cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

Dopagem em pontos quânticos de carbono visando emissão espectral no vermelho e aumento da geração de oxigênio singlete

Rafael Silvestrini[1]*; Leandra F. Campo[2]; Rosane M.D. Soares[1],Alexandre M. Fuentefria[3] ,Otávio Bianchi[4], Fernanda T.G. Dias[1]

1. Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais (PPGCIMAT/UFRGS)
2. Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ/UFRGS)
3. Programa de Pós-Graduação em Microbiologia Agrícola e do Ambiente (PPGMAA/UFRGS)
4. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalurgia e Materiais (PPGE3M/UFRGS)

* rafaelsilvestrini@gmail.com

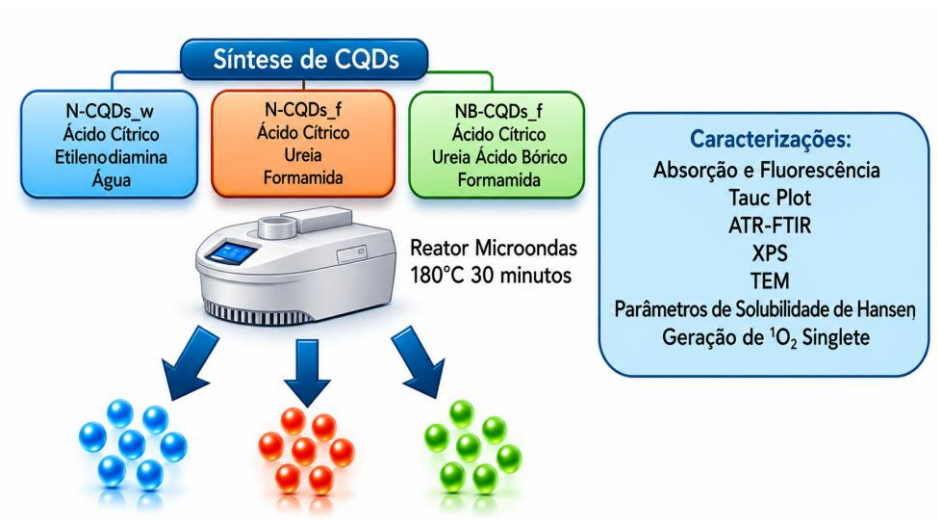
Introdução

A resistência antimicrobiana impulsiona estratégias como a terapia fotodinâmica antimicrobiana (aPDT), baseada na geração de $^1O_2$ por um mecanismo multialvo pouco suscetível à resistência. Pontos quânticos de carbono (CQDs) são fotossensibilizadores promissores, mas emitem no azul com alta fluorescência, que compete com a geração de $^1O_2$. A dopagem com N e B desloca a emissão para o vermelho e favorece o estado tripleto.

Objetivos

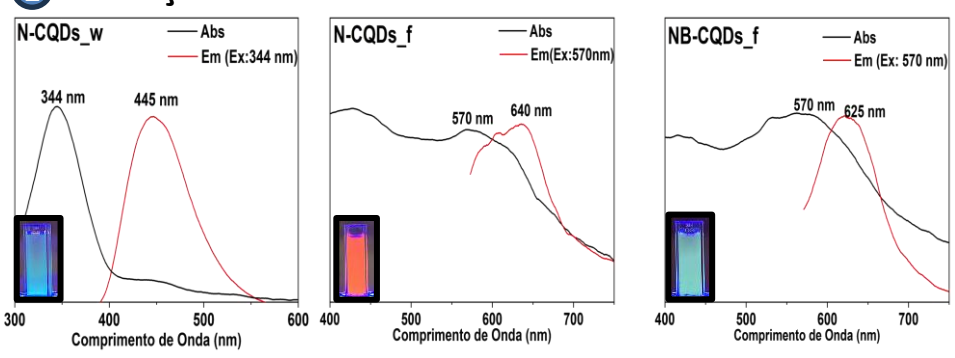
Investigar a modulação das propriedades estruturais, fotoluminescentes, fotodinâmicas e dedispersibilidade de CQDs por meio da variação do agente dopante (nitrogênio e codopagemnitrogênio/boro) e do meio reacional (água ou formamida), correlacionando composiçãoquímica, estrutura eletrônica e geração de $^1O_2$.

Metodologia

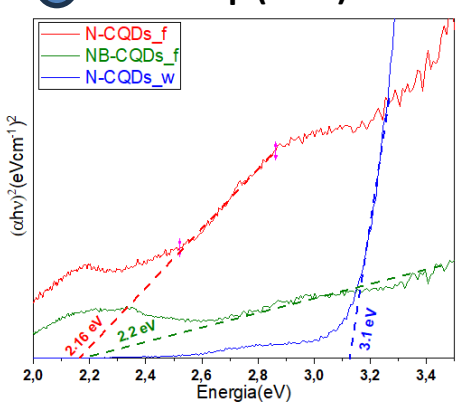


Resultados e Discussão

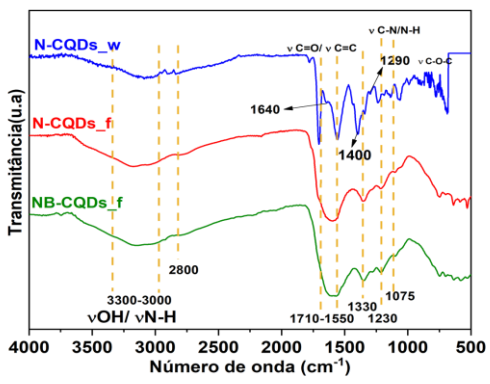
1 Absorção e Fluorescência



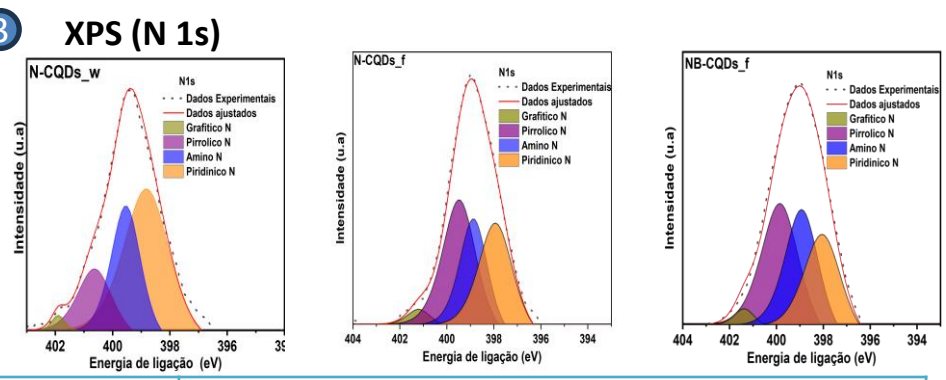
2 Band-Gap (Tauc)



3 ATR-FTIR

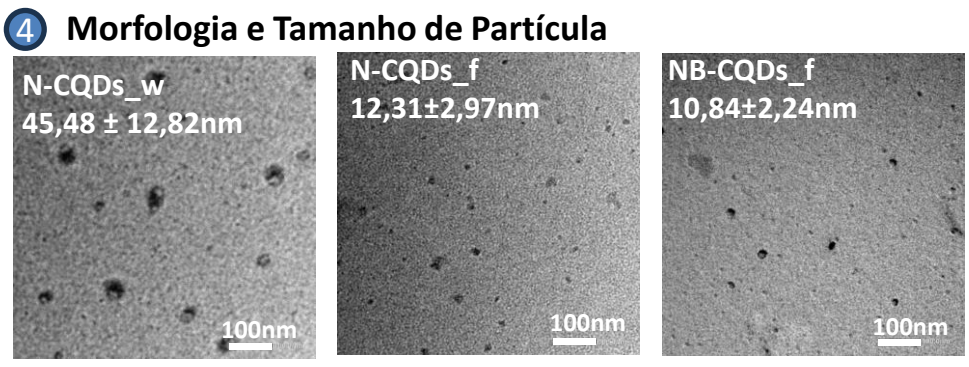


3 XPS (N 1s)

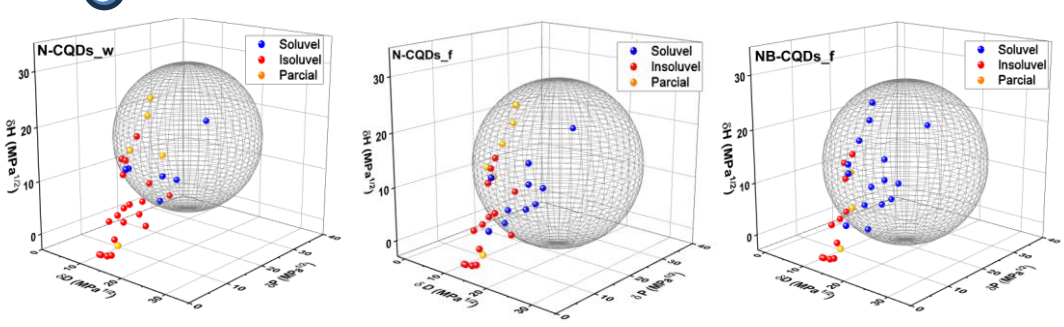


Amostra	N 1s (%)			
	Piridinico	Amino	Pirrolico	Grafítico
N-CQDs_w	52,8	29,4	16,3	1,5
N-CQDs_f	26,2	28,8	42,8	2,2
NB-CQDs_f	33,5	27,0	36,5	2,9

4 Morfologia e Tamanho de Partícula

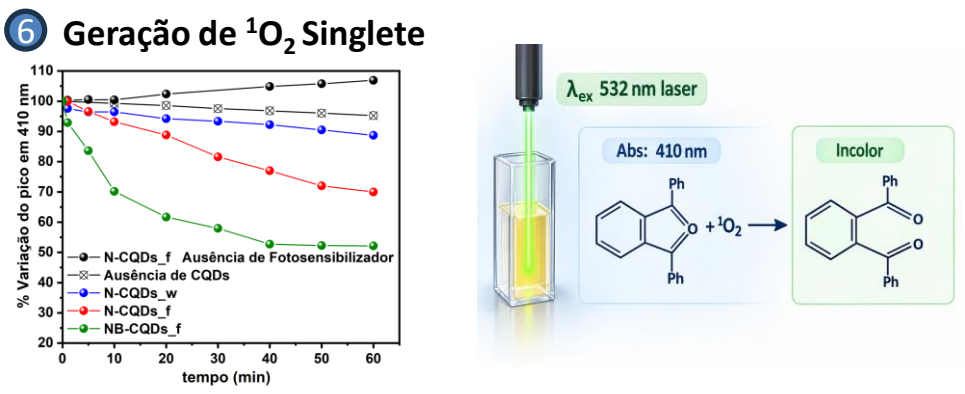


5 Parâmetros de Solubilidade de Hansen



Amostra	δD (MPa½)	δP (MPa½)	δH (MPa½)	R_o (MPa½)
N-CQDs_w	20.26	17.19	18.33	13.26
N-CQDs_f	19.04	19.70	14.19	15.13
NB-CQDs_f	19.44	17.11	14.37	14.95

6 Geração de $^1O_2$ Singlete



Conclusões

- Síntese em ureia/formamida: partículas ~75% menores, N superficial triplicado e emissão deslocada de 450 para 620–635 nm (band gap 3,12 → 2,16–2,20 eV) por estados de superfície de N pirrólico e carbonilas.
- O boro redistribuiu as espécies de N e depletou carbonilas, sem alterar tamanho nem carga superficial.
- $^1O_2$: NB-CQDs_f > N-CQDs_f ≫ N-CQDs_w, com cinética inicial ~4× maior na amostra codopada apesar do baixo QY — a energia do estado excitado vai para o tripleto, não para a fluorescência.
- Hansen: a dopagem ampliou o raio de interação (13,3 → 15,1 MPa½) e a codopagem N/B deslocou a esfera para solventes próticos, sem alterar R_0 nem o zeta (superfície doador–aceptor).

Referências e Agradecimentos

Yuan, F.; Wang, Z.; Li, X.; Li, Y.; Tan, Z.; Fan, L.; Yang, S. Bright Multicolor Bandgap Fluorescent Carbon Quantum Dots for Electroluminescent Light-Emitting Diodes. Advanced Materials 2017, 29 (3), 1604436

Gu, X.; Zhu, L.; Shen, D.; Li, C. Facile Synthesis of Multi-Emission Nitrogen/Boron Co-Doped Carbon Dots from Lignin for Anti-Counterfeiting Printing. Polymers 2022, 14 (14), 2779

Pereira, C. N.; Paim, L.; Da Cruz, J. A.; Dall Agnol, L.; Mauler, R. S.; Bianchi, O. Determination of Carbon Nanoparticle Dispersion Solubility Parameters Using the Classic Hansen and the DiPEVa Method. Journal of Molecular Liquids 2024, 393, 123540.

CAPES
CNPq
CNPq, Grant No. 444401/2023-7
FAPERGS
FAPERGS, Grant No. 25/2551-0000858-1