

UNIVERSITETI I PRISHTINËS "HASAN PRISHTINA"
FAKULTETI I SHKENCAVE MATEMATIKO – NATYRORE
DEPARTAMENTI I KIMISË – KIMI FIZIKE DHE INORGANIKE



PUNIM DIPLOME MASTER

Efekti i shtresave karboksifenileve të grefuara mbi pikat kuantike të karbonit ndaj vetive absorbtive të Metil Blu. Një studim teorik dheeksperimental

Mentori:

Prof. dr. Avni Berisha

Studentja:

Miranda Molliqaj

Prishtinë, Shtator 2023

Abstrakt

Në këtë punim është trajtuar efekti i shtresave karboksifenile të grefuara mbi pikat kuantike të karbonit ndaj vetive absorbtive të metilit blu. Synimi kryesor i këtij punimi është të hetojë përdorimin e mundshëm të shtresave të karboksifenilit në pikat e karbonit për adsorbimin e ngjyrës së metilit blu. Ky hulumtim motivohet nga nevoja për materiale të reja që mund të heqin në mënyrë efektive ngjyrat nga ujërat e zeza dhe matricat e tjera mjedisore.

Pyetjet specifike kërkimore që ky punim ka tentuar t'u përgjigjet janë:

1. Si ndikon prania e shtresave karboksifenil në pikat e karbonit në adsorbimin e Metil Blu?
2. Cili është përqendrimi optimal i shtresave karboksifenil për adsorbimin maksimal të Metil Blu?
3. Cili është mekanizmi me të cilin shtresat e karboksifenilit në pikat e karbonit ndërveprojnë me Metil Blu?

Duke iu përgjigjur këtyre pyetjeve, studimi synon të kontribuojë në zhvillimin e materialeve të reja dhe efektive adsorbuese për heqjen e ngjyrave nga uji i ndotur. Për më tepër, studimi kontribuon në kuptimin e ndërveprimeve themelore midis shtresave karboksifenil dhe pikave të karbonit, të cilat mund të kenë aplikime më të gjera në shkencën e materialeve dhe kiminë e sipërfaqes.

Nanopikat e karbonit janë grimca të vogla me bazë karboni që kanë veti unike optike dhe elektronike. Ato janë një klasë premtuese e materialeve për një gamë të gjerë aplikimesh, duke përfshirë bioimazherinë, konvertimin e energjisë, barjen e barërave. Nanopikat e karbonit janë zakonisht më të vogla se 10 nanometra në diameter. Ato mund të sintetizohen nga një shumëllojshmëri burimesh karboni, duke përfshirë polimeret, karbohidratet dhe proteinat që përmbajnë karbon. Kjo i bën ato një material të gjithanshëm që mund të përshtatet për të përmbushur nevojat specifike të aplikacioneve të ndryshme. Një nga avantazhet më të rëndësishme të nanopikave të karbonit janë vetitë e tyre optike .

Ata shfaqin fluoreshencë të fortë dhe kanë një rendiment të lartë kuantik, që do të thotë se lëshojnë shumë dritë për sasinë e energjisë që futet në to. Kjo i bën ato të dobishme për aplikimet e bioimazhit, ku mund të përdoren për të gjurmuar qelizat ose për të zbuluar sëmundje. Nanopikat e karbonit kanë gjithashtu një sipërfaqe të lartë, gjë që i bën ato të dobishme për aplikime ndijore. Ato mund të funksionalizohen me grupe të ndryshme kimike,

duke i lejuar ata të lidhen në mënyrë selektive me molekula specifike. Kjo i bën ato të dobishme për zbulimin e gjërave si toksinat, metalet e rënda ose biomolekulat. Përveç vetive të tyre optike dhe ndijore, nanopikat e karbonit studiohen gjithashtu për përdorimin e tyre të mundshëm në aplikimet e konvertimit të energjisë. Monte Carlo dhe DFT (Teoria Funksionale e Dendësisë) është një metodë llogaritëse e përdorur për të simuluar vetitë elektronike të materialeve, duke përfshirë nanopikat e karbonit. Nanopikat e karbonit kanë veti unike elektronike për shkak të madhësisë së tyre të vogël dhe strukturës së sipërfaqes. Simulimet e Monte Carlo DFT janë përdorur për të hulumtuar efektin e parametrave të ndryshëm, të tilla si madhësia e grimcave, forma dhe kimia e sipërfaqes, në strukturën elektronike dhe vetitë e adsorptive të këtyre nanopikave ndaj metiloranzhit. Gjatë këtij punimi janë përfituar nanopikat e karbonit nga llumi i kafes, me ç'rast ky i fundit i është nënshtruar disa proceseve, si tharja, ekstraktimi, filtrimi në vakuum dhe centrifugimi. Procesi pastaj është zhvilluar paralelisht në dy rrugë të ndryshme:

Faza e parë - tretësira e metilit blu 20 ppm vendoset nga tretësira 100mL 20 ppm në 4 gota laboratorike, me ç'rast vendosen këto masa: 50mg, 100mg, 200mg dhe 300mg të përbërjes me pika kuantike të karbonit dhe pas 24h kur është matur absorbancia e tyre, shihet se me rritjen e masës së përbërjes që përmban pika karbonit janë rritur edhe vlerat e absorbancës.

Faza e dytë - Janë marrë 2g nga përbërja me pika kuantike të karbonit dhe janë përzier me 1g Diazonium tetrafluoroborati i acidit benzoik në prani të 25mL të acidit klorhidrik HCl. Tretësira vendoset në banjo ultrasonik dhe përsëritet procedura e shtimit të përbërjes me nanopika karbonit dhe pastaj vlerat e matura të absorbances tregojnë sikurse të faza e parë, se rritja e masës së përbërjes me nanopika karboni janë rritur edhe vlerat e absorbancës. Qëllimi i shtimit të diazionium tetrafluoroboratit të acidit benzoik dhe acidit klorhidrik ishte që meqë pikat e karbonit janë grimca në formë sferike dhe pjesa sipërfaqësore e tyre ka strukturë grafeni të terminuar me grupe -COOH, kemi tentuar që ta rrisim numrin e grupeve -COOH, duke e bërë molekulën akoma më hidrofile.

Është vërejtur që tretësira që është trajtuar me ultrasonic cleaner ka absorbuar më shumë, pasi që substanca është bërë më hidrofile dhe është rritur numri i grupeve funksionale -COOH. Me rritjen e masës së përbërjes që përmban pika kuantike të karbonit janë rritur edhe vlerat e absorbancës.

Fjalët kyçe: nanopikat kuantike të karbonit, metil blu, shtresat karboksifenile, molekula hidrofile, fluoroshenca, Monte Carlo, DFT.

UNIVERSITETI I PRISHTINËS "HASAN PRISHTINA"
FAKULTETI I SHKENCAVE MATEMATIKO – NATYRORE
DEPARTAMENTI I KIMISË – KIMI FIZIKE DHE INORGANIKE



MASTER THESIS

The impact of carboxyphenyl layers grafted onto carbon quantum dots on the absorption properties of Methyl Blue: A theoretical and experimental study

Mentor:

Prof. dr. Avni Berisha

Student:

Miranda Molliqaj

Prishtinë, September 2023

Abstract

In this master thesis, we have addressed the effect of carboxyphenyl layers grafted onto carbon quantum dots on the absorbent properties of methyl blue. The main objective of this study was the investigation and the potential use of carboxyphenyl layers grafted on carbon dots for the adsorptive removal of methyl blue dye. This research is motivated by the need for new materials (adsorbents) that can effectively remove colors from waste waters and other environmental matrices.

The specific research questions that this paper has attempted to answer are:

- How does the presence of carboxyphenyl layers on carbon dots affect the adsorption of Methyl Blue?
- What is the optimal concentration of carboxyphenyl layers for maximum adsorption of Methyl Blue?
- What is the mechanism by which carboxyphenyl layers on carbon dots interact with Methyl Blue?

By addressing these questions, the study aims to contribute to the development of new and effective adsorbent materials for color removal from polluted water. Furthermore, the study contributes to the understanding of fundamental interactions between carboxyphenyl layers and carbon dot sites, which may have broader applications in materials science and surface chemistry.

Carbon dots are small carbon-based particles with unique optical and electronic properties. They are a promising class of materials for a wide range of applications, including bioimaging, energy conversion, and sensing. Carbon dots are typically smaller than 10 nanometers in diameter and can be synthesized from various carbon sources, including polymers, carbohydrates, and carbon-containing proteins. This makes them a versatile material that can be tailored to meet the specific needs of different applications. One of the most important advantages of carbon dots is their optical properties. They exhibit strong fluorescence and have a high quantum yield, meaning they emit a lot of light for the amount of energy they absorb. This makes them useful for bioimaging applications, where they can be used to track cells or detect diseases. Carbon dots also have a high surface area, making them suitable for sensing applications. They can be functionalized with various chemical groups, allowing them to selectively bind to specific molecules such as toxins, heavy metals, or biomolecules. In addition

to their optical and sensing properties, carbon dots are also being studied for their potential use in energy conversion applications. Monte Carlo and Density Functional Theory (DFT) are computational methods used to simulate the electronic properties of materials, including carbon dots. Carbon dots have unique electronic properties due to their small size and surface structure. Monte Carlo DFT simulations have been used to investigate the effect of various parameters, such as particle size, shape, and surface chemistry, on the electronic structure and adsorptive properties of these carbon dots.

During this study, carbon dots were obtained from coffee grounds, which were subjected to several processes including drying, extraction, vacuum filtration, and centrifugation. The process was then carried out in two different ways:

Phase one - the 20 ppm blue methylene blue solution is prepared by diluting 100 mL of 20 ppm solution into 4 laboratory bottles, in which the following amounts are placed: 50mg, 100mg, 200mg, and 300mg of the composition with carbon quantum dots. After measuring their absorbance after 24 hours, it is observed that with an increase in the mass of the composition containing carbon quantum dots, the absorbance values have also increased.

Phase two - 2g of carbon quantum dots were taken and mixed with 1g of benzoic acid diazonium tetrafluoroborate in the presence of 25mL of hydrochloric acid (HCl). The solution is placed in an ultrasonic bath, and the procedure of adding the composition with carbon quantum dots is repeated. Then, the measured absorbance values show, as in the first phase, that the increase in the mass of the composition with carbon quantum dots has increased the absorbance values. The purpose of adding benzoic acid diazonium tetrafluoroborate and hydrochloric acid was to increase the number of -COOH groups since the carbon dots are spherical in shape, and their surface portion has a graphene structure terminated with -COOH groups, making the molecule even more hydrophilic. The purpose of adding diazonium tetrafluoroborate of benzoic acid and hydrochloric acid was to make the carbon dot particles more hydrophilic by increasing the number of -COOH functional groups on their surface. It was observed that the solution treated with an ultrasonic cleaner absorbed more, indicating that the substance became more hydrophilic, and the number of -COOH functional groups increased. With the increase in the mass of the carbon dot composition, the absorbance values also increased.

Key words: carbon quantum dots, methylene blue, carboxyphenyl layers, hydrophilic molecules, fluorophores, Monte Carlo, DFT.