

Explorando la interacción entre los puntos de carbono y el 4-nitrofenol a través de una combinación de estudios experimentales y análisis DFT

Tuesday, 10 December 2024 10:30 (0:30)

Content

Desarrollar un sensor óptico seguro, biocompatible y altamente sensible para detectar 4-nitrofenol (4-NP) en medios acuosos representa un desafío importante debido a los efectos nocivos del compuesto en los organismos vivos. Este estudio presenta puntos cuánticos de carbono (CD), sintetizados a partir de residuos de café por método hidrotermal, como sensores ópticos para 4-NP. La caracterización óptica incluyó mediciones de absorbancia y fotoluminiscencia. Las CD muestran una estabilidad notable para la detección de 4-nitrofenol en agua. Además, se realizaron cálculos de la teoría funcional de la densidad (DFT) para analizar el fenómeno de adsorción de 4-NP en CD. Estos cálculos, que implicaron evaluar energías de adsorción, distribución de carga por isosuperficies, interacciones no covalentes (NCI), la función de localización electrónica (ELF) y el indicador de región de superposición de densidad (DORI) utilizando el funcional Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), pertenecientes a la aproximación de gradiente generalizado (GGA), proporcionan una base teórica para los resultados experimentales observados. Este trabajo busca sentar las bases para el diseño racional de CD que permitan la detección eficiente de 4-nitrofenol en solución.

Tipo de presentación

Oral

Primary author(s) : Mr. CARDOSO, Alan (ICF-UNAM); Dr. REDDY, Naveen (ICF-UNAM); Dr. KESARLA, Mohan (ICF-UNAM); Dr. MUÑIZ, Jesús (IER-UNAM)

Presenter(s) : Mr. CARDOSO, Alan (ICF-UNAM)