## THE INFLUENCE OF PH CONDITIONS ON THE ADSORPTION OF METHYLENE BLUE ON THE SURFACE OF TIO<sub>2</sub> NANOTUBES

Nguyen Tran Thao Nhi<sup>1</sup>, Pham Van Viet<sup>1+</sup>, Vu Hoang Nam<sup>1\*</sup>, Cao Minh Thi<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Materials Science and Technology, University of Science-VNU Ho Chi Minh

<sup>2</sup> Ho Chi Minh University of Technology (HUTECH)

\*pvviet@hcmus.edu.vn, \*vhnam@hcmus.edu.vn

## **Abstract**

In this study, we provide detail of the adsorption of methylene blue (MB) on the surface of TiO<sub>2</sub> nanotubes (TNTs) at different pH conditions. It is shown that adsorption capacity of TNTs is strongly dependent on pH of the solution. The absorption is maximized at pH 5 and minimum at pH 1. The results of calculations based on the density functional theory indicate that Cl atom plays an important role in the adsorption of MB on the surface of TNTs. The adsorption is increased or decreased by the OH group or H atom on the TNTs surface, respectively.

Keywords: methylene blue, TiO<sub>2</sub> nanotubes, pH conditions, density functional theory

## Tóm tắt

Trong nghiên cứu này, chúng tôi tôi thể hiện chi tiết về sự hấp phụ methylene blue (MB) trên bề mặt ống nano TiO<sub>2</sub> (TNTs) tại các điều kiện pH môi trường khác nhau. Nó cho thấy rằng khả năng hấp phụ phụ thuộc mạnh vào pH của môi trường. Sự hấp phụ lớn nhất tại pH 5 và nhỏ nhất ở pH 1. Các kết quả tính toán dựa trên phiếm hàm mật độ chỉ ra rằng nguyên tử Cl đóng vai trò quan trọng của sự hấp phụ MB. Sự hấp phụ thì được tăng cường hoặc giảm bớt tương ứng bởi nhóm OH hoặc nguyên tử H trên bề mặt TNTs.

Keywords: methylene blue, ống nano TiO2, các điều kiện pH, lý thuyết phiếm hàm mật độ