

VẬT LIỆU QUANG XÚC TÁC NANOCOMPOZIT AgI/BiVO₄ CHO ỨNG DỤNG KHÁNG KHUẨN

● TRƯƠNG THỊ HẠNH

Viện Tiên tiến Khoa học và Công nghệ
Trường Đại học Văn Lang, Thành phố Hồ Chí Minh

TÓM TẮT:

Sự gia tăng hàm lượng AgI dẫn đến sự thu hẹp dần năng lượng vùng cấm, từ 2,4 eV của nền BiVO₄ (BV0) xuống lần lượt 2,35; 2,0 và 1,9 eV (tương ứng với AgI/BV1, AgI/BV2 và AgI/BV3), qua đó cải thiện đáng kể khả năng hấp thụ ánh sáng và quá trình vận chuyển điện tích. Sự thu hẹp vùng cấm này thúc đẩy quá trình tách hiệu quả các cặp electron-lỗ trống, từ đó tăng cường hình thành các gốc oxy hoạt hóa như $\bullet\text{O}_2^-$ và $\bullet\text{OH}$. Mẫu AgI/BV3 (với hàm lượng AgI cao nhất) thể hiện hiệu suất quang xúc tác vượt trội, đồng thời có MIC thấp nhất đối với *S. aureus*, cho thấy hoạt tính kháng khuẩn ưu việt. Kết quả khẳng định tiềm năng của nanocompozit AgI/BiVO₄ như một chất xúc tác quang hiệu quả; việc điều chỉnh tỷ lệ AgI/BiVO₄ cho phép tối ưu hóa khả năng phân hủy chất ô nhiễm, đặc biệt trong xử lý nước thải y tế.

Từ khóa: quang xúc tác, đồng kết tủa, cấu trúc dị thể, phân hủy, kháng sinh, MIC.

1. Đặt vấn đề

Sự gia tăng vi khuẩn kháng thuốc trong nước thải bệnh viện đang đặt ra thách thức lớn đối với môi trường và sức khỏe cộng đồng, trong khi các phương pháp xử lý truyền thống còn nhiều hạn chế. Quang xúc tác được xem là hướng tiếp cận tiềm năng nhờ khả năng tạo ra các gốc oxy hóa mạnh (ROS) để tiêu diệt vi khuẩn và phân hủy chất ô nhiễm. Trong nghiên cứu này, vật liệu nanocompozit AgI/BiVO₄ được lựa chọn để khảo sát nhằm đánh giá khả năng hấp thụ ánh sáng, tạo ROS và hiệu quả xử lý vi sinh vật trong nước thải y tế.

2. Tổng quan nghiên cứu

Nước thải bệnh viện được xem là môi trường lý tưởng cho sự phát triển và lan truyền của nhiều tác nhân gây bệnh như vi khuẩn, virus, nấm và ký sinh trùng. Đặc biệt, loại nước thải này còn chứa dư lượng kháng sinh cùng với vi khuẩn kháng kháng sinh, có thể ức chế các vi sinh vật nhạy cảm và thúc đẩy sự lan rộng của các chủng kháng thuốc trong môi trường nước (Kaur et al. 2020). Theo World Health Organization (WHO), nhiều chủng vi khuẩn kháng kháng sinh đã được xếp vào nhóm nguy cơ cao, tiêu biểu như *Enterococcus*

kháng vancomycin, *Enterobacteriaceae* kháng carbapenem, *Acinetobacter* spp., *Pseudomonas aeruginosa* đa kháng và *Staphylococcus aureus* kháng methicillin (MRSA) (Werkneh et al., 2023).

Trong bối cảnh đó, quang xúc tác nổi lên như một giải pháp xử lý hiệu quả và thân thiện môi trường nhờ khả năng tạo các gốc oxy hóa mạnh (ROS) để phân hủy chất ô nhiễm và tiêu diệt vi sinh vật (Zhang et al. 2023). Nhằm nâng cao hiệu suất quang xúc tác, nhiều chiến lược thiết kế và biến tính vật liệu nano đã được phát triển và áp dụng rộng rãi, bao gồm pha tạp, tạo khuyết tật, biến tính bề mặt, và đặc biệt là xây dựng cấu trúc dị thể (Aniket et al., 2024). Cách tiếp cận này giúp cải thiện hấp thụ ánh sáng, tăng cường tách cặp điện tử - lỗ trống và thúc đẩy quá trình tạo ROS, từ đó nâng cao hiệu quả quang xúc tác và hoạt tính kháng khuẩn (Kato et al. 2024).

Các vật liệu chứa bạc như AgBr, Ag₂O, AgI và Ag₃VO₄ được biết đến với hoạt tính mạnh dưới ánh sáng khả kiến và khả năng kháng khuẩn vượt trội (Warshagha 2023). Trong khi đó, BiVO₄ là chất bán dẫn vùng cấm hẹp, có khả năng hấp thụ ánh sáng tốt và dễ hình thành cấu trúc dị thể, giúp cải thiện hiệu quả tách điện tích (Xu et al. 2021). Sự kết hợp giữa AgI và BiVO₄ tạo nên hệ vật liệu composit có khả năng mở rộng vùng hấp thụ ánh sáng, tăng cường tạo ROS và nâng cao hiệu quả xử lý đồng thời chất ô nhiễm và vi sinh vật.

Trong nghiên cứu trước, chúng tôi đã tổng hợp thành công nanocomposit AgI/BiVO₄ bằng phương pháp đồng kết tủa thủy nhiệt và khảo sát các tính chất hóa lý của vật liệu (TT Hạnh, 2025). Nghiên cứu này tập trung điều chỉnh hàm lượng AgI nhằm kiểm soát cấu trúc dị thể, tối ưu hóa vùng cấm, tăng khả năng tách điện tích và nâng cao hiệu suất quang xúc tác. Kết quả DRS (Diffuse Reflectance Spectroscopy) cho thấy, sự thu hẹp vùng cấm, trong khi việc xác định vị trí dải năng lượng CB-VB xác nhận khả năng tạo các gốc oxy hoạt hóa (ROS) dưới ánh sáng khả kiến. Vật liệu thể hiện hoạt tính kháng khuẩn mạnh, với giá trị MIC thấp đối với *Staphylococcus aureus*, cho thấy tiềm năng ứng dụng trong xử lý nước thải bệnh viện.

3. Vật liệu và phương pháp

3.1. Tổng hợp vật liệu AgI/BiVO₄

Các nanocomposit AgI/BiVO₄ được tổng hợp bằng phương pháp đồng kết tủa. Cụ thể, dung dịch 1 được chuẩn bị bằng cách hòa tan Bi(NO₃)₃•5H₂O (0,5 mol) và KI (0,005 mol) trong 50 mL nước cất. Đồng thời, dung dịch 2 gồm AgNO₃ (0,005 mol) và NH₄VO₃ (0,05 mol) được hòa tan trong 50 mL nước cất khác. Dung dịch 2 được thêm từ từ vào dung dịch 1 và khuấy liên tục, sau đó gia nhiệt ở 60°C trong 1 giờ. Hỗn hợp (pH = 7) được chuyển vào bình phản ứng (100 mL) và xử lý nhiệt ở 180°C trong 6 giờ. Sản phẩm sau đó được làm nguội, lọc, rửa sạch và sấy khô ở 60°C.

Các mẫu khác cũng được tổng hợp theo quy trình tương tự, trong đó nồng độ Ag⁺ và I⁻ được điều chỉnh lần lượt là 0,02 và 0,05 mol, trong khi nồng độ Bi³⁺ và VO₃⁻ được giữ cố định ở 0,05 mol. Các nanocomposit được ký hiệu là AgI/BV1, AgI/BV2 và AgI/BV3, tương ứng với nồng độ AgI lần lượt là 0,005; 0,02 và 0,05 mol.

3.2. Đánh giá chỉ số MIC

Thử nghiệm nồng độ ức chế tối thiểu (MIC) được thực hiện cho BiVO₄ (BV0) và các mẫu AgI/BiVO₄ với các tỷ lệ mol khác nhau. Mẫu được chuẩn bị ở nồng độ gốc 5.000 ppm và cho vào giếng thứ nhất của đĩa -96 giếng chứa 100 µL môi trường Mueller-Hinton Broth (MHB). Tiến hành pha loãng 2 lần liên tiếp đến giếng thứ 10, mỗi giếng chứa 100 µL MHB. Sau đó, bổ sung 100 µL huyền phù vi khuẩn (10⁵-10⁶ CFU/mL) và 40 µL dung dịch resazurin vào mỗi giếng.

Đối chứng dương gồm MHB, resazurin và vi khuẩn; đối chứng âm gồm MHB và resazurin. Nồng độ AgI/BiVO₄ trong đĩa được trình bày ở Bảng 1. Sau 24 giờ ủ, màu xanh biểu thị không có sự phát triển của vi khuẩn, trong khi màu hồng cho thấy vi khuẩn sống sót.

Tất cả thí nghiệm được thực hiện lặp lại 3 lần và kết quả được biểu diễn dưới dạng giá trị trung bình ± độ lệch chuẩn (SD).

Bảng 1. Nồng độ AgI/BiVO₄ (ppm) trong 96 giếng

Mẫu	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Đối chứng	
											(+)	(-)
AgI/BV 3	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
AgI/BV 2	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
AgI/BV 1	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
BV0	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x
	5.000	2.500	1.250	625	312,5	156,25	78,13	39,06	19,53	9,76	x	x

4. Kết quả và thảo luận

4.1. Đặc tính quang học của nanocompozit AgI/BiVO₄

Phổ UV-Vis DRS của các mẫu trong vùng 300-700 nm được sử dụng để xác định năng lượng vùng cấm (E_g) theo phương pháp Tauc (Hình 1a). Kết quả cho thấy, E_g của các nanocompozit AgI/BiVO₄ giảm dần theo sự gia tăng hàm lượng AgI, đạt các giá trị 2,35; 2,0 và 1,9 eV tương ứng với AgI/BV1, AgI/BV2 và AgI/BV3 (Hình 1c), thấp hơn so với chất nền BiVO₄ (2,4 eV, Hình 1b). Các giá trị E_g được xác định từ đồ thị (αhν)² theo hν bằng cách ngoại suy đến điểm giao tại (αhν)² = 0 (Hanh et al., 2024).

Các thế dải dẫn (E_{CB}) và dải hóa trị (E_{VB}) được xác định để làm rõ khả năng chuyển dịch electron-lỗ trống và hình thành các gốc oxy hoạt hóa trong hệ (Chen et al. 2020), theo biểu thức sau:

E_{VB} = X - E_e + 1/2 E_g (1)

E_{CB} = E_{VB} - E_g (2)

Trong đó, X là độ âm điện tuyệt đối của chất bán dẫn; E_e là năng lượng của electron tự do so với điện cực hydro chuẩn (~4,5 eV); và E_g là năng lượng vùng cấm (eV).

Độ âm điện tuyệt đối của nguyên tố được tính theo Mulliken (Mulliken et al. 1934):

X = ½ (E_{Ionization} + E_{Electron affinity}) (3)

Trong đó E_{ionization} là năng lượng ion hóa và E_{electron affinity} là ái lực electron, được lấy từ các dữ liệu chuẩn (Hanh et al. 2025). Độ âm điện của hợp chất được xác định bằng phương pháp trung bình hình học từ các giá trị này (Clark-Carter D., 2010).

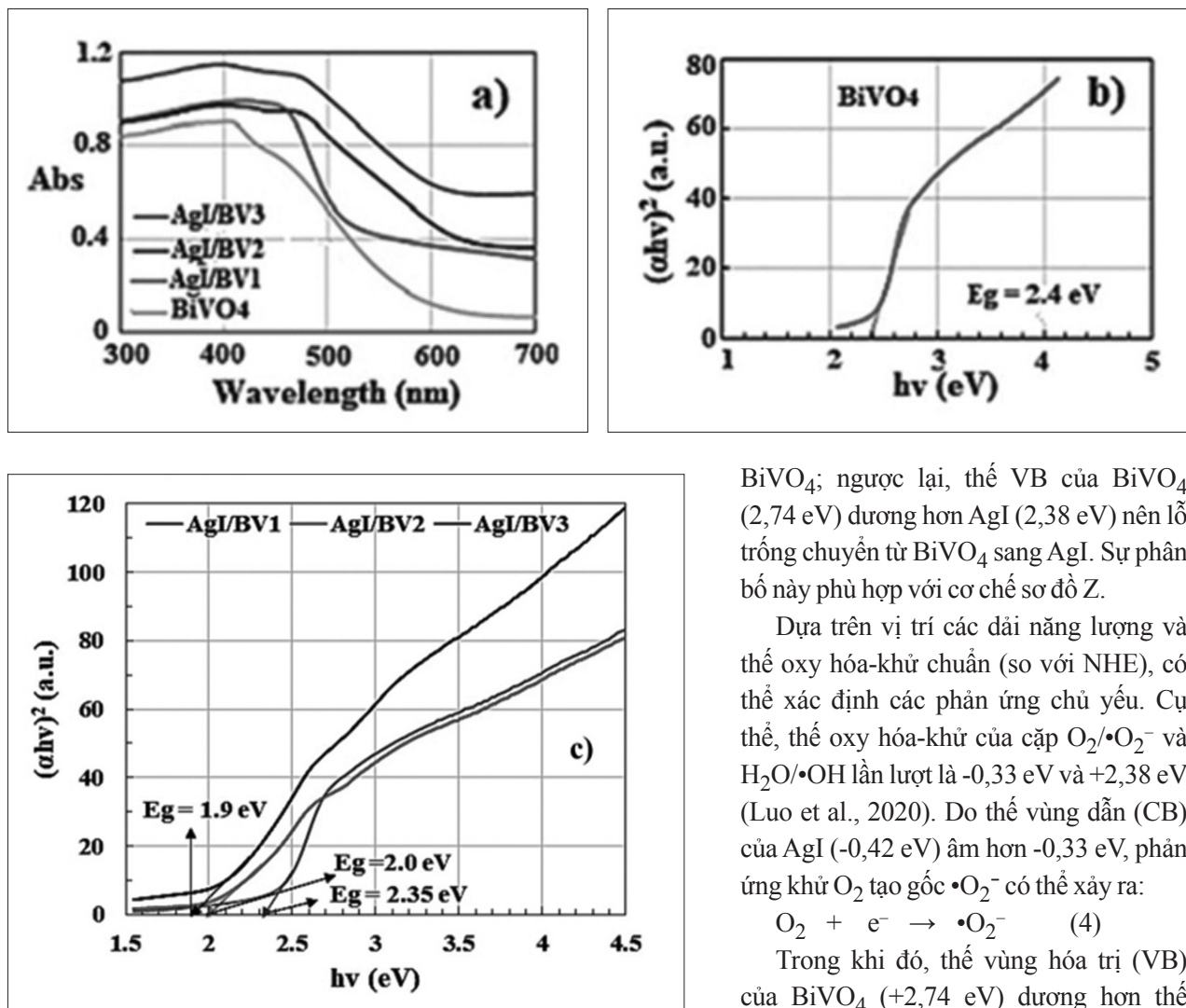
Độ âm điện tuyệt đối của AgI và BiVO₄ được xác định lần lượt là 5,48 và 6,04 eV. Từ đó, E_{VB} và E_{CB} của AgI tìm được lần lượt là 2,38 và -0,42 eV, trong khi đối với BiVO₄, các giá trị tương ứng là 2,74 và 0,34 eV (Bảng 2). Trong nghiên cứu này, năng lượng vùng cấm (E_g) của BiVO₄ được xác định là 2,4 eV, còn E_g của AgI được tham khảo từ tài liệu khoảng 2,8 eV (Guo et al., 2019).

Theo Bảng 2, thế CB của AgI (-0,42 eV) âm hơn BiVO₄ (0,34 eV) nên electron chuyển từ AgI sang

Bảng 2. Giá trị độ âm điện Mulliken (X), thế vùng dẫn (E_{CB}) và vùng hóa trị (E_{VB}) của AgI và $BiVO_4$

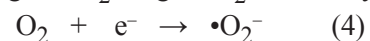
Element	Ionization Energy (eV)	Electron Affinity (eV)	X (eV)	E_{VB} (eV)	E_{CB} (eV)
Ag	7,576	1,30	4,44		
I	10,45	3,06	6,76		
AgI			5,48	2,38	-0,42
Bi	7,29	0,95	4.12		
V	6,74	0,53	3,64		
O	13,62	1,46	7,54		
$BiVO_4$			6,04	2,74	0,34

Hình 1: Phổ UV-Vis DRS (a); Đồ thị Tauc của $BiVO_4$ (b); và các đồ thị Tauc của AgI/BV1, AgI/BV2 và AgI/BV3 (c)



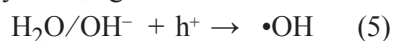
$BiVO_4$; ngược lại, thế VB của $BiVO_4$ (2,74 eV) dương hơn AgI (2,38 eV) nên dễ trống chuyển từ $BiVO_4$ sang AgI. Sự phân bố này phù hợp với cơ chế sơ đồ Z.

Dựa trên vị trí các dải năng lượng và thế oxy hóa-khử chuẩn (so với NHE), có thể xác định các phản ứng chủ yếu. Cụ thể, thế oxy hóa-khử của cặp $O_2/\cdot O_2^-$ và $H_2O/\cdot OH$ lần lượt là -0,33 eV và +2,38 eV (Luo et al., 2020). Do thế vùng dẫn (CB) của AgI (-0,42 eV) âm hơn -0,33 eV, phản ứng khử O_2 tạo gốc $\cdot O_2^-$ có thể xảy ra:



Trong khi đó, thế vùng hóa trị (VB) của $BiVO_4$ (+2,74 eV) dương hơn thế

$\text{H}_2\text{O}/\cdot\text{OH}$ (+2,38 eV), cho phép phản ứng oxy hóa tạo gốc $\cdot\text{OH}$:



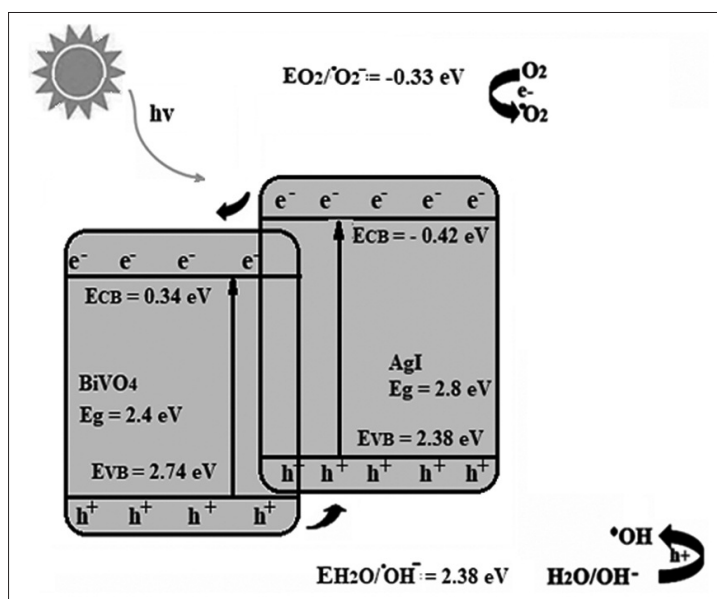
Cơ chế quang xúc tác dựa trên sự hình thành các gốc hoạt hóa ($\cdot\text{OH}$, $\cdot\text{O}_2^-$) phân hủy chất ô nhiễm.

Trong hệ dị thể sơ đồ Z, cả BiVO_4 và AgI đều hấp thụ ánh sáng và tạo ra các cặp electron-lỗ trống (e^- - h^+). Electron tại CB của AgI tham gia khử O_2 tạo $\cdot\text{O}_2^-$, trong khi lỗ trống tại VB của BiVO_4 oxy hóa H_2O tạo $\cdot\text{OH}$ (Sơ đồ 1). Các gốc hoạt tính này tiếp tục phân hủy chất hữu cơ thành CO_2 , H_2O và các sản phẩm không độc. Do đó, việc tăng hàm lượng AgI góp phần cải thiện khả năng tách điện tích, từ đó nâng cao hiệu suất quang xúc tác của hệ AgI/ BiVO_4 dưới ánh sáng mặt trời. (Sơ đồ 1)

4.2. Hoạt tính kháng khuẩn *Staphylococcus aureus* của AgI/ BiVO_4

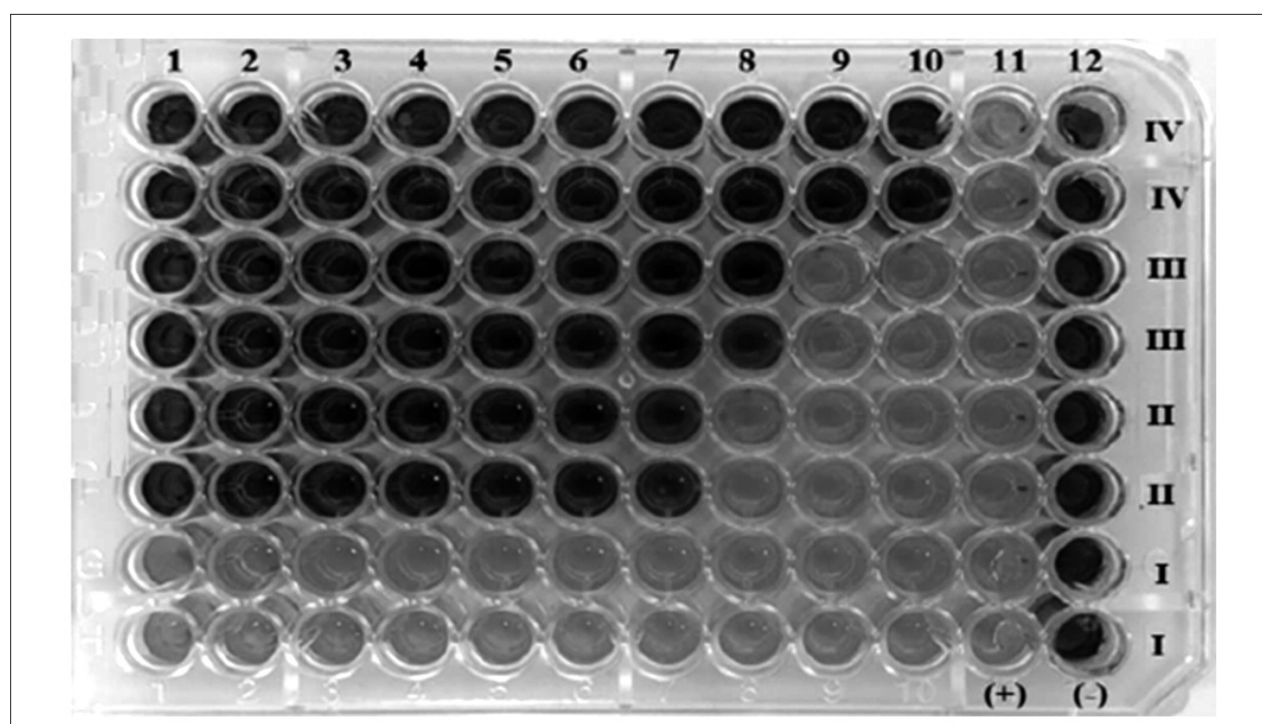
Hình 2 minh họa đĩa 96 giếng với dãy pha loãng hai lần của vật liệu thử. Cột 11 là đối chứng dương (+) gồm *S. aureus*, môi trường MHB, AgI/ BiVO_4 và

Sơ đồ 1. Cơ chế tạo gốc $\cdot\text{O}_2^-$ và $\cdot\text{OH}$ trong quá trình quang xúc tác



chỉ thị resazurin; cột 12 là đối chứng âm (-), không có vi khuẩn. Màu hồng (trắng) cho thấy vi khuẩn còn hoạt động, trong khi màu xanh (đen) biểu thị sự ức chế sinh trưởng. Giá trị MIC được xác định dựa trên sự thay đổi màu này.

Hình 2. Kết quả MIC của *S. aureus* với các mẫu BV0 (BiVO_4), AgI/BV1, AgI/BV2 và AgI/BV3



Mẫu BiVO_4 không chứa AgI (I-BV0) cho thấy, vi khuẩn phát triển ở tất cả các giếng (màu hồng-trắng). Khi tăng hàm lượng AgI trong khi giữ nguyên BiVO_4 , MIC được ghi nhận ở các mẫu II (AgI/BV1), III (AgI/BV2) và IV (AgI/BV3), mỗi mẫu chiếm 2 hàng trên đĩa. Cụ thể, MIC xuất hiện tại các cột 7, 8 và 10, tương ứng với các nồng độ 78,13; 39,06 và 9,76 ppm cho AgI/BV1, AgI/BV2 và AgI/BV3. Các nồng độ pha loãng được xác định theo Bảng 1.

Kết quả cho thấy, hoạt tính kháng khuẩn của AgI/ BiVO_4 phụ thuộc vào hàm lượng AgI. Khi tỷ lệ mol AgI tăng từ 0,005 (BV1) lên 0,02 (BV2) và 0,05 (BV3), giá trị MIC giảm rõ rệt, chứng tỏ hiệu quả kháng khuẩn được cải thiện. Mẫu BV3 có MIC thấp nhất, thể hiện khả năng ức chế *S. aureus* mạnh nhất.

Vai trò của AgI trong cấu trúc dị thể đã được nhiều

nghiên cứu xác nhận thông qua sự hình thành các gốc hoạt tính (ROS), góp phần nâng cao hoạt tính quang xúc tác, thúc đẩy phân hủy chất ô nhiễm và bất hoạt vi khuẩn gây bệnh. Ngoài ra, ion Ag^+ từ AgI có thể tương tác với protein và ức chế quá trình sao chép DNA (Liu et al. 2024).

5. Kết luận

AgI/ BiVO_4 được tổng hợp bằng phương pháp đồng kết tủa, cho thấy khả năng tạo các gốc hoạt hóa ROS ($\cdot\text{O}_2^-$, $\cdot\text{OH}$) hiệu quả. Tăng tỷ lệ AgI giúp giảm năng lượng vùng cấm, từ đó nâng cao hoạt tính quang xúc tác và kháng khuẩn. Mẫu AgI/BV3 đạt MIC thấp nhất (9,76 ppm) đối với *S. aureus*. Kết quả cho thấy, tiềm năng ứng dụng của AgI/ BiVO_4 trong xử lý nước thải y tế, đồng thời loại bỏ chất ô nhiễm và vi khuẩn kháng thuốc ■

TÀI LIỆU THAM KHẢO:

- Hạnh T.T. (2025). Những đặc trưng của cấu trúc dị thể nanocompozit -AgI/ BiVO_4 . Tạp chí Công Thương, Số 25, Tr. 234-239.
- Aniket B., Jayati R. D. and Ramakrishnan G. (2024). Recent advances in semiconductor heterojunctions: A detailed review of the fundamentals of photocatalysis, charge transfer mechanism and materials. RSC Appl. Interfaces, 1, 43-69.
- Chen F. Y., Zhang X., Tang Y. B., Wang X. G. and Shu K. K. (2020). Facile and rapid synthesis of a novel spindle-like heterojunction BiVO_4 showing enhanced visible-light-driven photoactivity. RSC Adv. 10, 5234-5240.
- Clark-Carter D. (2010). Measures of central tendency. In International Encyclopedia of Education 3rd ed., 264-266.
- Guo M., Bi C., Cao J. and Chen S. (2019). Improving the stability and photocatalytic activity of AgI via constructing novel $\text{Bi}_{12}\text{O}_{17}\text{Cl}_2/\text{AgI}$ composite Mater. Lett. 257, 126713.
- Hanh T. T., Bang H. T. and Thuan C. N. (2024). ZnO/ TiO_2 photocatalytic nanocomposite for dye and bacteria removal in wastewater. Mater. Res. Express 11, 085003.
- Hanh T. T., Tho T. P., Nhi D. B., Ha T. L. and Thuan C. N. (2025). Design of AgI/ BiVO_4 heterostructures for photocatalytic antibiotic removal and antimicrobial action. Mater. Res. Express 12, 085003.
- Kato S, Kansha Y (2024). Comprehensive review of industrial wastewater treatment Techniques Environ. Sci. Pollut. Res. 31, 51064-51097.
- Kaur R., Yadav B. and Tyagi R.D. (2020). Microbiology of hospital wastewater Curr. Dev. Biotechnol. Bioeng. 2020, 103-148.
- Liu X. B., Dai X. H., Li L., Shen J., Li W. and Li C. Y. (2024). Antibacterial activity of $\text{Ag}^+/\text{MAF-7}$ nanocomposites against *Enterococcus faecalis*. AIP Adv. 14, 115303
- Luo L., Zhang T., Wang M., Yun R. and Xiang X. (2020). Recent Advances in Heterogeneous Photo-Driven Oxidation of Organic Molecules by Reactive Oxygen Species. ChemSusChem. 13(19), 5173-5184.
- Mulliken, R.S. (1934). A New Electroaffinity Scale: Together with Data on Valence States and on Ionization Potential and Electron Affinities. J. Chem. Phys, 2, 782-793.

Warshagha M. Z. A., Muneer M., Althagafi I. I. and Ahmed S. A. (2023). Highly efficient and stable AgI-CdO nanocomposites for photocatalytic and antibacterial activity. RSC Adv. 13, 5013-26.

Werkneh A. A. and Islam M. A. (2023). Post-treatment disinfection technologies for sustainable removal of antibiotic residues and antimicrobial resistance bacteria from hospital wastewater. Heliyon 9(4), e15360.

Xu M., Yang J., Sun C., Zhang M. and Chen J. (2021). Facile assembly of BiVO₄/protonated g-C₃N₄/AgI with a novel dual Z-scheme mechanism for visible-light photocatalytic degradation of Rhodamine B. J. Mater. Sci. 56, 1328-1346.

Zhang Y., Ju S., Casals G., Tang J., Lin Y., Li X., Liang L., Jia Z., Zeng M. and Casals E. (2023). Facile aqueous synthesis and comparative evaluation of TiO₂-semiconductor and TiO₂-metal nanohybrid photocatalysts in antibiotics degradation under visible light. RSC Adv. 13, 33187-33203.

Ngày nhận bài: 09/01/2026

Ngày phản biện đánh giá và sửa chữa: 21/01/2026

Ngày chấp nhận đăng bài: 12/02/2026

AgI/BiVO₄ NANOCOMPOSITE PHOTOCATALYST FOR ANTIBACTERIAL APPLICATIONS

● **TRUONG THI HANH**

Science and Technology Advanced Institute,
Van Lang University, Ho Chi Minh City, Vietnam

ABSTRACT:

Increasing the AgI content in AgI/BiVO₄ nanocomposites resulted in a progressive narrowing of the band gap from 2.4 eV for pristine BiVO₄ (BV0) to 2.35, 2.0, and 1.9 eV for AgI/BV1, AgI/BV2, and AgI/BV3, respectively, thereby enhancing visible-light absorption and charge transport properties. This band gap reduction facilitated more efficient electron-hole separation, promoting the generation of reactive oxygen species such as •O₂⁻ and •OH. Among the synthesized samples, AgI/BV3, with the highest AgI loading, exhibited the most pronounced photocatalytic activity and the lowest minimum inhibitory concentration (MIC) against *S. aureus*, indicating superior antimicrobial efficacy. These findings demonstrate the strong potential of AgI/BiVO₄ nanocomposites as effective photocatalysts and highlight the critical role of compositional tuning in optimizing pollutant degradation performance, particularly for applications in medical wastewater treatment.

Keywords: photocatalysis, co-precipitation, heterostructures, degradation, antibiotics, MIC.