



Original Article

Study on Treatment of 2,4,6-Trinitrotoluene Using Modified Red Mud

Nguyen Van Huong¹, Pham Son Tung¹, Le Thi Thuy Nguyen¹, Nguyen Van Manh¹,
Nguyen Thi Dieu Hanh², Nguyen Thuy Linh³, Nguyen Manh Khai^{3,4,*}

¹*Institute of Materials, Biology and Environment, Academy of Military Science and Technology,
17 Hoang Sam, Cau Giay, Hanoi, Vietnam*

²*Quoc Hoc Hue High School for Gifted Students, Hue City, Vietnam*

³*Faculty of Environmental Sciences, VNU University of Science,
334 Nguyen Trai, Thanh Xuan, Hanoi, Vietnam*

⁴*Key Laboratory of Green Environment, Technology and Waste Utilization (GreenLab),
VNU University of Science, 334 Nguyen Trai, Thanh Xuan, Hanoi, Vietnam*

Received 08th August 2025

Revised 15th September 2025; Accepted 30th September 2025

Abstract: 2,4,6-Trinitrotoluene (TNT) is a highly toxic and recalcitrant nitroaromatic organic compound, often originating from explosive manufacturing activities. In this study, red mud, a metal-oxide-rich waste product from alumina production, was modified by a thermal method at various temperature to enhance its adsorption capacity for TNT in water. SEM and XRD analyses showed that the red mud sample modified at 400 °C has a distinct granular structure and good adsorption capability. The results indicated that the modified material reached maximum adsorption capacity of 12.078 mg/g after being heated at 400 °C. Under the conditions of pH = 3, a dosage of 1 g/100 mL of 50.0 mg/L TNT solution, and a reaction time of 60 minutes, the BT-400 sample achieved a TNT removal efficiency of 70.5%.

Keywords: Modified Red mud, TNT, wastewater treatment, adsorption.

* Corresponding author.

E-mail address: nguyenmanhkhai@hus.edu.vn

<https://doi.org/10.25073/2588-1094/vnuees.5420>

Nghiên cứu xử lý 2,4,6-Trinitrotoluene bằng bùn đỏ biến tính

Nguyễn Văn Huống¹, Phạm Sơn Tùng¹, Lê Thị Thùy Nguyên¹, Nguyễn Văn Mạnh¹,
Nguyễn Thị Diệu Hạnh², Nguyễn Thùy Linh³, Nguyễn Mạnh Khải^{3,4,*}

¹*Viện Vật liệu, Sinh học và Môi trường, 17 Hoàng Sâm, Nghĩa Đô, Cầu Giấy, Hà Nội, Việt Nam*

²*Trường THPT Chuyên Quốc học Huế, Thành phố Huế, Việt Nam*

³*Khoa Môi trường, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội,
334 Nguyễn Trãi, Thanh Xuân, Hà Nội, Việt Nam*

⁴*Phòng thí nghiệm trọng điểm Công nghệ môi trường xanh và tái chế chất thải,
Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội,
334 Nguyễn Trãi, Thanh Xuân, Hà Nội, Việt Nam*

Nhận ngày 08 tháng 8 năm 2025

Chỉnh sửa ngày 15 tháng 9 năm 2025; Chấp nhận đăng ngày 30 tháng 9 năm 2025

Tóm tắt: 2,4,6-Trinitrotoluen (TNT) là hợp chất hữu cơ nitro thơm có độc tính cao và khó phân hủy sinh học, phát sinh từ hoạt động sản xuất thuốc nổ. Trong nghiên cứu này, sử dụng bùn đỏ phế thải giàu oxit kim loại từ quá trình sản xuất nhôm, được biến tính bằng phương pháp nhiệt trong điều kiện không có không khí ở các nhiệt độ khác nhau nhằm nâng cao khả năng hấp phụ, ứng dụng xử lý TNT trong nước. Kết quả nghiên cứu cho thấy, vật liệu đạt dung lượng hấp thụ tối đa 12,078 mg/g sau khi nung ở 400 °C. Ở điều kiện pH = 3, lượng bùn đỏ biến tính (BT-400) 1 g/100 mL, nồng độ dung dịch TNT ban đầu 50,0 mg/L, thời gian phản ứng 60 phút, hiệu suất loại bỏ TNT đạt 70,5%.

Từ khóa: Bùn đỏ biến tính, TNT, xử lý nước thải, hấp phụ.

1. Mở đầu

Bùn đỏ là chất thải phát sinh từ quá trình tinh chế alumin từ quặng bauxite theo phương pháp Bayer, với khối lượng thường lớn hơn 1,0–2,5 lần so với lượng nhôm thu được. Thành phần chủ yếu của bùn đỏ là các oxit sắt; bên cạnh đó còn chứa các tạp chất nguy hại như asen, chì, crom, cadimi, oxit titan, oxit silic, các hợp chất nhôm không hòa tan, cũng như lượng kiềm dư. Do những đặc tính này, nếu không được xử lý đúng quy trình và hiệu quả, bùn đỏ có thể gây ra ô nhiễm nghiêm trọng môi trường đất, nước và không khí [1-3].

Tuy vậy, bùn đỏ không chỉ là nguồn ô nhiễm: nhiều nghiên cứu đã cho thấy nó có thể tái sử dụng như vật liệu hấp phụ chi phí thấp, đặc biệt để loại bỏ kim loại nặng và các hợp chất hữu cơ khó phân hủy trong nước. Chẳng hạn, YangCd (II) bằng bùn đỏ chỉ biến tính bằng nhiệt [4] hay Shi và cộng sự (cs) (2024) nghiên cứu sử dụng bùn đỏ được biến tính bằng axit (không có tác động nhiệt cao sau đó) để hấp phụ thuốc kháng sinh ciprofloxacin [5]. Còn trong nước, Phạm Đình Dũ và cs (2015) biến đổi nhiệt + axit để sử dụng trong phản ứng Fenton xử lý xanh methylene [6] hay Nguyễn Hữu Hùng và cs

* Tác giả liên hệ.

Địa chỉ email: nguyenmanhkhai@hus.edu.vn

<https://doi.org/10.25073/2588-1094/vnuees.5420>

(2011) tổng hợp vật liệu hấp phụ từ bùn đỏ để loại bỏ asen và các kim loại nặng trong nước thải [7].

Một trong những hợp chất ô nhiễm có tiềm năng được xử lý bởi bùn đỏ là 2,4,6-Trinitrotoluen (TNT). TNT thuộc nhóm nitroaromatic với độ độc cao [8] nghiên cứu của Nguyễn Văn Hoàng và cs chỉ ra rằng TNT trong nước thải có xu hướng tích tụ trong nước mặt và nước ngầm, gây nguy hại lâu dài cho hệ sinh thái và sức khỏe con người [9]. Phơi nhiễm lâu ngày qua nước uống hoặc bụi TNT có thể dẫn đến tổn thương hệ hô hấp, hệ tiêu hóa, kích ứng da, tăng nguy cơ các bệnh máu và ung thư [8, 10, 11].

Hiện nay các phương pháp như plasma lạnh, xúc tác quang TiO_2 hoặc hấp phụ vật liệu biến tính đã được đề xuất để xử lý TNT, tuy nhiên chưa có nghiên cứu nào sử dụng bùn đỏ biến tính [6, 9, 12, 13]. Vì vậy, nghiên cứu này hướng tới đánh giá khả năng sử dụng bùn đỏ biến tính bằng nhiệt để xử lý nước thải TNT.

2. Phương pháp nghiên cứu

2.1. Hóa chất và thiết bị

2.1.1. Hóa chất

TNT và axit clohydric (HCl , 36%) được mua từ S.I Analytics (Trung Quốc), natri hydroxit (NaOH , 98%) được mua từ Merck (Mỹ), nước khử ion (Milli Q).

Các mẫu nước tự tạo bị nhiễm TNT ở các nồng độ ban đầu khác nhau đã được chuẩn bị trong phòng thí nghiệm.

Bùn đỏ thô, được tạo ra từ công nghệ Bayer ở Lâm Đồng Việt Nam.

2.1.2. Thiết bị

Hệ thống sắc ký lỏng hiệu suất cao (HPLC) (Agilent, Hoa Kỳ, Dòng 1100) với cột Hypersil C18 ($200 \times 4 \text{ mm}$).

Máy khuấy từ gia nhiệt, Cole - Parmer.

Cân phân tích PA214, Ohaus (Mỹ), độ chính xác $\pm 0,0001 \text{ g}$.

Máy đo pH, HandyLab 680 HK.

Lò nung 1200 độ SX-5-12 Trung Quốc.

2.2. Biến tính bùn đỏ

2.2.1. Chuẩn bị mẫu bùn đỏ

Mẫu bùn đỏ được lấy tại nhà máy Alumin Lâm Đồng ở dạng bùn thải ướt, sau đó mẫu được lọc ép với áp suất cao để loại dịch bám theo bùn đỏ. Mẫu bùn thải khô thu được tiếp đó được sấy khô ở 105°C trong 2 giờ.

2.2.2. Hoạt hoá bằng nhiệt

Mỗi mẫu cân 100 g bùn đỏ khô cho vào chén sứ, bọc kín lại bằng giấy bạc để giữ ở điều kiện không có không khí và nung nóng tới nhiệt độ khác nhau: 200°C , 400°C , 600°C trong vòng 4 giờ. Sau đó tiến hành phân tích thành phần, cấu trúc pha và chụp SEM.

2.3. Thí nghiệm hấp phụ TNT

Trong nghiên cứu về khả năng hấp phụ TNT của bùn đỏ biến tính, các đặc tính hấp phụ được nghiên cứu theo phương pháp mẻ thí nghiệm và được đánh giá thông qua hiệu suất xử lý TNT. Các yếu tố khảo sát gồm: pH, ảnh hưởng vật liệu, ảnh hưởng của thời gian, ảnh hưởng của nồng độ TNT ban đầu, ảnh hưởng của lượng vật liệu hấp phụ.

2.3.1. Ảnh hưởng của vật liệu và pH

Cân 1 g các mẫu bùn đỏ biến tính BT-200, BT-400 và BT-600 cho vào 100 mL dung dịch TNT nồng độ 50 mg/L khuấy đều ở 400 rpm trong thời gian 60 phút, pH được khảo sát ở các mức 3; 5; 7; 9. Sau thí nghiệm sẽ xác định được loại vật liệu biến tính nhiệt và pH tối ưu cho các thí nghiệm sau.

2.3.2. Ảnh hưởng của thời gian

Cân 10 g mẫu bùn đỏ biến tính tốt nhất cho vào 1000 mL dung dịch TNT nồng độ 50 mg/L, pH ở mức tốt nhất khuấy đều ở 400 rpm trong thời gian 60 phút, lấy mẫu lần lượt ở các mốc thời gian 0; 5; 10; 20; 30; 45 và 60 phút. Sau thí nghiệm sẽ xác định được thời gian tối ưu cho các thí nghiệm sau.

2.3.3. Ảnh hưởng của nồng độ TNT ban đầu

Cân 1 g mẫu bùn đỏ biến tính tốt nhất cho vào 100 mL dung dịch TNT nồng độ ở các mức 50; 100; 150; 200 và 250 mg/L, pH = mức tốt

nhất khuấy đều ở 400 rpm trong thời gian tốt nhất. Sau thí nghiệm sẽ xác định nồng độ TNT ban đầu tối ưu cho các thí nghiệm sau.

2.3.4. Ảnh hưởng của lượng vật liệu hấp phụ

Cân lần lượt 0,25; 0,5; 0,75; 1; 2 và 2,5 g mẫu bùn đỏ biến tính tốt nhất cho vào 100 mL dung dịch TNT nồng độ ở mức tốt nhất, pH ở mức tốt nhất khuấy đều ở 400 rpm trong thời gian tốt nhất. Sau thí nghiệm sẽ xác định được lượng vật liệu tối ưu cho các thí nghiệm sau.

2.4. Phương pháp xác định tính chất vật liệu

Kính hiển vi điện tử quét (SEM), sử dụng Nova SEM 450, được sử dụng để nghiên cứu hình thái bề mặt và kích thước hạt của bùn đỏ biến đổi. Ngoài ra, cấu trúc tinh thể và pha của bùn đỏ thô và bùn đỏ biến tính được phân tích bằng nhiễu xạ tia X (XRD) với X SIEMENS Model D8 Advance. Diện tích bề mặt riêng (BET) được đo bằng cách sử dụng máy phân tích độ xốp và diện tích bề mặt Micromeritics TriStar 3000. Phân bố kích thước hạt của vật liệu được xác định bằng nhiễu xạ laser bằng máy phân tích kích thước hạt Horiba.

2.5. Phương pháp phân tích

Nồng độ TNT được xác định bằng hệ thống sắc ký lỏng hiệu suất cao (HPLC) (Agilent, Hoa Kỳ, Dòng 1100) với cột Hypersil C18 (200 × 4 mm) và pha động bao gồm metenol và nước theo tỷ lệ 65/35, hoạt động ở áp suất 125 bar và pH = 7.

Hiệu quả xử lý cho mỗi mẫu được tính toán theo phương trình (1):

$$\%H = \frac{(C_0 - C_e) * 100\%}{C_e} \quad (1)$$

Khả năng hấp phụ cân bằng được tính bằng phương trình (2):

$$Q_e = \frac{(C_0 - C_e) * V}{m} \quad (2)$$

Trong đó:

Q_e : khả năng hấp phụ (mg/g);

C_0 : nồng độ ban đầu của TNT (mg/L);

C_e : nồng độ TNT tại thời điểm cân bằng (mg/L);

V : thể tích dung dịch (ml);

H : hiệu suất hấp phụ (%);

m : Khối lượng chất hấp phụ (mg).

2.6. Đẳng nhiệt hấp phụ

2.6.1. Phương trình đẳng nhiệt Langmuir

Dựa trên những giả định này, Langmuir đã xây dựng phương trình đẳng nhiệt hấp phụ cho sự hấp phụ của chất tan trong dung dịch trên bề mặt của chất hấp phụ rắn:

$$q = q_{max} \frac{K_L C_e}{1 + K_L C_e} \quad (3)$$

Dạng tuyến tính:

$$\frac{C_e}{q} = \frac{1}{q_{max}} C_e + \frac{1}{q_{max} K_L}$$

Trong đó:

q : khả năng hấp phụ cân bằng của chất bị hấp phụ trên một đơn vị khối lượng chất hấp phụ (mg/g);

C_e : nồng độ cân bằng của chất hấp phụ (mg/L);

q_{max} : khả năng hấp phụ tối đa (mg/g);

K_L : hằng số hấp phụ Langmuir (L/mg).

2.6.2. Phương trình đẳng nhiệt Freundlich

Phương trình đẳng nhiệt hấp phụ Freundlich là một phương trình thực nghiệm được áp dụng cho sự hấp phụ trên bề mặt không đồng nhất và có dạng sau:

$$q = K_F C_e^{\frac{1}{n}} \quad (4)$$

Dạng tuyến tính:

$$\lg \lg q = \lg \lg K_F + \frac{1}{n} \lg C_e$$

Trong đó:

n : hằng số thực nghiệm.

3. Kết quả nghiên cứu và thảo luận

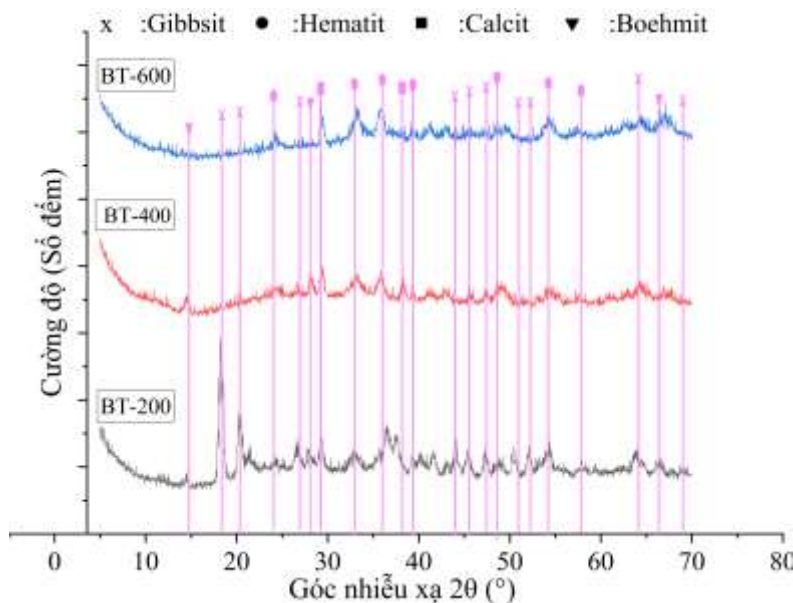
3.1. Đặc điểm của bùn đỏ biến tính

3.1.1. Nhiễu xạ tia X (XRD)

Phân tích giản đồ XRD trong Hình 1 cho thấy dạng tinh thể của bùn đỏ biến tính bởi nhiệt chủ yếu tồn tại ở bốn pha khoáng: gibbsit, boehmit, hematit và calcit. Trong số này, các

thành phần chính được xác định là gibbsit và hematit, đóng vai trò quan trọng trong khả năng hấp phụ. Các đỉnh đặc trưng của các pha này xuất hiện rõ ràng trên phổ của mẫu BT-200. Ở mức nhiệt này, đỉnh gibbsit cao nhất và chiếm phần lớn, hematit và calcit có bất được tín hiệu nhưng không nhiều. Theo Bảng 1, khi nâng mức nhiệt

nung lên 400°C, gibbsit bị phân hủy hoàn toàn; xuất hiện lượng lớn hematit, calcit; ngoài ra có phần nhỏ boehmit được tạo thành. Pha khoáng biến đổi: Gibbssit phân hủy trong khoảng 300-550°C [14]. Điều này chứng tỏ rằng hydroxit đã phân hủy và kết tinh lại thành hematit ổn định hơn.



Hình 1. Giản đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu BT-200, BT-400 và BT-600.

Bảng 1. Cấu trúc pha và % của các thành phần trong bùn đỏ biến tính ở các nhiệt độ từ 200 – 600 °C

Nhiệt độ	Thành phần			
	Gibbssit	Hematit	Calcit	Boehmit
200	87,2%	1,2%	11,5%	0%
400	0%	50,2%	36,1%	13,7%
600	0%	67,4%	32,6%	0%

Mẫu gốc/200°C có thể chứa lepidocrocit, ferrihydrit (vô định hình/vi tinh thể) hoặc magnetit/maghemit với hàm lượng thấp khiến cho XRD không phát hiện, và khi nhiệt nâng lên 400°C: các pha đó mất nước/oxy-hóa/tái kết tinh từ đó hình thành hematit /hiện rõ trên XRD [15-17]. Ngoài ra, vẫn có những tín hiệu yếu từ một số đỉnh calcit, được giải thích do calcit có sẵn trong bùn đỏ thô nhưng bị che khuất bởi nước, chất hữu cơ khiến đỉnh XRD yếu, khó

nhận ra, còn ở 400°C, calcit chưa bị phân hủy và được hiển thị rõ trên phổ phân tích do tạp chất đã bị đốt cháy, đỉnh rõ nét hơn [18].

Khi nung ở 600°C (mẫu BT-600), phổ XRD cho thấy chỉ còn lại các đỉnh riêng biệt của pha hematit, và calcit. Sự hình thành hematit mới giúp tăng mật độ của các vị trí hấp phụ bề mặt, góp phần nâng cao tổng thể khả năng hấp phụ của vật liệu. calcit phân hủy thành $\text{CaO} + \text{CO}_2$ ở nhiệt độ cao hơn 600°C nên phần lớn calcit vẫn còn tồn tại ở nhiệt độ nung 600°C [14].

3.1.2. SEM

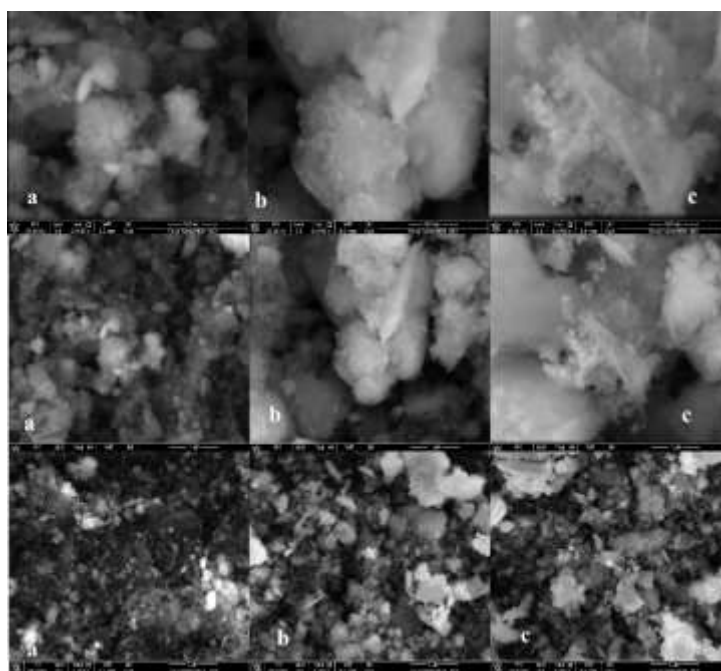
Hình 2 cho thấy hình ảnh kính hiển vi điện tử quét (SEM) của các mẫu bùn đỏ sau khi được biến tính ở các nhiệt độ 200, 400 và 600°C. Trong Hình 2a, bùn đỏ thô khi được nung ở nhiệt độ 200 °C có cấu trúc dạng hạt thô, to và một số tinh thể, không phù hợp với điều kiện để hình

thành các vị trí hấp phụ: cấu trúc xốp và tồn tại của các pha oxit kim loại.

Sau khi được nung nóng ở 400°C, mẫu BT-400 trong Hình 2b có sự thay đổi đáng kể về hình thái, cấu trúc phân lớp của polysilicat không tồn tại, các hạt trở nên rõ ràng hơn về hình dạng và kích thước lớn hơn. Bề mặt xuất hiện mạng lưới lỗ xốp rõ rệt, với nhiều hạt nhỏ tách rời, không còn bị bao phủ bởi màng hữu cơ. Các hạt

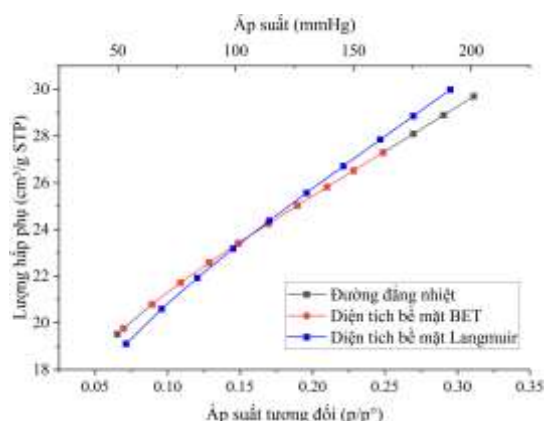
hình thành cấu trúc rời rạc hơn, nhiều khe hở liên thông khiến diện tích bề mặt tiếp xúc tăng, tạo điều kiện thuận lợi cho việc hình thành các vị trí hấp phụ của mẫu bùn đỏ.

Ở 600°C (Hình 2c) do sintering/sự kết tinh, bề mặt trở nên mịn hơn tuy nhiên dính chặt vào nhau làm mất nhiều lỗ nhỏ, giảm khả năng hấp phụ của vật liệu [19].



Hình 2. Hình chụp SEM của các mẫu BT-200 (a), BT-400 (b), BT-600 (c).

3.1.3. Diện tích bề mặt BET

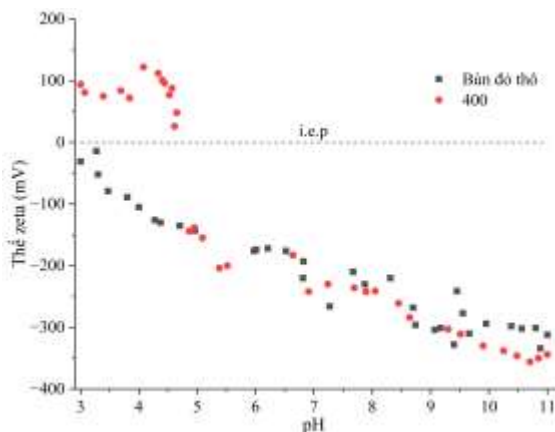


Hình 3. Diện tích bề mặt của mẫu BT-400.

Biến tính nhiệt bùn đỏ ở 400°C dẫn tới tăng diện tích bề mặt và khả năng xốp so với mẫu thô, thể hiện qua đường đẳng nhiệt và các giá trị BET/Langmuir tăng rõ (Hình 3). Hiện tượng này phù hợp với cơ chế vật lý-hóa học: nhiệt ở vùng ~400°C gây mất nước kết cấu, phân hủy các muối carbonat và chuyển pha khoáng (ví dụ việc chuyển goethit/boehmit sang hematit/transition-alumina), từ đó mở các mao-nhỏ và tạo lỗ rỗng mới – những biến đổi này làm tăng diện tích bề mặt khả dụng cho hấp phụ. Tuy nhiên, ở dải nhiệt thấp-trung ($\leq 400\text{--}500^\circ\text{C}$) hiệu ứng tích cực này rõ nhất; nếu tiếp tục tăng nhiệt độ ($\geq 600^\circ\text{C}$) thường xuất hiện hiện tượng sintering/kết tinh hạt lớn làm giảm diện tích bề mặt [14, 20].

3.1.4. Thế zeta

Mẫu bùn đỏ thô có bề mặt mang điện tích âm trong toàn bộ dải pH từ 3-11. Xu hướng giảm thế zeta khi pH tăng cho thấy bề mặt vật liệu có các vị trí mang điện tích biến thiên, chứa các nhóm liên kết hóa học có khả năng phân ly H^+ (ví dụ: $SiOH$, $FeOOH$ hoặc $COOH$,...). Xử lý nhiệt có thể đã thay đổi đặc tính bề mặt của vật liệu, dịch chuyển i.e.p về phía pH kiềm, làm cho vật liệu có xu hướng mang điện tích dương hoặc ít âm điện hơn. Sự thay đổi điện tích bề mặt nhiều khả năng liên quan đến các phản ứng chuyển hóa của các khoáng vật (phyllosilicat, các oxit Fe, Al và các khoáng vật khác). Nhiều khả năng, sau khi xử lý mẫu, đóng góp điện tích âm vĩnh cửu của các phyllosilicat giảm đi, trong khi đóng góp điện tích biến thiên của các oxit Fe-Al tăng lên. Do đó, ở pH thấp (ví dụ: $pH < 5$) phản ứng protonation là nguyên nhân làm cho các mẫu 400 nhìn chung có bề mặt mang điện tích dương



Hình 4. Thế zeta của bùn đỏ thô và mẫu BT-400.

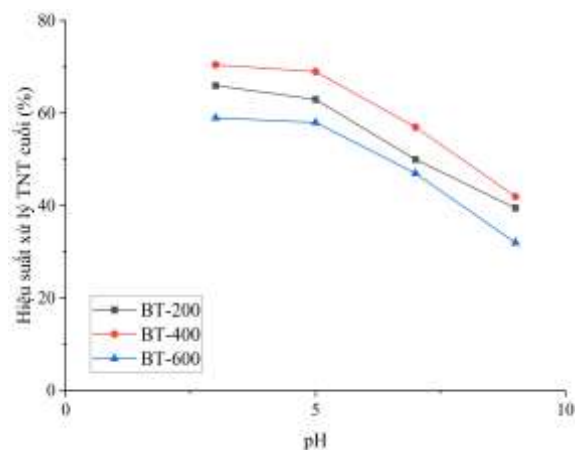
3.2. Nghiên cứu khả năng hấp phụ của TNT sử dụng bùn đỏ biến tính

3.2.1. Khảo sát ảnh hưởng của pH và ảnh hưởng của loại vật liệu

Độ pH của dung dịch có ảnh hưởng lớn đến quá trình hấp phụ của chất hấp phụ và dung dịch ban đầu. Kết quả ảnh hưởng của pH đến khả năng hấp phụ TNT được thể hiện trong Hình 5.

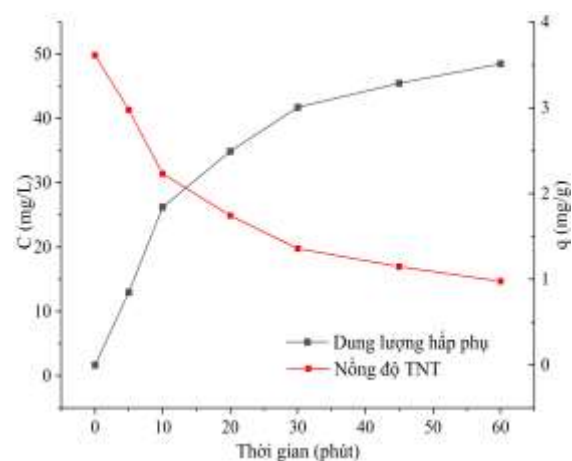
Quan sát biểu đồ có thể thấy khi pH tăng từ 3 lên 9 thì hiệu quả điều trị của TNT giảm khi

giá trị pH của môi trường tăng lên. Hiệu suất hấp phụ đạt mức cao nhất khi ở $pH = 3$. Vì sự hấp thụ anion được ưa chuộng bởi lực hút tĩnh điện và/hoặc kết hợp với việc giải phóng các ion OH^- , nó sẽ được tạo điều kiện thuận lợi bởi các giá trị pH thấp [21]. Hơn nữa, có thể thấy bùn đỏ biến tính ở $400^\circ C$ có hiệu suất cao hơn cả so với 2 mức nhiệt nung còn lại, phù hợp với phân tích cấu trúc XRD và SEM ở trên.



Hình 5. Ảnh hưởng của pH đến hiệu suất hấp phụ TNT trong môi trường nước các mẫu bùn đỏ biến tính bằng nhiệt ($C_{TNT}^0 = 50 \text{ mg/L}$, $t = 30 \text{ phút}$, $C_{bùn\ đỏ} = 1 \text{ g/100 ml}$).

3.2.2. Ảnh hưởng của thời gian

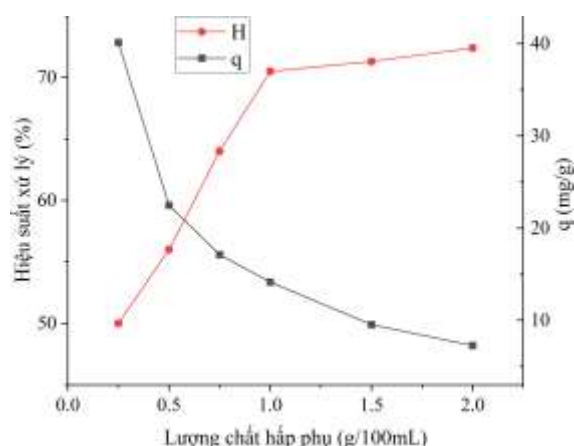


Hình 6. Ảnh hưởng của thời gian phản ứng đến hiệu suất phân hủy TNT của mẫu BT-400 ($C_{TNT}^0 = 50 \text{ mg/L}$, $pH=3$, $C_{bùn\ đỏ} = 1 \text{ g/100 ml}$).

Kết quả khảo sát cho thấy khi tăng thời gian phản ứng từ 30 lên 45 phút hiệu suất phân hủy tăng từ 63,01% đến 68,93% và khi tiếp tục tăng thời gian phản ứng lên 60 phút thì hiệu suất đạt 70,05%. Trong khi đó, dung lượng hấp phụ không có dấu hiệu giảm, đạt mức 3,51 mg/g sau 60 phút. Kết quả bước đầu chứng minh được hiệu quả xử lý TNT trong nước bằng bùn đỏ biến tính, làm cơ sở để có thể ứng dụng cho một công đoạn trong xử lý nước thải nhiễm TNT.

3.2.3. Ảnh hưởng của lượng chất hấp phụ

Ảnh hưởng của lượng bùn đỏ biến tính đến hiệu suất hấp phụ TNT được nghiên cứu bằng cách thay đổi khối lượng vật liệu sử dụng từ 0,25 g đến 2,0 g trong 100 mL dung dịch TNT nồng độ ban đầu là 50 mg/L ở pH = 3. Kết quả được trình bày như sau:



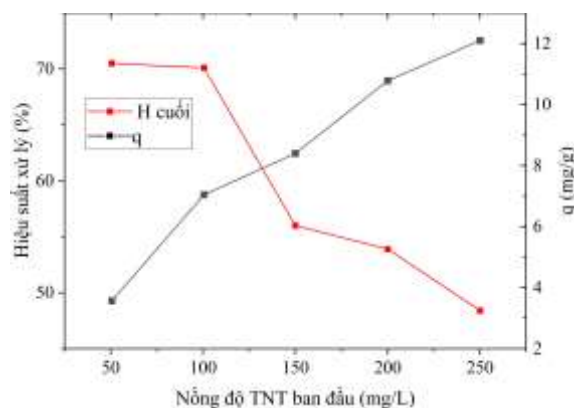
Hình 7. Ảnh hưởng của lượng chất hấp phụ (BT-400) đến hiệu suất hấp phụ TNT ($C_{\text{TNT}}^0 = 50 \text{ mg/L}$, $t = 30 \text{ phút}$, $\text{pH} = 3$).

Khả năng hấp phụ của BT-400 tăng nhanh khi lượng bùn tăng từ 0,25 g/100 mL đến 1,0 g/100 mL, đạt 70,5%. Tuy nhiên, trong cùng một khoảng nồng độ, khả năng hấp phụ giảm từ 40,12 mg/g xuống 14,14 mg/g. Hiệu suất hấp phụ tăng trong khi khả năng hấp phụ giảm trong khoảng này có thể do hầu hết các phân tử TNT bị hấp phụ (hiệu suất tăng) sẽ dẫn đến việc thiếu các phân tử TNT có sẵn để hấp phụ lên bùn đỏ biến tính trong khi trọng lượng của chất này tiếp tục tăng [22]. Tuy nhiên khi tiếp tục tăng lên 1,5

và 2,0 g/100 mL thì hiệu suất xử lý tăng không đáng kể (<1%), và việc tăng liều lượng chất hấp phụ làm tăng chi phí của quá trình hấp phụ. Do đó, 1,0 g/L được chọn là lượng chất hấp phụ tối ưu cho các thử nghiệm tiếp theo.

3.2.4. Ảnh hưởng của nồng độ TNT ban đầu

Kết quả trong Hình 6 cho thấy khi nồng độ TNT ban đầu tăng lên, khả năng hấp phụ tăng lên và hiệu quả xử lý của vật liệu giảm. Hiệu quả xử lý 0,1 g/L BT-400 đạt mức tối đa sau 60 phút khi nồng độ TNT nằm trong khoảng từ 0 đến 50 mg/L. Khi nồng độ tiếp tục tăng, hiệu quả xử lý của TNT bằng vật liệu giảm nhanh chóng. Ở dải nồng độ TNT thấp hơn, hầu hết các phân tử TNT đều bị hấp phụ, dẫn đến hiệu suất hấp phụ cao. Tuy nhiên, khả năng hấp phụ của chất hấp phụ trên một đơn vị khối lượng thấp do lượng phân tử TNT bị hấp phụ không đủ. Ngoài ra, tỷ lệ phân tử TNT trên vị trí hoạt động của chất hấp phụ cũng thấp, do đó, việc tăng nồng độ TNT sẽ làm tăng tương tác giữa các phân tử TNT và chất hấp phụ [22]. Ở nồng độ TNT cao hơn, khả năng hấp phụ được cải thiện do động lực truyền khối tăng lên [22]. Khi nồng độ TNT tăng cao, hiệu quả xử lý của vật liệu giảm nhanh do bề mặt hấp phụ bị bão hòa, làm giảm số vị trí hoạt động sẵn có. Đồng thời, nồng độ lớn làm cản trở quá trình khuếch tán và giảm khả năng tiếp xúc giữa TNT và vật liệu.



Hình 8. Ảnh hưởng của nồng độ TNT ban đầu đến hiệu suất hấp phụ TNT ($C_{\text{TNT}}^0 = 50 \text{ mg/L}$, $t = 30 \text{ phút}$, $\text{pH} = 3$, $C_{\text{bùn đỏ}} = 1 \text{ g/100 ml}$).

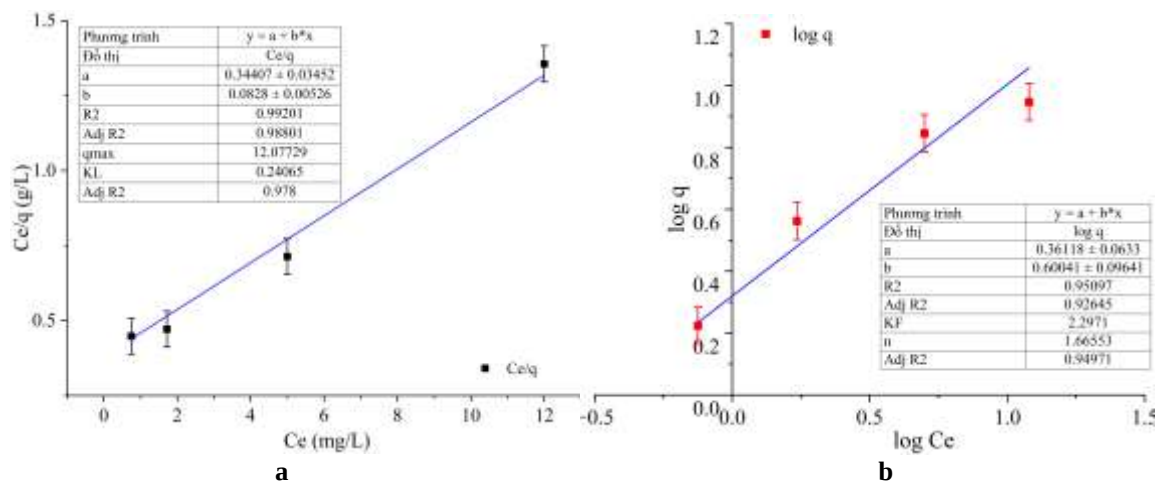
3.2.5. *Đẳng nhiệt hấp phụ*

Kết quả về hiệu suất hấp phụ TNT của vật liệu BT-400 theo mô hình hấp phụ đẳng nhiệt

Langmuir và Freundlich được thể hiện trong Bảng 2 và Hình 7.

Bảng 2. Kết quả đẳng nhiệt hấp phụ TNT của vật liệu BT-400

STT	Đẳng nhiệt hấp phụ của TNT					
	C_0 (mg/L)	C_e (mg/L)	q (mg/g)	C_e/q (g/L)	$\log q$	$\log C_e$
1	17,5	0,75	1,675	0,448	0,224	-0,125
2	38,2	1,72	3,648	0,471	0,562	0,236
3	75,1	5	7,010	0,713	0,846	0,699
4	100,5	12	8,850	1,356	0,947	1,079



Hình 9. Phương trình đẳng nhiệt hấp phụ tuyến tính Langmuir (a) và Freundlich (b) của quá trình hấp phụ TNT.

Bảng 3. Các thông số trong các mô hình hấp phụ đẳng nhiệt Langmuir và Freundlich cho quá trình hấp phụ TNT

Mô hình Langmuir			Mô hình Freundlich		
$Q_{\max}$ (mg/g)	R^2	KL (L/mg)	KF (mg/g)	R^2	n
12,078	0,992	0,241	2,297	0,951	1,67

Các thông số hấp phụ đẳng nhiệt của các mô hình Langmuir và Freundlich cho từng loại được trình bày trong Bảng 3.

Trong Hình 7 và các tham số đẳng nhiệt hấp phụ được tính toán trong Bảng 2, có thể thấy rằng hệ số tương quan R^2 đối với mô hình Langmuir ($R^2 = 0,992$) và đối với mô hình Freundlich ($R^2 = 0,951$). Khả năng hấp phụ tối đa $q_{\max}$ là 12,078 mg/g.

Kết quả nghiên cứu cho thấy hai chất TNT được hấp phụ đẳng nhiệt theo mô hình Langmuir và mô hình Freundlich. Nhưng xu hướng nhiều hơn trong mô hình Langmuir [23, 24]. Theo mô hình Langmuir, giá trị $q_{\max}$ đạt 12,078 mg/g, cho thấy khả năng hấp phụ cực đại của vật liệu đối với TNT là tương đối cao. Giá trị $KL = 0,241$ L/mg thể hiện mức độ ái lực tương đối mạnh giữa bề mặt vật liệu và phân tử TNT, phản ánh

quá trình hấp phụ diễn ra thuận lợi. Trong khi đó, đối với mô hình Freundlich, giá trị $n = 1,67 (>1)$ cho thấy quá trình hấp phụ cũng thuận lợi và vật liệu có bề mặt hấp phụ không hoàn toàn đồng nhất. Tuy nhiên, vì hệ số R^2 của Langmuir cao hơn, có thể kết luận rằng quá trình hấp phụ TNT trên vật liệu BT-400 tuân theo mô hình Langmuir. Điều này chứng tỏ quá trình hấp phụ xảy ra theo cơ chế hình thành lớp đơn trên bề mặt vật liệu đồng nhất về năng lượng hấp phụ. Kết quả này phù hợp với các nghiên cứu trước đây về hấp phụ các hợp chất nitro thơm trên vật liệu chứa carbon hoặc vật liệu biến tính oxit kim loại. Theo Zhang và cs (2012) khi nghiên cứu “Adsorption Behavior and Removal of Organic

Materials from TNT Red Water on LAC”, quá trình hấp phụ các hợp chất chứa TNT trên than hoạt tính cũng tuân theo mô hình Langmuir với $R^2 > 0,98$, phản ánh sự hình thành lớp đơn ổn định [23]. Oh và cs (2015) cũng nghiên cứu cho thấy cơ chế hấp phụ TNT chủ yếu là tương tác $\pi-\pi$ giữa nhân nitroaromatic và bề mặt carbon, đồng thời mô hình Langmuir cho độ phù hợp cao nhất [24].

Kết quả nghiên cứu tuy chưa cao nhưng bước đầu đánh giá được hiệu quả xử lý TNT bằng bùn đỏ biến tính, làm cơ sở để nghiên cứu ứng dụng làm một công đoạn trong xử lý nước thải phát sinh từ dây chuyền sản xuất TNT.

Bảng 4. Khả năng hấp phụ TNT của các vật liệu hiện nay

Vật liệu	$q_{\max}$ (mg/g)	Tham khảo
Grafen nanocomposite từ chất thải (GN-S)	242,3	[25]
Polyme bắt mẩu từ tính (TNT-MMIP)	40,39	[26]
Aerogel indole đa cấu trúc (HINFA)	117,5	[27]
Khung hữu cơ siêu phân tử dạng clip (Clip-SOF)	40,2	[28]
Composite Fe_3O_4	290,7	[29]
Bùn đỏ biến tính nghiên cứu này	12,078	

4. Kết luận

Nghiên cứu về xử lý TNT bằng cách sử dụng bùn đỏ biến tính nhiệt và axit đã chứng minh hiệu quả loại bỏ cao. Ở pH = 3–3,5; với BT-400 (bùn đỏ được nung ở 400°C trong điều kiện không có không khí sau 4 giờ), các điều kiện tối ưu để xử lý TNT đạt được bằng cách sử dụng 1g/100 mL bùn đỏ biến tính và thời gian phản ứng là 60 phút đối với dung dịch 100 mL có chứa TNT ở mức 50 mg/L. Sự hấp phụ TNT bằng bùn đỏ biến tính trong điều kiện đẳng nhiệt tuân theo các mô hình hấp phụ Langmuir với $q_{\max} = 12,078$ mg/g, $R^2 = 0,992$, $K_L = 0,241$ L/mg và Frenundlich với các thông số $K_F = 2,297$ mg/g, $R^2 = 0,951$, $n = 1,67$.

Tài liệu tham khảo

- [1] V. D. L., Research on Steel and Non-Calcined Construction Materials Production Technology

Using Red Mud Waste from the Aluminum Production Process in Tay Nguyen, 2011-2015.

- [2] M. Gräfe, G. Power, C. Klauber, Bauxite Residue Issues: III. Alkalinity and Associated Chemistry, Hydrometallurgy, Vol. 108, No. 1-2, 2011, pp. 60-79, <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2011.02.004>.
- [3] C. Klauber, M. Gräfe, G. Power, Bauxite Residue Issues: II, Options for Residue Utilization, Hydrometallurgy, Vol. 108, No. 12, 2011, pp. 11-32, <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2011.02.007>.
- [4] T. Yang, L. Sheng, Y. Wang, K. N. Wyckoff, C. He, Q. He, Characteristics of Cadmium Sorption by Heat-Activated Red Mud in Aqueous Solution, Sci Rep, Vol. 8, No. 1, 2018, pp. 13558, <https://doi.org/10.1038/s41598-018-31967-5>.
- [5] J. Shi, W. Wang, Z. Li, Y. Shi, Ciprofloxacin Removal via Acid-Modified Red Mud: Optimizing the Process, Analyzing the Adsorption Features, and Exploring the Underlying Mechanism, Molecules, Vol. 29, No. 12, 2024, pp. 2928, <https://doi.org/10.3390/molecules29122928>.

- [6] P. D. Du, N. T. Hieu, D. T. D. Trang, N. D. T. Tien, L. N. Tam, Utilization of Lam Dong Red Mud in Heterogenous Fenton Process to Decompose Methylene Blue, *Thu Dau Mot University Journal of Science*, Vol. 2, No. 21, 2015, pp. 88-94.
- [7] N. H. Hung, N. T. Minh, D. D. Hung, N. B. Hung, New Discovery of Late Early Ordovician Graptolites and Discussion on Stratigraphic Sequence of Paleozoic Sediments in the Dinh Ca - Trang Xa Section, Vo Nhai District, Thai Nguyen Province, Northeast Vietnam, *Vietnam Journal of Earth Sciences*, Vol. 39, No. 1, 2017, <https://doi.org/10.15625/0866-7187/39/1/9229>.
- [8] H. M. Bolt, G. H. Degen, S. B. Dorn, S. Plödtner, V. Harth, Genotoxicity and Potential Carcinogenicity of 2,4,6-Trinitrotoluene: Structural and Toxicological Considerations, *Rev Environ Health*, Vol. 21, No. 4, 2006, <https://doi.org/10.1515/REVEH.2006.21.4.217>.
- [9] H. Nguyen, K. Do, T. Nguyen, Degradation of 2,4,6-Trinitroresorcinol in Aqueous Solution by Cold Plasma Technology, *Pol J. Environ Stud*, Vol. 30, No. 6, pp. 5195-5201, 2021, <https://doi.org/10.15244/pjoes/135831>.
- [10] S. Choe, S. H. Lee, Y. Y. Chang, K. Y. Hwang, J. Khim, Rapid Reductive Destruction of Hazardous Organic Compounds By Nanoscale Fe⁰, *Chemosphere*, Vol. 42, No. 4, 2001, pp. 367-372, [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(00\)00147-8](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(00)00147-8).
- [11] R. F. Sievers, R. L. Stump, A. R. Monaco, Aplastic Anemia Following Exposure to Trinitrotoluene; Report of Three Cases., *Occup Med (Chic Ill)*, Vol. 1, pp. 351-362.
- [12] N. M. Khai, N. V. Huong, N. T. N. Anh, V. D. Loi, A Study on Removal of Styphnic Acid in Aquatic Environment by using UV-H₂O₂/Nano TiO₂, *Vol. 34*, 2018, pp. 98-103, <https://doi.org/10.25073/2588-1094/vnuees.43139>.
- [13] Y. Wu et al., Insights Into Role of Microstructure In TNT Adsorption Performances Onto Zeolite, Diatomite and Kaolinite Particles, *Discover Applied Sciences*, Vol. 6, No. 8, 2024, pp. 420, <https://doi.org/10.1007/s42452-024-06121-8>.
- [14] M. L. P. Antunes et al., Red Mud From Brazil: Thermal Behavior and Physical Properties, in *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2012, pp. 775-779, <https://doi.org/10.1021/ie201700k>.
- [15] A. R. Dinesen, C. T. Pedersen, C. B. Koch, The Thermal Conversion of Lepidocrocite (γ -FeOOH) Revisited, *J Therm Anal Calorim*, Vol. 64, No. 3, 2001, pp. 1303-1310, <https://doi.org/10.1023/A:1011582004634>.
- [16] T. S. Gendler, V. P. Shcherbakov, M. J. Dekkers, A. K. Gapeev, S. K. Gribov, E. McClelland, The Lepidocrocite-Maghemite-haematite Reaction Chain-I. Acquisition of Chemical Remanent Magnetization by Maghemite, its Magnetic Properties and Thermal Stability, *Geophys J. Int*, Vol. 160, No. 3, 2005, pp. 815-32, <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2005.02550.x>.
- [17] Z. Wang, D. Xiao, R. T. Bush, J. Liu, Coprecipitated Arsenate Inhibits Thermal Transformation of 2-Line Ferrihydrite: Implications for Long-term Stability of Ferrihydrite, *Chemosphere*, Vol. 122, 2015, pp. 88-93, <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2014.11.017>.
- [18] A. Tom, P. N. D. Djonga, C. Tsamo, H. G. Valery, J. Azangueu, S. K. Noukelag, Structural Characterization of Bauxite Red Mud to Utilization in Ceramic Wall/Roofing Tile: Effect of Temperature on Mechanical Properties and Physico-Chemical Stability, *Advances in Materials Physics and Chemistry*, Vol. 12, No. 01, 2022, pp. 1-18, <https://doi.org/10.4236/amc.2022.121001>.
- [19] F. Li et al., Sustainable Remediation: Advances in Red Mud-Based Synergistic Fabrication Techniques and Mechanistic Insights for Enhanced Heavy Metal(Loid)s Sorption in Wastewater, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI)*, 2025, <https://doi.org/10.3390/pr13072249>.
- [20] B. Sekizkardeş, S. S. Uzun, A. Uzun, S. Kuhn, K. K. Özkiper, S. F. K. Öztulum, A Comprehensive Review on Red Mud-Based Catalysts: Modification Methods and Applications in Thermal- and Photocatalysis, *ChemCatChem*, Vol. 17, No. 5, 2025, <https://doi.org/10.1002/cctc.202401678>.
- [21] P. Castaldi, M. Silvetti, G. Garau, S. Deiana, Influence of the pH on the Accumulation of Phosphate by Red Mud A Bauxite Ore Processing Waste, *J. Hazard Mater*, Vol. 182, No. 1-3, 2010, pp. 266-272, <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2010.06.025>.
- [22] D. T. Tran, T. D. To, T. H. Le, Q. T. Dao, L. D. Nghiem, Synthesis Of Highly Effective And Easily Recoverable MIL-100(Fe)/MgFe₂O₄ Adsorbent for Enhanced Antibiotic Removal from Water, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 147, 2025, pp. 149-160, <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2024.12.009>.
- [23] Y. Zhang, F. Wei, J. Xing, F. Lv, X. Meng, P. K. Chu, Adsorption Behavior and Removal of Organic Materials from TNT Red Water by Lignite Activated Carbon, 2012.

- [24] S. Y. Oh, Y. D. Seo, Factors Affecting Sorption of Nitro Explosives to Biochar: Pyrolysis Temperature, Surface Treatment, Competition, and Dissolved Metals, *J Environ Qual*, Vol. 44, No. 3, 2015, pp. 833-840, <https://doi.org/10.2134/jeq2014.12.0525>.
- [25] A. Yadav, M. O. Aquatar, R. J. Krupadam, Removal of Traces of Highly Explosive Trinitrotoluene from TNT Red Water by Using Graphene Nanocomposites Prepared from Solid Wastes: An Example of Circular Economy, *Environmental Science and Pollution Research*, Vol. 32, No. 24, 2025, pp. 14810-14826, <https://doi.org/10.1007/s11356-025-36570-6>.
- [26] A. R. Zarei, R. S. Zafarghandi, Selective Determination of 2,4,6-Trinitrotoluene in Water Samples Based on Magnetic Imprinted Nanoparticles via Grafting Polymerization, *J. Braz. Chem. Soc.*, 2015, <https://doi.org/10.5935/0103-5053.20150035>.
- [27] Y. Wang, X. Liu, B. Chen, Y. Zhang, Rapid Adsorption of 2,4,6-Trinitrotoluene by Hierarchically Porous Indole-based Aerogel, *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*, Vol. 635, 2022, pp. 127964, <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.127964>.
- [28] Y. Liu, S. Zeng, X. He, Y. Wu, Y. Liu, Y. Wang, Adsorption and Removal of 2,4,6-Trinitrotoluene by a Glycoluril-Derived Molecular-Clip-Based Supramolecular Organic Framework, *Molecules*, Vol. 29, No. 24, 2024, pp. 5822, <https://doi.org/10.3390/molecules29245822>.
- [29] Y. Xu et al., Efficient Adsorption of Trinitrotoluene by Isoxazoline-Based Porous Polymers Prepared from Room-Temperature Stable Bis Nitrile Oxide, *J. Appl. Polym. Sci.*, Vol. 140, No. 13, 2023, <https://doi.org/10.1002/app.53678>.