 3.31.

Bảng 3.3. Tỷ lệ % thành phần DDT theo thời gian t.

Thời gian (phút)	% Hàm lượng thành phần DDT (%)		
	DDT	DDD	DDE
0	89,76	8,01	2,23
90	81,68	15,95	2,37
120	80,65	16,82	3,4
150	78,51	18,87	2,62



Hình 3.31. Tỷ lệ % hàm lượng sản phẩm DDT, DDD, DDE sau các thời gian điện phân. Điện thế tĩnh $-0,85V$.



Hình 3.32. Sơ đồ chuyển hóa DDT [79].

3.2.3. Ảnh hưởng của điện thế điện phân đến tỷ lệ thành phần DDT

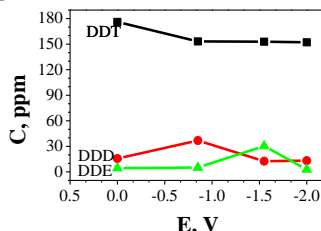
Tiến hành nghiên cứu ảnh hưởng của điện thế điện phân đến tỷ lệ % hàm lượng các sản phẩm sau thời gian điện phân 150 phút được tiến hành nghiên cứu tương tự như tiến hành ở điện thế -0,85V. Các điện thế tại điện thế tới hạn (-0,85, -1,55V) của các phản ứng được xác định tại mục 3.1 và giá trị điện thế cao tại -2,0V. Kết quả phân tích hàm lượng DDT, DDD và DDE tại các điện thế điện phân -1,55V và -2,0V được giới thiệu trong bảng 3.4. Sự biến đổi hàm lượng DDT, DDD và DDE theo thế điện phân được giới thiệu trên hình 3.34. Kết quả cho thấy, sau 150 phút điện phân hàm lượng của DDT tại các điện thế điện phân gần như nhau, đều giảm so với nồng độ DDT ban đầu. Tuy nhiên, nồng độ của DDD và DDE tại các điện thế điện phân là khác nhau. Suy giảm hàm lượng DDT, DDD và DDE tại các điện thế tĩnh, thời gian điện phân 150 phút được giới thiệu trong bảng 3.5. Sự biến đổi của độ suy giảm theo điện thế được giới thiệu trên hình 3.34.

Bảng 3.4. Hàm lượng thành phần DDT tại các điện thế điện phân. Thời gian điện phân 150 phút, nồng độ ban đầu DDT là 176,10, DDD là 15,71 DDE là 4,38 ppm.

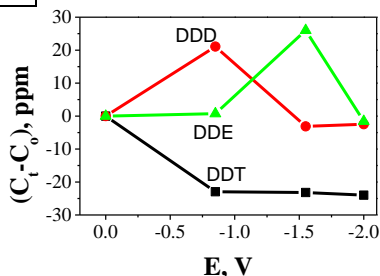
Điện thế (V)	Hàm lượng (ppm)		
	DDT	DDD	DDE
-0,85	153,14	36,81	5,12
-1,55	152,91	13,66	30,38
-2,0	152,12	13,24	2,81

Bảng 3.5. Độ suy giảm hàm lượng thành phần DDT tại các điện thế điện phân.

Điện thế (V)	$(C_t - C_0)$ (ppm)		
	DDT	DDD	DDE
-0,85	-	21,1	0,74
-1,55	-	-2,04	26,01
-2,0	-	-2,47	-1,57



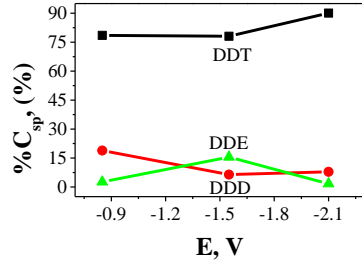
Hình 3.33. Hàm lượng DDT, DDD, DDE tại các điện thế điện phân. Thời gian điện phân 150 phút.



Hình 3.34. Độ suy giảm hàm lượng các chất tại điện thế tĩnh. Thời gian 150 phút.

Bảng 3.6. Phần trăm hàm lượng sản phẩm tại các điện thế điện phân. Thời gian điện phân 150 phút. Phần trăm thành phần DDT, DDD, DDE ban đầu lần lượt là 89,76%, 8,01% và 2,23%.

Điện thế (V)	Thành phần phần trăm sản phẩm (%)		
	DDT	DDD	DDE
-0,85	78,51	18,87	2,62
-1,55	77,63	6,94	15,43
-2,0	90,05	7,87	1,67



Hình 3.35. Tỷ lệ % hàm lượng sản phẩm DDT, DDD, DDE tại các điện thế tĩnh -0,85V, -1,55V và -2,0V. Thời gian điện phân 150 phút.

Kết quả cho thấy, sự biến đổi hàm lượng các chất DDT, DDD, DDE tại các điện thế điện phân khác nhau là khác nhau. Sự phụ thuộc của % hàm lượng thành phần DDT vào điện thế tĩnh được giới thiệu trên hình 3.35. Hiệu suất của quá trình khử DDT, DDD và DDE tại các điện thế tĩnh, thời gian điện phân 150 phút được giới thiệu trên bảng 3.7. Kết quả này cho thấy, với điện thế -2,0V hiệu suất tổng khử các thành phần DDT lớn nhất đạt 65,23% do tại điện thế này xảy ra quá trình điện phân các thành phần DDT, hiệu suất phân hủy cao nhất. Tại điện thế -0,85V, hiệu suất tổng đạt thấp nhất do chỉ có phân hủy thành phần DDT trong dung dịch.

Bảng 3.7. Hiệu suất của quá trình điện phân tại điện thế tĩnh, thời gian 150 phút. Nồng độ ban đầu DDT là 176,10, DDD là 15,71 DDE là 4,38 ppm.

Điện thế (V)	Hiệu suất (%)		
	DDT	DDD	DDE
-0,85	13,04	-	-
-1,55	13,17	12,98	-
-2,0	13,67	15,72	35,84

3.3. ĐỘNG HỌC PHÂN HỦY DDT BẰNG PHƯƠNG PHÁP HÓA HỌC

3.3.1. Ảnh hưởng của pH

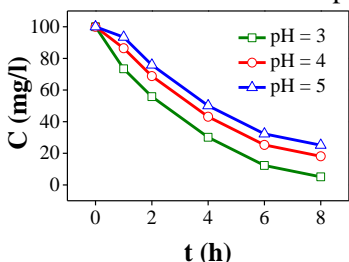
3.3.1.1. Khảo sát điều kiện pH tối ưu

Tiến hành khảo sát điều kiện pH tối ưu cho quá trình phân hủy DDT bằng bột sắt kim loại, chúng tôi tiến hành khảo sát tại các giá trị pH là 3, 4 và 5. Kết quả phân tích nồng độ DDT tổng khi thay đổi pH của dung dịch tại các thời điểm khác nhau được giới thiệu trên bảng 3.8 và sự biến đổi nồng độ DDT theo thời gian được giới thiệu trên hình 3.36.

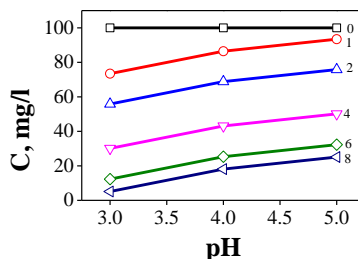
Bảng 3.8. Nồng độ của DDT tổng khi thay đổi pH dung dịch. Hàm lượng sắt 7g/L, tốc độ khuấy 150 vòng/phút.

Giá trị pH	Nồng độ DDT tổng (mg/L)					
	0 giờ	1 giờ	2 giờ	4 giờ	6 giờ	8 giờ
3	100	73,44	55,82	30,93	13,95	6,74
4	100	86,35	68,70	42,94	25,09	18,04
5	100	93,33	77,57	51,88	33,97	25,94

Kết quả cho thấy, thời gian phản ứng tăng nồng độ DDT tổng giảm, pH càng tăng thì nồng độ DDT tổng sau các thời điểm phản ứng tăng. Tại cùng một thời gian phản ứng, nồng độ DDT tổng thay đổi nhiều nhất khi pH biến đổi từ 3 đến 4 và nhỏ nhất khi pH biến đổi từ 4 đến 5.



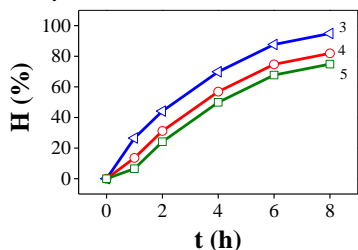
Hình 3.36. Hàm lượng DDT tại các thời điểm khác nhau khi thay đổi pH.



Hình 3.37. Biến thiên nồng độ DDT tổng theo pH tại các thời gian phản ứng khác nhau.

Kết quả từ hình 3.36 cho thấy, mỗi giai đoạn phản ứng khác nhau thì nồng độ DDT tổng biến đổi khác nhau. Tốc độ phản ứng xảy ra nhanh nhất với pH = 3, nhỏ nhất với pH = 5.

Khi tăng pH của dung dịch càng tăng, khả năng khử của bột sắt càng giảm. Hiệu suất phân hủy DDT tổng theo thời gian với pH = 3, 4, 5 được giới thiệu trên hình 3.38.



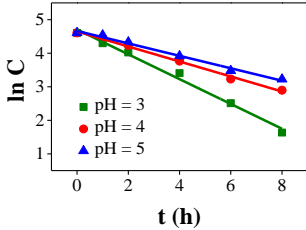
Hình 3.38. Hiệu suất phân hủy DDT tại thời điểm t, với pH khác nhau.

Tại các thời điểm khác nhau, hiệu suất của quá trình phân hủy DDT khi thay đổi pH cũng khác nhau, hiệu suất đạt cao nhất trong khoảng thời gian 4 giờ đầu tiên của phản ứng, 4 giờ tiếp theo hiệu suất phản ứng giảm mạnh và đi vào ổn định.

3.3.1.2. Ảnh hưởng của pH đến động học phân hủy DDT

❖ Phương trình động học của phản ứng

Kết quả khảo sát sự phụ thuộc $\ln C_{DDT}$ vào thời gian t được giới thiệu trên hình 3.39.



Phương trình trùng phương biểu thị mối quan hệ giữa $\ln C_{DDT, pH}$ và thời gian tương ứng là:

$$\ln C_{DDT, pH = 3} = -0,370.t + 4,706$$

$$R^2 = 0,989$$

$$\ln C_{DDT, pH = 4} = -0,224.t + 4,647$$

$$R^2 = 0,994$$

$$\ln C_{DDT, pH = 5} = -0,185.t + 4,663$$

$$R^2 = 0,988$$

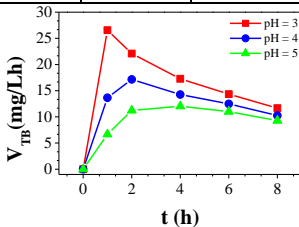
Hình 3.39. Sự phụ thuộc của $\ln C_{DDT}$ vào thời gian t khi thay đổi pH.

❖ Tốc độ trung bình khử DDT tổng

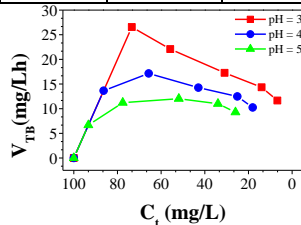
Kết quả xác định tốc độ trung bình của phản ứng ở thời gian t được giới thiệu trong bảng 3.9 và sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào thời gian được giới thiệu trên hình 3.40. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng khử DDT ở các giá trị pH khác nhau vào nồng độ của DDT ở thời điểm t được giới thiệu trên hình 3.41.

Bảng 3.9. Tốc độ trung bình phản ứng khử DDT theo thời gian. Hàm lượng sắt 7g/L, tốc độ khuấy 150 vòng/phút.

Giá trị pH	Tốc độ trung bình(mg/Lh)					
	0 giờ	1 giờ	2 giờ	4 giờ	6 giờ	8 giờ
3	0	26,56	22,09	17,27	14,34	11,66
4	0	13,66	17,15	14,27	12,48	10,25
5	0	6,67	11,22	12,03	11,01	9,28



Hình 3.40. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào thời gian phản ứng t . Hàm lượng sắt 7g/L, tốc độ khuấy 150 vòng/phút.



Hình 3.41. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào nồng độ phản ứng ở thời điểm t . Hàm lượng sắt 7g/L, tốc độ khuấy 150 vòng/phút.

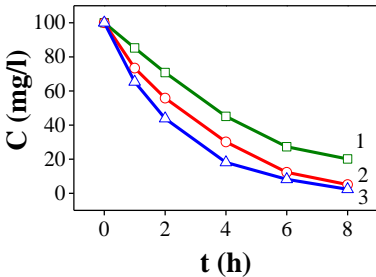
3.3.2. Ảnh hưởng của hàm lượng bột sắt

3.3.2.1. Khảo sát điều kiện tối ưu

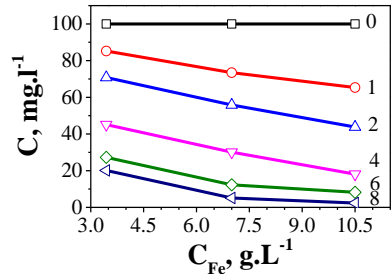
Để xác định hàm lượng bột sắt phù hợp nhất và đánh giá được ảnh hưởng của bột sắt đến hiệu suất và tốc độ khử DDT 100mg/L, thí nghiệm này được khảo sát với hàm lượng sắt trong dung dịch là 3,5g/L, 7,0 g/L và 10,5g/L (tương đương với diện tích tiếp xúc của bột sắt kim loại là 0,532; 1,064; 1,586 m²/L) trong điều kiện không có oxi không khí để nghiên cứu tốc độ phản ứng khử hóa DDT, pH = 3, tốc độ khuấy 150 vòng/phút.

Bảng 3.10. Nồng độ của DDT tổng khi thay đổi hàm lượng bột sắt trong dung dịch. Tốc độ khuấy 150 vòng/phút, pH = 3.

Hàm lượng bột sắt (g/L)	Nồng độ DDT tổng (mg/L)					
	0 giờ	1 giờ	2 giờ	4 giờ	6 giờ	8 giờ
3,5	100	85,24	70,82	45,12	27,38	20,21
7,0	100	73,44	55,82	30,25	12,29	5,12
10,5	100	65,34	43,82	18,14	8,23	2,96

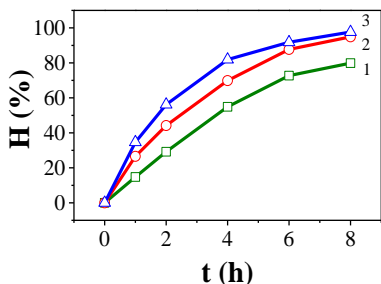


Hình 3.42. Hàm lượng DDT tại các thời điểm khác nhau, hàm lượng sắt tương ứng là 1 – 3,5g/L, 2 – 7g/L, 3 – 10,5g/L.



Hình 3.43. Biến thiên nồng độ DDT tổng theo hàm lượng sắt tại các thời điểm khác nhau.

Kết quả cho thấy, khi thay đổi hàm lượng bột sắt tăng, thời gian phản ứng tăng nồng độ DDT tổng giảm. Tại cùng một thời điểm phản ứng, khi tăng hàm lượng bột sắt, nồng độ DDT tổng giảm. Mỗi giai đoạn phản ứng khác nhau thì nồng độ DDT tổng giảm là khác nhau.



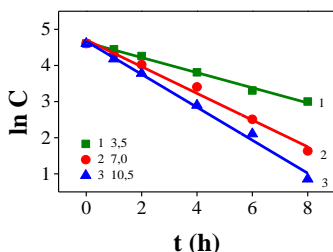
Hình 3.44. Hiệu suất phân hủy DDT tại thời điểm t , hàm lượng bột sắt khác nhau 1 – 3,5; 2 – 7; 3 – 10,5g/L.

Tại các thời điểm khác nhau, hiệu suất của quá trình phân hủy DDT khi hàm lượng bột sắt thay đổi cũng khác nhau, hiệu suất đạt cao nhất trong khoảng thời gian 4 giờ đầu tiên của phản ứng, 4 giờ tiếp theo hiệu suất phản ứng giảm mạnh và đi vào ổn định. Với hàm lượng bột sắt 10,5 g/L, hiệu suất phản ứng cao nhất và hiệu suất thấp nhất với hàm lượng bột sắt 3,5 g/L.

3.3.2.2. Ảnh hưởng của hàm lượng bột sắt đến động học phân hủy DDT

❖ Phương trình động học của phản ứng

Kết quả khảo sát sự phụ thuộc $\ln C$ vào thời gian t được giới thiệu trên hình 3.45.



Hình 3.45. Sự phụ thuộc của $\ln C_{DDT, m}$ vào thời gian khi thay đổi hàm lượng bột sắt.

Phương trình trùng phương biểu thị mối quan hệ giữa $\ln C_{DDT, m}$ vào thời gian tương ứng là:

$$\ln C_{DDT, 3,5} = -0,209.t + 4,637$$

$$R^2 = 0,994$$

$$\ln C_{DDT, 7,0} = -0,370.t + 4,706$$

$$R^2 = 0,989$$

$$\ln C_{DDT, 10,5} = -0,456.t + 4,668$$

$$R^2 = 0,992$$

Kết quả nghiên cứu sự phụ thuộc của hằng số tốc độ phản ứng vào hàm lượng sắt cho thấy, khi tăng hàm lượng sắt, giá trị k' tăng. Với S_{Fe} là diện tích tiếp xúc của sắt, kết quả này cho thấy hằng số k của phản ứng được xác định dựa vào giá trị $k = k'/S_{Fe}$. Hằng số tốc độ k được xác định trong bảng 3.11. Tốc độ trung bình của phản ứng khử DDT khi thay đổi hàm lượng bột sắt tại thời gian phản ứng khác nhau được giới thiệu trên bảng 3.12 và sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào thời gian phản ứng được giới thiệu trên hình 3.46. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng khử DDT ở các giá trị hàm lượng bột sắt khác nhau vào nồng độ của DDT ở thời điểm t (C_t) được giới thiệu trên hình 3.47.

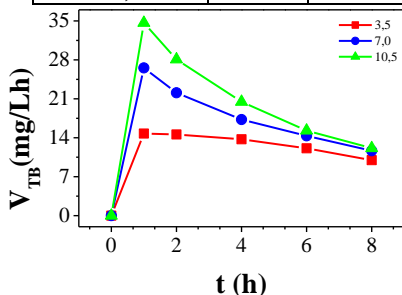
Bảng 3.11. Hằng số tốc độ quá trình chuyển hóa DDT theo diện tích tiếp xúc kim loại sắt.

Hằng số phản ứng	$S_{Fe}, m^2.L^{-1}$		
		0,532	1,064
k'	0,209	0,370	0,456
k	0,342		

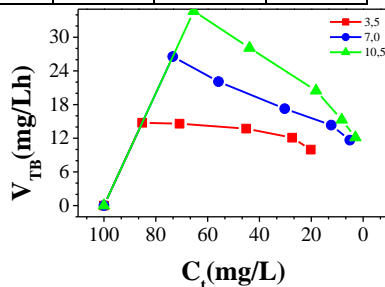
❖ Tốc độ trung bình khử DDT tổng

Bảng 3.12. Tốc độ trung bình phản ứng khử DDT theo thời gian. Tốc độ khuấy 150 vòng/phút, pH = 3.

Hàm lượng bột sắt (mg/L)	Tốc độ trung bình(mg/Lh)					
	0 giờ	1 giờ	2 giờ	4 giờ	6 giờ	8 giờ
3,5	0	14,76	14,59	13,72	12,10	9,97
7,0	0	26,56	22,09	17,27	14,34	11,66
10,5	0	34,66	28,09	20,47	15,29	12,13



Hình 3.46. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào thời gian phản ứng t. Tốc độ khuấy 150 vòng/phút, pH = 3.



Hình 3.47. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào nồng độ phản ứng ở thời điểm t. Tốc độ khuấy 150 vòng/phút, pH = 3.

Kết quả từ hình 3.46 cho thấy, tốc độ trung bình khử DDT ở tất cả các thời điểm phản ứng tại hàm lượng bột sắt 3,5 g/L là nhỏ nhất và hàm lượng bột sắt 10,5 g/L là lớn nhất.

3.3.3. Ảnh hưởng của tốc độ khuấy

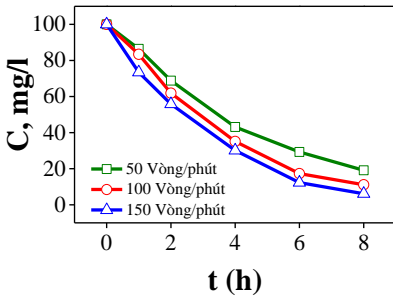
3.3.3.1. Khảo sát điều kiện tối ưu

Để khảo sát ảnh hưởng của tốc độ khuấy đến động học khử DDT, chúng tôi tiến hành phản ứng với tốc độ khuấy 50, 100, 150 vòng/phút. Nồng độ DDT tổng tại các thời điểm khác nhau được giới thiệu trong bảng 3.13 và sự phụ thuộc của nồng độ DDT tổng vào thời gian được giới thiệu

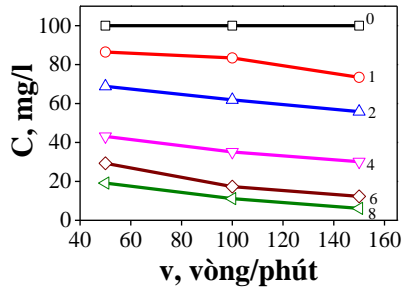
trên hình 3.48. Nồng độ DDT tổng theo tốc độ khuấy tại các thời gian khác nhau được giới thiệu trên hình 3.49.

Bảng 3. 13. Nồng độ của DDT tổng khi thay đổi tốc độ khuấy. Hàm lượng bột sắt 10,5 g/L, pH = 3.

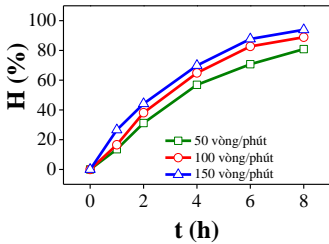
Tốc độ khuấy (vòng/phút)	Nồng độ DDT tổng (mg/L)					
	0 giờ	1 giờ	2 giờ	4 giờ	6 giờ	8 giờ
50	100	86,44	68,82	43,12	29,29	19,12
100	100	83,35	61,80	35,03	17,20	11,02
150	100	65,77	44,35	18,06	7,95	2,96



Hình 3.48 Hàm lượng DDT tại các thời điểm khác nhau.



Hình 3.49. Biến thiên nồng độ DDT tổng theo tốc độ khuấy tại các thời điểm khác nhau.



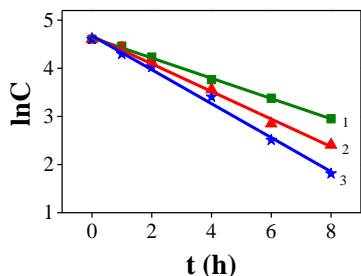
Hình 3. 50. Hiệu suất phân hủy DDT theo thời điểm t, tốc độ khuấy khác nhau.

Tại các thời điểm khác nhau, hiệu suất của quá trình phân hủy DDT khi hàm lượng bột sắt thay đổi cũng khác nhau, hiệu suất đạt cao nhất trong khoảng thời gian 4 giờ đầu tiên của phản ứng, 4 giờ tiếp theo hiệu suất phản ứng giảm mạnh và đi vào ổn định. Với tốc độ khuấy 150 vòng/phút, hiệu suất phản ứng cao nhất và hiệu suất thấp nhất với tốc độ khuấy 50 vòng/phút.

3.3.3.2. Ảnh hưởng của tốc độ khuấy đến động học phân hủy DDT

❖ Phương trình động học của phản ứng

Kết quả khảo sát sự phụ thuộc $\ln C_{DDT}$ vào thời gian t được giới thiệu trên hình 3.52.



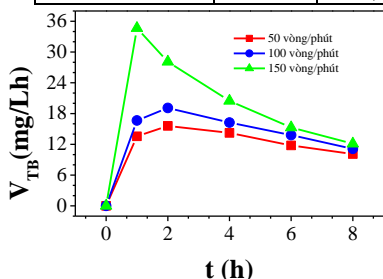
Hình 3.51. Sự phụ thuộc $\ln C_{DDT, v}$ vào thời gian khi thay đổi tốc độ khuấy.

❖ Tốc độ trung bình khử DDT tổng

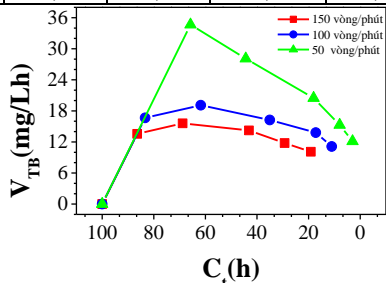
Tốc độ trung bình của phản ứng khử DDT khi thay đổi tốc độ khuấy tại thời gian phản ứng khác nhau được giới thiệu trên bảng 3.14 và sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào thời gian được giới thiệu trên hình 3.52. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng khử DDT ở các tốc độ khuấy khác nhau vào nồng độ của DDT ở thời điểm t được giới thiệu trên hình 3.53.

Bảng 3.14. Tốc độ trung bình phản ứng khử DDT theo thời gian. Hàm lượng bột sắt 10,5 g/L, pH = 3.

Tốc độ khuấy (vòng/phút)	Tốc độ trung bình(mg/Lh)					
	0 giờ	1 giờ	2 giờ	4 giờ	6 giờ	8 giờ
50	0	13,56	15,59	14,22	11,79	10,11
100	0	16,65	19,10	16,24	13,80	11,12
150	0	34,66	28,09	20,47	15,29	12,13



Hình 3.52 Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào thời gian phản ứng t. Hàm lượng bột sắt 10,5g/L, pH = 3.



Hình 3.53. Sự phụ thuộc của tốc độ trung bình của phản ứng vào nồng độ phản ứng ở thời điểm t. Hàm lượng sắt 10,5g/L, pH = 3.

Tổng hợp phương trình động học của phản ứng khử DDT với các điều kiện phản ứng được giới thiệu trong bảng 3.15.

Phương trình trùng phương biểu thị mối quan hệ giữa $\ln C_{DDT, v}$ vào thời gian tương ứng là:

$$\ln C_{DDT, 50} = -0,211.t + 4,636$$

$$R^2 = 0,998$$

$$\ln C_{DDT, 100} = -0,287.t + 4,666$$

$$R^2 = 0,994$$

$$\ln C_{DDT, 150} = -0,456.t + 4,668$$

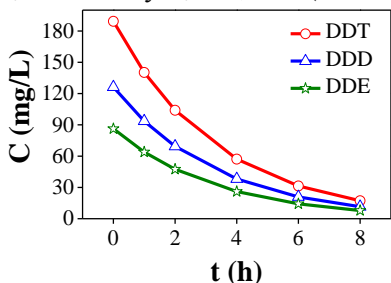
$$R^2 = 0,992$$

Bảng 3.15. Bảng tổng hợp phương trình động học của phản ứng khử DDT.

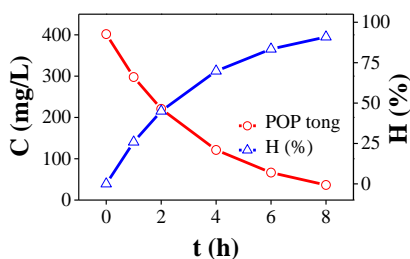
Yếu tố ảnh hưởng		Phương trình động học	Độ dốc
pH (hàm lượng sắt 7,0g/L, tốc độ khuấy 150 vòng/phút)	3	$\ln C_{\text{DDT}, \text{pH}=3} = -0,370.t + 4,706$	-0,370
	4	$\ln C_{\text{DDT}, \text{pH}=4} = -0,224.t + 4,647$	-0,224
	5	$\ln C_{\text{DDT}, \text{pH}=5} = -0,185.t + 4,663$	-0,185
Hàm lượng bột sắt (pH = 3, tốc độ khuấy 150 vòng/phút)	3,5	$\ln C_{\text{DDT}, 3,5} = -0,209.t + 4,637$	-0,209
	7,0	$\ln C_{\text{DDT}, 7,0} = -0,370.t + 4,706$	-0,370
	10,5	$\ln C_{\text{DDT}, 10,5} = -0,456.t + 4,668$	-0,456
Tốc độ khuấy (pH = 3, hàm lượng sắt 10,5 g/L)	50	$\ln C_{\text{DDT}, 50} = -0,211.t + 4,636$	-0,211
	100	$\ln C_{\text{DDT}, 100} = -0,287.t + 4,666$	-0,287
	150	$\ln C_{\text{DDT}, 150} = -0,456.t + 4,677$	-0,456

3.4. PHÂN HỦY DDT TÁCH TỪ ĐẤT Ô NHIỄM

Kết quả phân hủy DDT tách từ đất ô nhiễm tại Hòn Trơ, Diên Châu, Nghệ An bằng bột sắt kim loại sử dụng kết quả nghiên cứu trên mục 3.3. Sự biến đổi hàm lượng DDT theo thời gian phân hủy được giới thiệu trên hình 3.54. Kết quả cho thấy, hàm lượng của các chất DDT, DDD, DDE giảm dần theo thời gian và giảm mạnh trong khoảng thời gian từ 0 đến 4h với hiệu suất xử lý đạt 69,85% (hình 3.55).



Hình 3.54. Hàm lượng DDT tại các thời điểm khác nhau.



Hình 3.55. Hàm lượng DDT tổng và hiệu suất xử lý tại các thời điểm khác nhau.

KẾT LUẬN

Đề tài đã nghiên cứu động học quá trình khử DDT bằng phương pháp điện hóa (phương pháp CV và phương pháp thế tĩnh) trong dung môi etanol với chất điện li CaCl_2 , đồng thời nghiên cứu động học phân hủy DDT bằng phương pháp hóa học sử dụng bột sắt kim loại, kết quả chính đạt được cụ thể là:

1. Thực nghiệm nghiên cứu khử DDT bằng phương pháp CV cho thấy, hệ dung môi etanol + CaCl_2 thuận lợi cho quá trình khử điện hóa DDT với sự xuất hiện trên đường phân cực CV ba phản ứng điện hóa tại các điện thế phản ứng -0,46V (khử DDT), -1,32V (khử DDD) và -1,58V. Dòng động học khử tới hạn và điện thế tới hạn của các phản ứng được xác định:
 - Phản ứng khử DDT có $J_{gh} = -0,505 \text{mA/cm}^2$, $E_{gh} = -0,85 \text{V}$.
 - Phản ứng khử DDD có $J_{gh} = -0,331 \text{mA/cm}^2$, $E_{gh} = -1,55 \text{V}$.
2. Phân hủy DDT bằng phân cực 150 phút tại thế tĩnh E_{ps} , trong đó $E_{ps} = E_{gh}$ trên đây, đạt hiệu suất điện phân khá cao, tại $E_{ps} = -2,0 \text{V}$ là $H = 65,23\%$.
3. Phân hủy mẫu DDT trong phòng thí nghiệm bằng bột sắt tại pH = 3, có khuấy 150 vòng/phút trong 8 giờ, cho thấy hiệu suất phân hủy đạt tới 97,04%, và động học biểu kiến của phản ứng phân hủy là bậc 1.
4. Ứng dụng các kết quả trên đây cho phân hủy DDT tổng tách từ đất ô nhiễm Hòn Trơ bằng bột sắt kim loại chế tạo được (viện KTNĐ) cho hiệu suất xử lý cao, đạt 90,91%, đáp ứng được yêu cầu xử lý đất ô nhiễm hiện nay.
5. Ứng dụng kết quả phân cực thế tĩnh cho phép sử dụng phương pháp điện hóa với điện thế phân cực cao, từ -2,0V có thể khử DDT và các dẫn xuất trong dung dịch ô nhiễm DDT.
6. Trên cơ sở khoa học thu được từ nghiên cứu phân hủy điện hóa và kết quả thực nghiệm khử bằng bột sắt trên đây cho phép khẳng định việc xử lý DDT hoàn nguyên đất ô nhiễm hoàn toàn có thể thực hiện được bằng công nghệ trong nước.

DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC ĐÃ CÔNG BỐ LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN

1. *Xác định thể và dòng động học của phản ứng khử DDT trên đường phân cực CV*, Tạp chí Phân tích Lý – Hóa – Sinh, Số 3, Tr.85-92, 2016.
2. *Nghiên cứu tương quan dòng động học khử các dẫn xuất DDT với nồng độ và tốc độ quét trong phương pháp CV*, Tạp chí Phân tích Lý – Hóa – Sinh, Số 4, Tr.80-86, 2016.
3. *Phân hủy thuốc trừ sâu chứa DDT tồn lưu trong đất ô nhiễm bằng bột sắt kích thước nano*, Tạp chí Hóa học & Ứng dụng, số 01, Tr.29-32, 2016.
4. *Nghiên cứu tách thuốc bảo vệ thực vật khó phân hủy (POP) tồn dư trong đất bằng phương pháp chiết nước với phụ gia QH2*, Tạp chí hóa học, T.53(4E1), Tr.1-4, 2015.
5. *Phân hủy thuốc bảo vệ thực vật tách chiết từ đất ô nhiễm*, Tạp chí Hóa học, số T.53(5e3), Tr.99-102, 2015.
6. *Nghiên cứu sự ảnh hưởng của các chất phụ gia đến hiệu quả chiết rửa đất ô nhiễm thuốc bảo vệ thực vật khó phân hủy*, Tạp chí Hóa học, số T.53(5e3), Tr.103-106, 2015.
7. *Nghiên cứu khử phân hủy DDT bằng phân cực điện hóa*, TCHH, (2017 - Đang chờ đăng).

