

# MÔ HÌNH HÓA CÁC TÁC ĐỘNG TIỀM ẨN ĐẾN MÔI TRƯỜNG CỦA QUÁ TRÌNH TỔNG HỢP VẬT LIỆU $C_3N_4$ MANG GRAPHENE CHẤM LƯỢNG TỬ

ĐẶNG HOA LỮ, NGUYỄN THỊ PHƯƠNG THẢO<sup>1</sup>, TRẦN TRUNG KIÊN<sup>1</sup>, NGUYỄN VIỆT THẮNG<sup>1</sup>, TRÀ VĂN TUNG<sup>1</sup>, NGUYỄN LÊ MINH TRÍ<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Viện Môi trường và Tài nguyên, Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh

## Tóm tắt

Nghiên cứu tính toán các chỉ số môi trường cho 4 trường hợp và 3 dạng nguồn năng lượng khác nhau được khảo sát của quá trình tổng hợp  $C_3N_4$  mang GQDs bằng phương pháp phân tích dòng vật chất và công cụ WAR. Nghiên cứu cho thấy, vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs làm tăng khả năng tác động đến môi trường của quá trình tổng hợp. Các hóa chất được sử dụng để tổng hợp và vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs tạo thành không có khả năng gây ra hiện tượng ấm lên toàn cầu, sự suy giảm tầng ô-dôn và hiện tượng oxy hóa quang hóa, tuy nhiên, lại có khả năng gây ra hiện tượng axit hóa. Việc chuyển đổi từ sử dụng than đá sang khí tự nhiên góp phần làm giảm thiểu các tác động của quá trình tổng hợp vật liệu đến môi trường.

**Từ khóa:** Graphene chấm lượng tử,  $C_3N_4$ , phân tích dòng vật chất, khí tự nhiên.

**Ngày nhận bài:** 2/4/2025; **Ngày sửa chữa:** 5/5/2025; **Ngày duyệt đăng:** 2/6/2025.

## Modelling for environmental impact analysis of the synthesis of graphene quantum dots - loaded- $C_3N_4$

### Abstract

The study calculated potential environmental impact indexes for four scenarios and three different types of energy sources in the synthesis process of GQDs-loaded  $C_3N_4$  using material flow analysis (SFA) and the WAR (Waste Reduction Algorithm) tool. The results showed that the GQDs-loaded  $C_3N_4$  material increases the environmental impact potential of the synthesis. The chemicals used in the synthesis, as well as the obtained GQDs-loaded  $C_3N_4$  material, do not contribute to global warming, ozone depletion, or photochemical oxidation. However, they do have the potential to cause acidification. Transitioning from coal to natural gas as an energy source helps to reduce the environmental impacts of the material synthesis process.

**Keywords:** Graphene quantum dots,  $C_3N_4$ , material flow analysis, natural gas.

**JEL Classifications:** Q54, Q55, Q57.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Vật liệu Graphene chấm lượng tử (GQDs) là các tấm graphene có cấu trúc 0D, có kích thước nhỏ hơn 10 nm đang nhận được sự quan tâm của cộng đồng khoa học nhờ có các đặc tính như tính trơ về mặt hóa học, độ tinh thấp, khả năng tương thích sinh học, thân thiện với môi trường, hoạt tính huỳnh quang, phân tán trong dung dịch và dễ dàng biến tính bề mặt (Shehab et al., 2017). Nhờ đó, vật liệu GQDs được ứng dụng để chế tạo ra các thiết bị quang điện, các cảm biến và được ứng dụng trong việc chẩn đoán bằng hình ảnh (Jin et al., 2015; Razmi and Mohammad-Rezaei, 2013; Zhao et al., 2011).

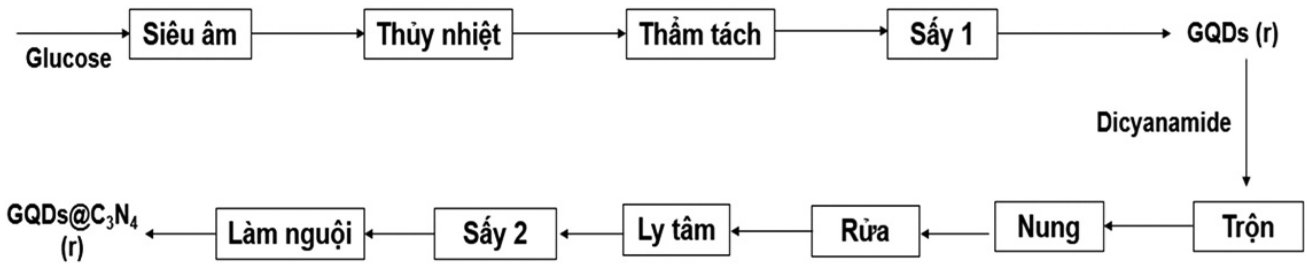
Graphitic carbon nitride ( $C_3N_4$ ) được biết đến là vật liệu có cấu trúc nano sở hữu độ bền cao và không độc về mặt hóa học. Vật liệu  $C_3N_4$  có thành phần cấu tạo gồm các nguyên tố C và N chiếm lượng lớn và một lượng nhỏ nguyên tố H. Các tiền chất được sử dụng để tổng hợp  $C_3N_4$  bao gồm ammelide, ammeline, melamine, melam, melem, và melon. Vật liệu  $C_3N_4$  được xem là lớp vật liệu đa chức năng, có nhiều ứng dụng trong

các lĩnh vực về điện hóa, xúc tác và năng lượng nhờ vào các tính chất hóa lý, quang học và khả năng dẫn điện đặc trưng của vật liệu  $C_3N_4$ . Tuy nhiên, một trong những nhược điểm của vật liệu  $C_3N_4$  là khả năng hấp thụ ánh sáng trong vùng khả kiến thấp. Do đó, các nhà khoa học đã chế tạo ra vật liệu GQDs được mang trên vật liệu  $C_3N_4$  để tăng cường khả năng hấp thụ ánh sáng trong vùng khả kiến của vật liệu  $C_3N_4$  (Han et al., 2024). Đồng thời, vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs cho thấy khả năng hấp thụ ánh sáng trong vùng tử ngoại cũng tăng lên rõ rệt (Phuong Thao et al., 2024). Tuy nhiên, chưa có nghiên cứu nào sử dụng công cụ tính toán để mô phỏng các tác động tiềm ẩn đến môi trường của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs. Vì vậy, nghiên cứu này tiến hành mô phỏng các tác động tiềm ẩn đến môi trường của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs thông qua công cụ tính toán WAR.

## 2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

### 2.1. Đối tượng nghiên cứu

Các thông số môi trường được tính toán từ quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs (Phuong Thao et



Hình 1. Quy trình tổng hợp vật liệu C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mang GQDs

al., 2024). GQDs được tổng hợp từ quá trình thủy nhiệt glucose và thẩm tách dung dịch sau thủy nhiệt bằng màng thẩm tách. GQDs tạo thành được phối trộn với dicyanamide rồi tiến hành nung ở 550°C. Tiến hành lọc, rửa để thu được vật liệu C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mang GQDs (Hình 1).

2.2. Phương pháp nghiên cứu

- Phương pháp tính toán các chỉ số môi trường

Nghiên cứu sử dụng công cụ WAR để tính toán các chỉ số môi trường của quá trình tổng hợp vật liệu C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mang GQDs bao gồm: Chỉ số rủi ro gây độc tính đối với con người thông qua đường tiêu hóa (HTPI), chỉ số rủi ro gây độc tính đối với con người qua tiếp xúc (HTPE), chỉ số rủi ro gây độc tính đối với môi trường nước (ATP), chỉ số rủi ro gây độc tính đối với môi trường đất (TTP), chỉ số rủi ro gây ra hiện tượng ấm lên toàn cầu (GWP), chỉ số rủi ro gây suy giảm tầng ô-dôn (ODP), chỉ số rủi ro gây ra hiện tượng oxy hóa quang hóa (PCOP), và chỉ số rủi ro gây ra hiện tượng axit hóa (AP). Các chỉ số này được tính toán dựa trên các dữ liệu về lưu lượng của các dòng nguyên vật liệu, về tỉ phần khối lượng của các thành phần tham gia vào quá trình tổng hợp (Barrett et al., 2011). Các chỉ số này phản ánh các tác động môi trường tiềm ẩn thông qua các thông số PEI bao gồm: tốc độ phát thải PEI ra khỏi hệ thống do các quá trình hóa học tạo thành,  $i_{ra}^{(cp)}$ ; tốc độ phát thải PEI ra khỏi hệ thống do các quá trình sản sinh năng lượng có ích,  $i_{ra}^{(ep)}$ ; tốc độ phát thải PEI ra khỏi hệ thống do sự giải phóng năng lượng dư thừa trong quá trình sản sinh năng lượng,  $i_{we}^{(cp)}$ ; PEI phát thải ra khỏi hệ thống do sự giải phóng năng lượng dư

thừa từ các quá trình hóa học,  $i_{we}^{(ep)}$ . Các giá trị này được tính dựa vào cân bằng khối lượng và năng lượng, cùng với thông tin về tác động môi trường của các hợp chất hóa học và năng lượng theo công thức sau:

$$i_{ra}^{(t)} = i_{ra}^{(cp)} + i_{ra}^{(ep)} + i_{we}^{(cp)} + i_{we}^{(ep)} \quad (1)$$

$$i_{ra}^{(t)} = \frac{i_{ra}^{(cp)} + i_{ra}^{(ep)} + i_{we}^{(cp)} + i_{we}^{(ep)}}{\sum P P_P} \quad (2)$$

$$i_{san\ sinh}^{(t)} = i_{ra}^{(cp)} - i_{vào}^{(cp)} + i_{ra}^{(ep)} - i_{vào}^{(ep)} + i_{we}^{(cp)} + i_{we}^{(ep)} \quad (3)$$

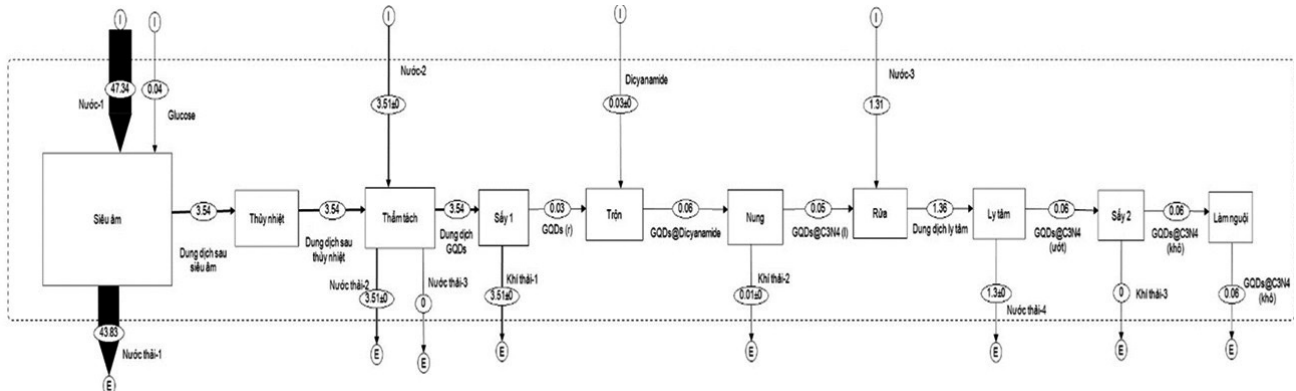
$$i_{san\ sinh}^{(t)} = \frac{i_{ra}^{(cp)} - i_{vào}^{(cp)} + i_{ra}^{(ep)} - i_{vào}^{(ep)} + i_{we}^{(cp)} + i_{we}^{(ep)}}{\sum P P_P} \quad (4)$$

Trong đó, PP là lưu lượng dòng của sản phẩm thứ p tạo thành trong quá trình tổng hợp.

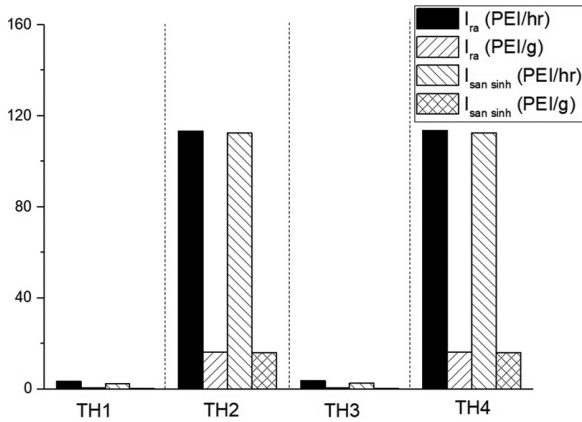
Quá trình tính toán các chỉ số tác động môi trường được xem xét với 4 trường hợp: không bao gồm dòng sản phẩm và dòng năng lượng trong quá trình tính toán (TH1); chỉ bao gồm dòng sản phẩm trong quá trình tính toán (TH2); chỉ bao gồm dòng năng lượng trong quá trình tính toán (TH3); bao gồm cả dòng sản phẩm và dòng năng lượng trong tính toán (TH4). Trong nghiên cứu này, than đá là vật liệu được sử dụng làm nguồn năng lượng cung cấp cho quá trình tổng hợp.

- Phương pháp phân tích dòng vật chất

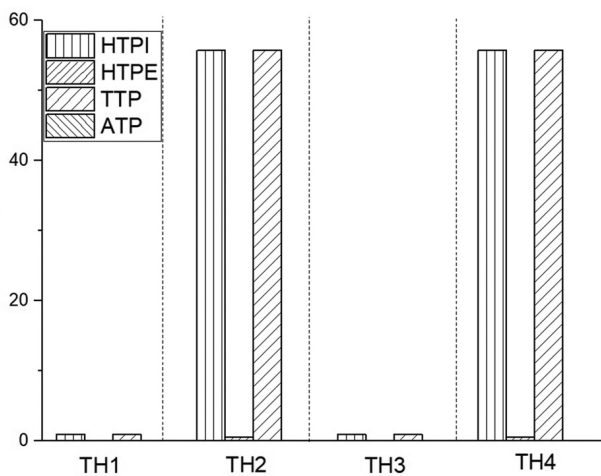
Nghiên cứu sử dụng phương pháp phân tích dòng vật chất (SFA) để tối ưu các dòng vật chất trong quá trình tổng hợp vật liệu C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mang GQDs ở quy mô pilot. Phương pháp này dựa trên quy tắc cân bằng khối lượng của các dòng vật chất ra và vào hệ thống bao gồm các quá trình được giới hạn trong đường biên (Hình 2). Để tối ưu các dòng vật chất này, nghiên cứu



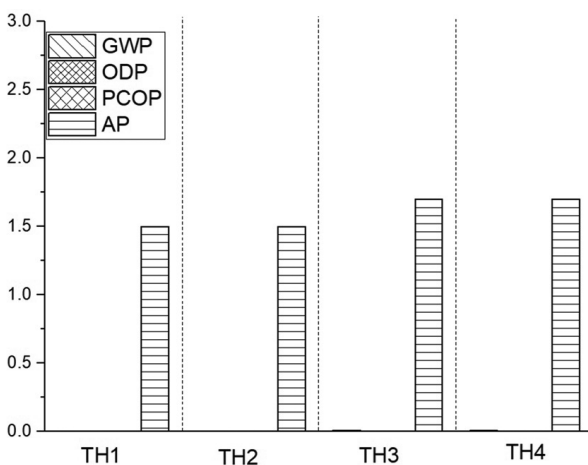
Hình 2. Sơ đồ dòng vật chất trong quá trình tổng hợp vật liệu C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mang GQDs



Hình 3. Tác động môi trường tiềm ẩn của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs đến môi trường



Hình 4. Các chỉ số thể hiện tác động tiềm ẩn của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs đến môi trường



Hình 5. Các chỉ số thể hiện tác động tiềm ẩn của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs đến bầu khí quyển

sử dụng phần mềm STAN 2.7 cho các phép tính tối ưu hóa các giá trị lưu lượng của các dòng luân chuyển trong hệ thống khảo sát.

### 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

#### 3.1. Phân tích tác động môi trường tiềm ẩn tổng cộng của quá trình tổng hợp vật liệu $C_3N_4$ mang GQDs

Các giá trị PEI của dòng đầu ra mỗi giờ ở 4 TH được khảo sát trong Hình 3 cho thấy, giá trị PEI của dòng đầu ra mỗi giờ ở TH2 và TH4 lớn hơn giá trị PEI ở TH1 và TH3 chứng tỏ vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs làm tăng khả năng tác động đến môi trường của quá trình tổng hợp. Mặt khác, giá trị dòng sản sinh mỗi giờ ở các TH đều mang giá trị dương cho thấy dòng đầu vào của quá trình tổng hợp có tốc độ phát thải mỗi giờ lớn hơn tốc độ phát thải mỗi giờ của dòng đầu ra.

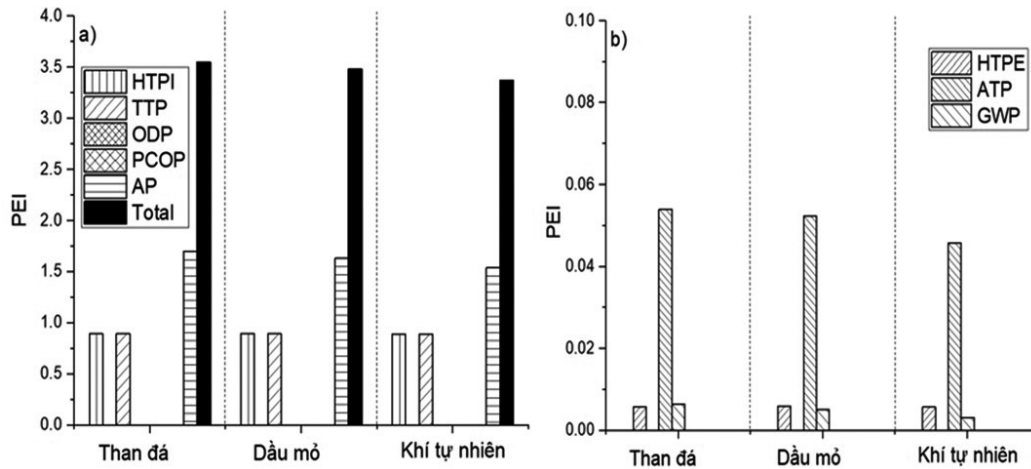
#### 3.2. Phân tích độc tính tiềm ẩn của quá trình tổng hợp vật liệu $C_3N_4$ mang GQDs

Hình 4 cho thấy, tác động tiềm ẩn của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs đến môi trường được thể hiện qua các chỉ số HTPI, HTPE, TTP và ATP ở các trường hợp được khảo sát. Quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs có khả năng ảnh hưởng đến môi trường đất và con người cao hơn môi trường nước. Trong đó, các tác động tiềm ẩn đến môi trường chủ yếu đến từ vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs (TH2 và TH4). Các chỉ số HTPI và TTP chiếm tỉ trọng như nhau trong tổng giá trị PEI mỗi giờ của dòng đầu ra ở mỗi trường hợp, lần lượt là 26,7 % (TH1), 49,3 % (TH2), 25,1 % (TH3) và 48,9 % (TH4).

#### 3.3. Phân tích tác động tiềm ẩn của quá trình tổng hợp $C_3N_4$ mang GQDs đến bầu khí quyển

Kết quả phân tích các chỉ số phản ánh tác động tiềm ẩn của quá trình tổng hợp  $C_3N_4$  mang GQDs đến bầu khí quyển trong Hình 5 cho thấy, các hóa chất được sử dụng trong quá trình tổng hợp và vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs tạo thành không có khả năng gây ra hiện tượng ấm lên toàn cầu, sự suy giảm tầng ô-dôn và hiện tượng oxy hóa quang hóa. Tuy nhiên, các hóa chất được sử dụng trong quá trình tổng hợp lại có khả năng gây ra hiện tượng axit hóa. Ngoài ra, nguồn năng lượng cung cấp cho quá trình tổng hợp có khả năng gây ra hiện tượng ấm lên toàn cầu và làm gia tăng khả năng gây ra hiện tượng axit hóa của quá trình tổng hợp. Khả năng gây ra hiện tượng ấm lên toàn cầu của nguồn năng lượng cung cấp cho quá trình tổng hợp được phản ánh qua giá trị PEI của dòng đầu ra mỗi giờ của quá trình tổng hợp ( $9.1 \times 10^{-4}$  PEI/kg sản phẩm tạo thành) cao hơn so với tiêu chuẩn GreenHouse Gas Protocol, 2015 (Institute, 2015).

#### 3.4. Phân tích tác động môi trường tiềm ẩn của các dạng nguồn năng lượng khác nhau cung cấp cho quá trình tổng hợp $C_3N_4$ mang GQDs



Hình 6. Các chỉ số thể hiện tác động môi trường tiềm ẩn của 3 dạng nguồn năng lượng

Hình 6 cho thấy, giá trị PEI của các chỉ số môi trường thể hiện tác động tiềm ẩn của quá trình tổng hợp  $C_3N_4$  mang GQDs đến môi trường khi nguồn năng lượng cung cấp cho quá trình tổng hợp thay đổi từ than đá sang dầu mỏ và khí tự nhiên. Chỉ số PEI của dòng đầu ra mỗi giờ của quá trình tổng hợp giảm dần khi nguồn năng lượng cung cấp chuyển từ than đá sang dầu mỏ và khí tự nhiên (khoảng 5,3%). Sự suy giảm giá trị PEI chủ yếu đến từ các chỉ số AP, GWP và ATP. Điều này cho thấy việc chuyển đổi từ sử dụng than đá sang khí tự nhiên góp phần làm giảm thiểu các tác động của quá trình tổng hợp vật liệu đến môi trường.

#### 4. KẾT LUẬN

Quá trình tính toán các chỉ số môi trường của quá trình tổng hợp vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs cho thấy vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs làm tăng khả năng tác động đến môi trường của quá trình tổng hợp có tốc độ phát thải của dòng đầu vào lớn hơn tốc độ phát thải của dòng đầu ra. Các hóa chất được sử dụng trong quá trình tổng hợp và vật liệu  $C_3N_4$  mang GQDs tạo thành không có khả năng gây ra hiện tượng ấm lên toàn cầu, sự suy giảm tầng ô-dôn và hiện tượng oxy hóa quang hóa, tuy nhiên, lại có khả năng gây ra hiện tượng axit hóa. Việc chuyển đổi từ sử dụng than đá sang khí tự nhiên góp phần làm giảm thiểu các tác động của quá trình tổng hợp vật liệu đến môi trường.

**Lời cảm ơn:** Nhóm tác giả xin chân thành gửi lời cảm ơn Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh và Viện Môi trường và Tài nguyên đã hỗ trợ và tạo điều kiện thuận lợi cho chúng tôi hoàn thành bài viết. Nghiên cứu này được thực hiện trong quá trình khảo sát thực hiện đề tài khoa học công nghệ cấp Đại học Quốc gia, mã số DN2022-24-01, tên đề tài “Nghiên cứu và triển khai ứng dụng quy trình cải tiến và hiệu quả xử lý chất thải ao nuôi tôm siêu thâm canh có tuần hoàn nước tại ĐBSCL” ■

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Han, H., Wang, B., Tang, Q., Jia, S., Liu, J., Li, H., Wang, C., Xu, H. and Hua, Y. 2024. Non-metallic nitrogen-doped graphene quantum dots coupled with  $g-C_3N_4$  achieve efficient photocatalytic performance. *Applied Surface Science* 649, 159171.
- Institute, W.R. 2015. Global Warming Potential Values. *Greenhouse Gas Protocol*.
- Jin, Z., Owour, P., Lei, S. and Ge, L. 2015. Graphene, graphene quantum dots and their applications in optoelectronics. *Current Opinion in Colloid & Interface Science* 20(5), 439-453.
- Phuong Thao, N.T., Le Minh Tri, N., Kien, T.T., Van Tung, T., Hieu, T.T., Thang, N.V., Son, L.T., Le Luu, T., Schnitzer, H. and Le Thanh, H. 2024. Valorization of the treatment of antibiotic and organic contents generated from an in-situ-RAS-like shrimp farming pond by using graphene-quantum-dots deposited graphitic carbon nitride photocatalysts. *Heliyon* 10(5).
- Razmi, H. and Mohammad-Rezaei, R. 2013. Graphene quantum dots as a new substrate for immobilization and direct electrochemistry of glucose oxidase: Application to sensitive glucose determination. *Biosensors and Bioelectronics* 41, 498-504.
- Shehab, M., Ebrahim, S. and Soliman, M. 2017. Graphene quantum dots prepared from glucose as optical sensor for glucose. *Journal of Luminescence* 184, 110-116.
- Zhao, J., Chen, G., Zhu, L. and Li, G. 2011. Graphene quantum dots-based platform for the fabrication of electrochemical biosensors. *Electrochemistry Communications* 13(1), 31-33.