

III-3.8

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT XÚC TÁC QUANG OXI HÓA CỦA CÁC PHỨC METALLO-TETRASULFOPHTHALOCYANINE

Lê Thanh Minh¹, Phan Thanh Thảo¹, Phan Minh Tân²

¹Viện Công nghệ Hóa học

²Sở Khoa học Công nghệ Tp. HCM

Tóm tắt

Vị trí các mức năng lượng vân đạo phân tử của các phức metallo-tetrasulfophthalocyanine (MTSPc) được tính toán sử dụng phần mềm Hyperchem 8.0. Kết quả cho thấy chênh lệch năng lượng giữa trạng thái triplet và singlet của các phức ZnTSPc, AlTSPc, FeTSPc cao hơn mức năng lượng của oxy singlet. Ngược lại mức chênh lệch năng lượng đối với CoTSPc thì thấp hơn so với oxy singlet. Hoạt tính xúc tác oxy hóa và quang oxy hóa trong phản ứng oxy hóa sulfide của các phức nói trên được khảo sát. Kết quả cho thấy ngoại trừ phức CoTSPc không có tính chất xúc tác quang oxy hóa, 3 phức còn lại đều có hoạt tính xúc tác quang oxy hóa. Kết quả này phù hợp với kết quả đạt được từ tính toán lượng tử ở trên.

Key words: Phthalocyanine, Sulfide, Singlet oxygen, Chất nhạy quang, chênh lệch năng lượng.

STUDY ON PHOTOCATALYTIC PROPERTY OF METALLOTETRASULFOPHTHALOCYANINE COMPLEXES

Le Thanh Minh¹, Phan Thanh Thao¹, Phan Minh Tan²

¹Institute of Chemical Technology

²Department of Science and Technology HCMC

Abstract

The position of Orbital energy levels of Metallo-tetrasulfophthalocyanine were calculated using Hyperchem software, version 8.0. It was found that the energy gap between the singlet and triplet states of ZnTSPc, AlTSPc and FeTSPc are more than energy of one of the singlet levels of oxygen. In contrast, energy gap of CoTSPc is less than that of the singlet levels of oxygen. Investigating in oxidation and photooxidation of sulfide catalyzed by these soluble phthalocyanines were carried out. The result showed that they have catalytic activities in the oxidation of Sulfide. Except for CoTSPc, all of them exhibited the photocatalysts property. These results were fixed with the results obtained from the quantum calculations

Key words: Phthalocyanine, Sulfide, Singlet oxygen, Photosensitizer, energy gap.