

# Động học quá trình khử màu Reactive Blue 21 bằng axit Peracetic

Lê Văn Chiêu\*

*Ban quản lý các dự án, ĐHQGHN, 144 Xuân Thủy, Cầu Giấy, Hà Nội*

Nhận ngày 10 tháng 7 năm 2017

Chỉnh sửa ngày 19 tháng 8 năm 2017; Chấp nhận đăng ngày 22 tháng 9 năm 2017

**Tóm tắt:** Tốc độ khử màu của Reactive Blue 21 bởi axit peracetic trong dung dịch được khảo sát ở pH = 6,0. Các thí nghiệm được thực hiện với nồng độ axit peracetic trong khoảng 1 ÷ 3 mM. Diễn biến phản ứng được theo dõi thông qua đo biến thiên độ hấp thụ quang ở bước sóng hấp thụ cực đại của Reactive Blue 21 tại 660 nm. Kết quả nghiên cứu cho thấy rằng sự mất màu được thực hiện qua hai cơ chế là phản ứng không xúc tác và phản ứng tự xúc tác. Trên cơ sở các dữ liệu thực nghiệm, mô hình động học bậc hai đã được đề xuất cho hai phản ứng.

*Từ khóa:* Reactive Blue 21, Axit peracetic, động học, xúc tác, xử lý màu.

## 1. Tổng quan

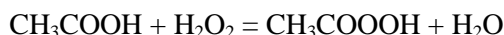
Xử lý màu nước thải nói chung và màu dệt nhuộm nói riêng là hướng nghiên cứu được quan tâm trên thế giới. Nhiều phương pháp đã được nghiên cứu như hấp phụ, keo tụ - tạo bông, keo tụ điện hóa, trao đổi ion, lọc thẩm thấu ngược, xử lý sinh học, ôxi hóa hóa học, ôxi hóa tiên tiến [1, 2]. Nước thải dệt nhuộm có thành phần ô nhiễm tương đối đa dạng bao gồm cặn lơ lửng, kim loại nặng, chất màu bền, các chất hữu cơ, pH cao [3]. Do đó, hệ xử lý nước thải dệt nhuộm thường là tổ hợp của các phương pháp tiền xử lý, xử lý chính, và sau xử lý. Đến nay, xử lý sinh học vẫn đang được áp dụng phổ biến để xử lý nước thải dệt nhuộm. Tuy nhiên, phương pháp này chưa xử lý được triệt để độ màu nên cần thêm giải pháp ôxi hóa để phá màu bền vững. Nhằm tìm kiếm chất ôxi

hóa màu hiệu quả và thân thiện môi trường, đề tài này đánh giá khả năng khử màu Reactive Blue 21 (RB21) bằng axit peracetic (PAA).

## 2. Phương pháp nghiên cứu

Phản ứng giữa RB21 và PAA được thực hiện trong dung dịch với thể tích 1 L có khuấy từ ở pH = 6,0 và nhiệt độ  $25 \pm 2$  °C. Nồng độ PAA được khảo sát trong khoảng 1 đến 3 mM. Nồng độ màu ban đầu khoảng 25 mg/L. Tốc độ mất màu được theo dõi thông qua đo biến thiên hấp thụ quang của RB21 ở bước sóng 660 nm.

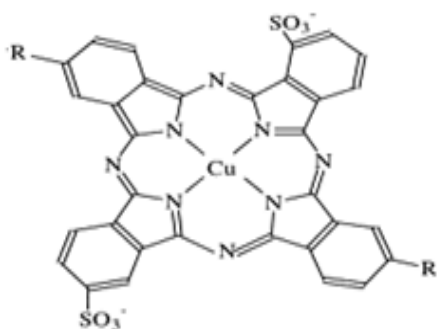
Trong nghiên cứu, màu RB21 sử dụng có nguồn gốc từ Trung Quốc có độ tinh khiết 95 %. PAA được điều chế trực tiếp trong phòng thí nghiệm từ phản ứng giữa CH<sub>3</sub>COOH đặc với H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (30 %) theo tỉ lệ thể tích 1,5: 1 theo phản ứng sau:



\* ĐT.: 84-904119229.

Email: lechieu@vnu.edu.vn

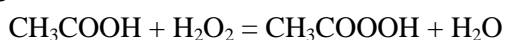
<https://doi.org/10.25073/2588-1094/vnuees.4106>



Hình 1. Công thức cấu tạo của RB21 [4].

PAA hình thành có nồng độ 2,1 M được xác định bằng phương pháp chuẩn độ iốt ngược ở nhiệt độ < -10 °C.

Trong nghiên cứu, màu RB21 sử dụng có nguồn gốc từ Trung Quốc có độ tinh khiết 95 %. PAA được điều chế trực tiếp trong phòng thí nghiệm từ phản ứng giữa CH<sub>3</sub>COOH đặc với H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (30 %) theo tỉ lệ thể tích 1,5: 1 theo phản ứng sau:



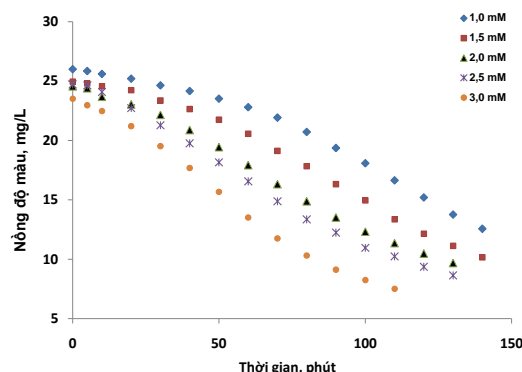
PAA hình thành có nồng độ 2,1 M được xác định bằng phương pháp chuẩn độ iốt ngược ở nhiệt độ < -10 °C.

### 3. Kết quả và thảo luận

#### 3.1. Tốc độ khử màu theo thời gian

Dung dịch PAA điều chế có chứa H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, nên trước khi đánh giá hiệu quả khử màu của PAA, một thí nghiệm đánh giá ảnh hưởng của H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> được thực hiện. Sau 120 phút phản ứng, cường độ màu gần như không đổi do đó có thể kết luận sự có mặt của H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> trong dung dịch PAA không đóng góp vào quá trình khử màu.

Tốc độ khử màu RB21 được khảo sát với 5 nồng độ PAA khác nhau trong khoảng 1 đến 3 mM. Kết quả biến thiên nồng độ màu theo thời gian được trình bày trên hình 2.



Hình 2. Tốc độ khử màu RB21 với các nồng độ PAA khác nhau ở pH = 6.

Hình 2 thể hiện rõ tốc độ khử màu tăng khi nồng độ PAA tăng. Điều này hoàn toàn phù hợp với quy luật động học phản ứng. Tuy nhiên, với một phản ứng thông thường (không có yếu tố tự xúc tác), tốc độ phản ứng (thể hiện bằng độ dốc trên đường cong động học) sẽ giảm dần theo thời gian. Hình 2 lại cho thấy tốc độ phản ứng tăng ở khoảng thời gian 40 đến 100 phút (thời gian cụ thể phụ thuộc vào nồng độ đầu của PAA). Vì vậy, phản ứng giữa RB21 và PAA có hiện tượng tự xúc tác hay sản phẩm là xúc tác cho phản ứng. Công thức cấu tạo của RB21 có 1 nguyên tử Cu<sup>2+</sup>, ion này có khả năng đã được giải phóng sau phản ứng để đóng vai trò tác nhân xúc tác.

#### 3.2. Mô hình động học quá trình mất màu

Với biện luận ở trên, quá trình khử màu được giả thiết xảy ra theo hai hướng phản ứng khử màu không xúc tác và tự xúc tác có quy luật động học bậc hai. Trong đó, phản ứng tự xúc tác phụ thuộc bậc một vào nồng độ chất màu và bậc một vào nồng độ sản phẩm (Cu<sup>2+</sup>). Phương trình tốc độ mất màu tổng được biểu diễn như sau:

$$r = -\frac{d[M]}{dt} = k[PAA][M] + k'[M][Cu^{2+}] \quad (1)$$

Trong đó: [M] là nồng độ chất màu

Các hằng số tốc độ phản ứng bậc hai k và k' tối ưu từ số liệu động học sử dụng lệnh solver trong excel với cách tính toán như sau:

a) Chia thời gian phản ứng thành các bước mô phỏng nhỏ nối tiếp nhau có khoảng thời gian  $\Delta t = 1$  phút. Với mỗi bước, phương trình vi phân (1) trở thành:

$$-\frac{\Delta[M]}{\Delta t} = k[PAA][M] + k'[M][Cu^{2+}] \quad (2)$$

hay:

$$-\Delta[M] = (k[PAA][M] + k'[M][Cu^{2+}])\Delta t \quad (3)$$

b) Trong mỗi bước mô phỏng, nồng độ PAA được coi là không đổi. Biến thiên nồng độ màu trong bước thứ  $i$  được tính toán theo nồng độ bước thứ  $(i-1)$  như sau:

$$-\Delta[M] = (k[PAA][M] + k'[M][Cu^{2+}])\Delta t \quad (4)$$

c) Cho hai giá trị  $k$  và  $k'$  bất kỳ, tính toán lý thuyết biến thiên nồng độ màu theo thời gian theo phương trình (4).

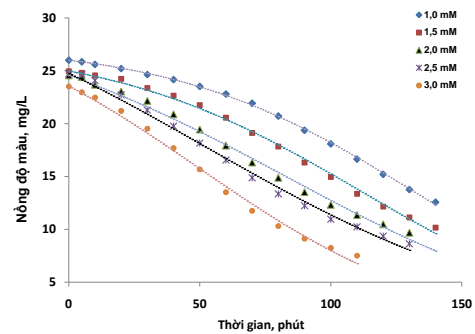
d) Tối ưu các giá trị  $k$  và  $k'$  bằng lệnh Solver sao cho sai số giữa giá trị lý thuyết và kết quả đo thực nghiệm là nhỏ nhất.

Kết quả tối ưu giá trị của  $k$  và  $k'$  ở mỗi nồng độ PAA khác nhau được cho ở bảng 1.

Các hằng số  $k$  và  $k'$  trong bảng 1 được sử dụng để mô phỏng tốc độ mất màu với các nồng độ PAA khác nhau. Kết quả mô phỏng được trình bày trên hình 3 cùng với các số liệu thực nghiệm. Dữ liệu tính toán rất phù hợp với thực nghiệm. Như vậy, mô hình phản ứng đồng thời theo hai cơ chế không xúc tác và tự xúc tác mô tả tốt quá trình mất màu xảy ra trong hệ phản ứng giữa RB21 và PAA.

Bảng 1. Giá trị các hằng số tốc độ phản ứng  $k$  và  $k'$

[PAA], mM	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	Giá trị trung bình
$k, \times 10^3$	1,21	1,26	1,87	1,93	1,87	1,63
$k'$	1,11	1,07	0,98	0,62	0,93	0,94



Hình 3. Kết quả mô phỏng tốc độ mất màu RB21 sử dụng mô hình tự xúc tác.

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu này đã đánh giá khả năng khử màu dung dịch Reactive Blue 21 của axit peracetic ở pH = 6 và nhiệt độ  $25 \pm 2$  °C. Các kết quả thực nghiệm đã chỉ ra rằng PAA có hiệu quả khử màu RB21 tốt, trong khi đó tiền chất tạo PAA là  $H_2O_2$  không có khả năng khử màu. Động học mất màu RB21 bằng PAA được chứng minh xảy ra đồng thời theo hai cơ chế không xúc tác và tự xúc tác. Hai phản ứng này đều xảy ra theo quy luật động học bậc hai. Các hằng số tốc độ bậc hai  $k$  và  $k'$  được tối ưu từ các số liệu thực nghiệm có các giá trị trung bình  $k = 1,63 \times 10^{-3} \text{ mM}^{-1}\text{phút}^{-1}$  và  $k' = 0,94 \text{ mM}^{-1}\text{phút}^{-1}$ .

#### Tài liệu tham khảo

- [1] V. K. Gupta; S. Khamparia; I.Tyagi; D. Jaspal; A. Malviya, Decolorization of mixture of dyes: A critical review, Global J. Environ. Sci. Manage., 1 (1) (2015) 71.
- [2] Siew-Teng Ong, Pei-Sin Keng, Weng-Nam Lee, Sie-Tiong Ha, Yung-Tse Hung, Dye Waste Treatment, Water, 3 (2011) 157.
- [3] Srebrenkoska Vineta, Zhezhova Silvana, Risteski Sanja, Saska Golomeova, Methods for waste waters treatment in textile industry, International scientific conference, November 2014, Gabrovo.
- [4] Maria Cristina Silva, Angelita Duarte Corrêa, Maria Teresa Sousa Pessoa Amorim, Pifer Parpot Juliana Arriel Torres, Pricila Maria Batista Chagas, Decolorization of the phthalocyanine dye reactive blue 21 by turnip peroxidase and assessment of its oxidation products, Journal of Molecular Catalysis B:Enzymatic 77 (2012) 9.

## Kinetics of Reactive Blue 21 Decolorization Using Peracetic Acid

Le Van Chieu

*VNU Project Management Department, 144 Xuan Thuy, Cau Giay, Hanoi, Vietnam*

**Abstract:** Decolorization rate of Reactive Blue 21 by peracetic acid in aqueous solutions was measured at pH 6.0. Concentrations of peracetic acid were applied in the range of 1 - 3 mM. The reaction kinetics were monitored by recording the light absorption of the Reactive Blue 21 at 660 nm. The obtained results showed that the decolorization happened *via* non-catalytic and auto-catalytic reactions. Both the reactions were proposed to obey the second-order rate law.

**Keywords:** Reactive Blue 21, peracetic acid, kinetics, catalyst, decolorization.