

Avances en la comprensión del mecanismo de sensado de 4-nitrofenoles: influencia de la química superficial de los puntos de carbono

Content

Este trabajo se centra en la detección precisa y selectiva del 4-nitrofenol (4-NF), un contaminante tóxico y persistente presente en efluentes industriales. Aunque se han propuesto mecanismos como el efecto de filtro interno (IFE), la transferencia de energía por resonancia de Förster (FRET) y la transferencia de electrones para explicar la interacción del 4-NF con puntos cuánticos de carbono (CDs), aún existe debate sobre el papel de la química superficial de los CDs y la posible coexistencia de estos mecanismos.

Para clarificar este aspecto, se modificaron los grupos funcionales superficiales de los CDs con el fin de identificar cuáles son más efectivos para detectar 4-NP. Se utilizaron tanto técnicas experimentales como métodos computacionales basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), lo que permitió obtener una comprensión más profunda de las interacciones a nivel molecular.

Los resultados muestran que los CDs sintetizados de residuos de café presentan propiedades estables de absorbancia y fotoluminiscencia, y que tienen una alta selectividad hacia compuestos con grupos nitro en posición para. Los grupos funcionales oxigenados, como hidroxilo y carboxilo, favorecen la interacción con el 4-NF en la superficie de los CDs.

Este enfoque combina la valorización de residuos, el diseño racional de nanomateriales y la detección específica de contaminantes, proponiendo una estrategia escalable y sostenible para la detección óptica del 4-NF, con mayor precisión y comprensión de los mecanismos involucrados.

Tipo de presentación

Póster

Primary author(s) : CARDOSO, Alan (ICF-UNAM)

Co-author(s) : Dr. MUÑIZ, Jesús (IER-UNAM); Dr. KESARLA, Mohan Kumar (ICF-UNAM); Dr. BOGIREDDY, Naveen Kumar Reddy (ICF-UNAM)

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