

**Titlu Faza:** Studiul efectelor campurilor magnetice variabile si statice asupra reactiilor photocatalitice pe suprafata nanoparticulelor de TiO<sub>2</sub>

**Obiective:**

1. Determinarea si analiza efectelor induse de campuri magnetice variabile si statice asupra eficientei reactiei de reducere photocatalitica a sarii de tetrazolium MTT (3-(4,5-Dimethylthiazol-2-yl)-2,5-diphenyltetrazolium-bromide) pe suprafata nanoparticulelor de TiO<sub>2</sub>;
2. Analiza fotogenerarii de specii reactive de oxigen (anion superoxid) pe suprafata nanoparticulelor de TiO<sub>2</sub> dispersate in mediu apos, expuse concomitent la radiatie UV si camp magnetic alternativ;

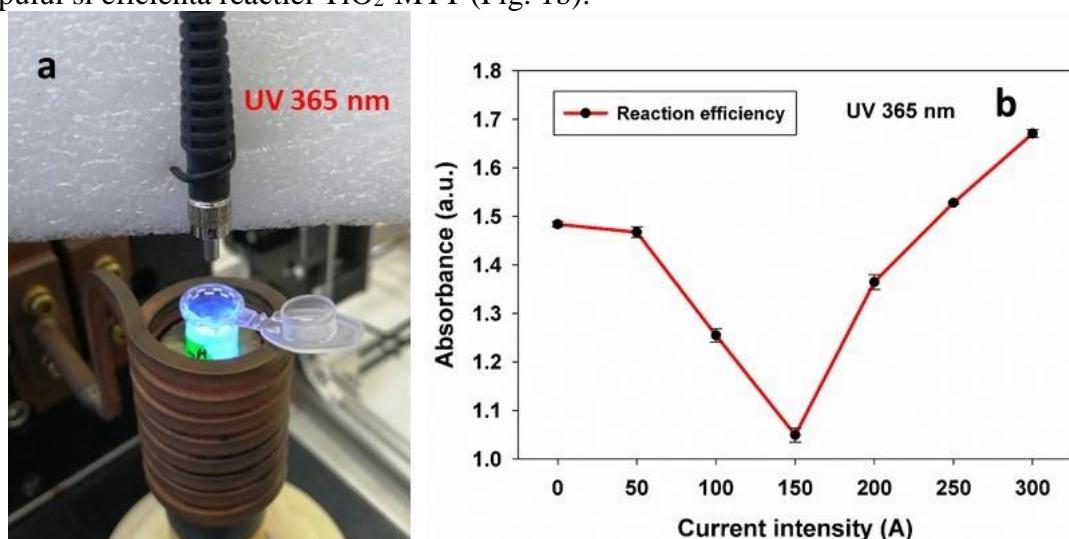
**Rezultate estimate initial:**

1. Obtinerea de nanoparticule de TiO<sub>2</sub> cu activitate photocatalitica diferita prin hidroliza controlata a alcoxizilor de titan si varierea conditiilor de tratament post-hidroliza;
2. Evaluarea eficientei reactiei photocatalitice TiO<sub>2</sub>-MTT in prezenta campurilor magnetice alternative/statice;
3. Determinarea efectului speciilor reactive de oxigen fotogenerate in mediul de reactie asupra reactiei photocatalitice TiO<sub>2</sub>-MTT in absenta/prezenta campurilor magnetice externe.

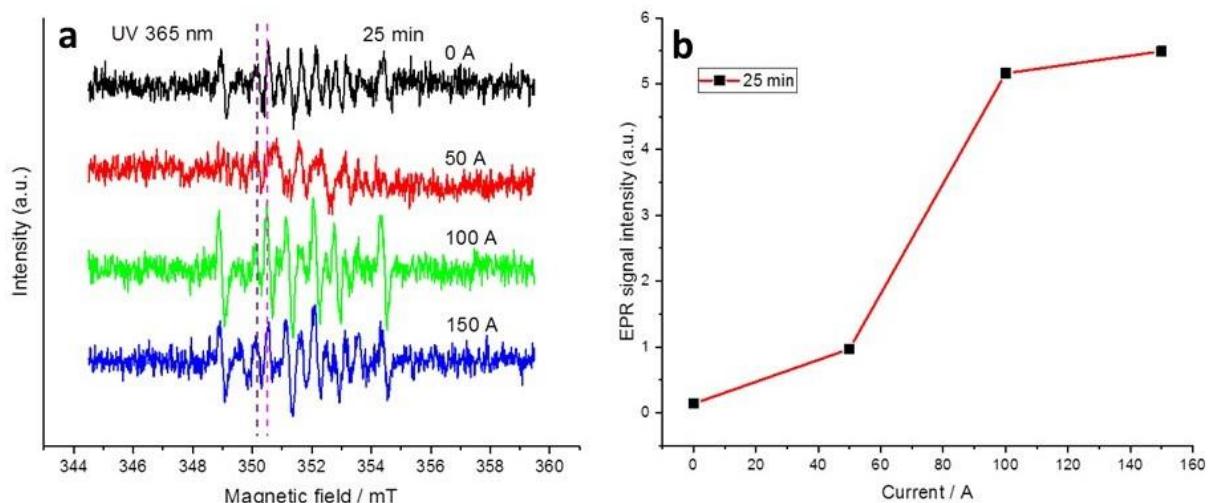
**Rezultate obtinute:**

Au fost sintetizate nanoparticule de dioxid de titan (TiO<sub>2</sub>) prin metoda precipitarii in solutie neutra/acida/bazica pornind de la butoxid de titan (C<sub>16</sub>H<sub>36</sub>O<sub>4</sub>Ti). Precipitarea a fost urmata de tratament termic.

Au fost studiate eficienta reactiei photocatalitice TiO<sub>2</sub>-MTT si fotogenerarea de radicali superoxid ( $\bullet\text{O}_2^-$ ) in conditii de expunere la radiatie UV (365 nm) si camp magnetic alternativ (CMA) (Fig. 1a), prin determinari spectrofotometrice ale concentratiei produsului de reactie si, respectiv, rezonanta electronica de spin (RES). Rezultatele indica o scadere a eficientei reactiei photocatalitice in prezenta campurilor generate de curenti cu intensitatea sub 150 A. Pentru intensitati mai mari ale curentului s-a observat o proportionalitate directa intre intensitatea campului si eficienta reactiei TiO<sub>2</sub>-MTT (Fig. 1b).



**Fig. 1** a) expunerea concomitenta a mediului de reactie la radiatie UV si CMA; b) dependenta eficientei reactiei photocatalitice de intensitatea CMA



**Fig. 2** a) semnalul RES pentru diferite intensitati ale curentului electric (timp de expunere 25 de minute); b) cinetica fotogenerarii de anion superoxid in functie de intensitatea CMA aplicat

Radicalii superoxid fotogenerati au fost stabilizati folosind 5,5-Dimethyl-1-pyrroline N-oxide (DMPO) si analizati prin RES (Fig. 2a). A fost evidenziata o proportionalitate inversa intre intensitatea semnalului RES (concentratia de anion superoxid din probe) si eficienta reactiei photocatalitice pentru intensitati ale curentului in intervalul 0-150 A (Fig. 2b). Cazul 150-300 A necesita adaptarea setup-ului experimental si va fi investigat ulterior. O posibila explicatie pentru acest rezultat ar putea fi implicarea electronilor fotogenerati in doua reactii concurente: reducerea photocatalitica a MTT [1] si, respectiv, formarea radicalilor superoxid prin reactia cu moleculele de oxigen din probe (favorizata la intensitati ale curentului in intervalul 0-150 A). Aceasta ipoteza va fi investigata in studii viitoare.

### Concluzii si perspective:

Rezultatele obtinute dovedesc existenta influentei campurilor magnetice alternative asupra fotogenerarii speciilor reactive de oxigen (anion superoxid) pe suprafata nanoparticulelor de TiO<sub>2</sub>. De asemenea, a fost evidenziata proportionalitatea inversa dintre eficienta fotogenerarii de anion superoxid si eficienta reactiei photocatalitice de reducere a sarii de tetrazolium MTT sub iradiere UV la 365 nm si camp magnetic alternativ generat de curenti pana la 150 A in setup-ul experimental utilizat. A fost lansata o ipoteza privind mecanismul responsabil pentru aceasta proportionalitate inversa pe baza rezultatelor obtinute in studii anterioare efectuate la INCDFM privind mecanismul reactiei TiO<sub>2</sub>-MTT.

Studiul va fi continuat prin:

- determinari sistematice ale cineticilor de fotogenerare pentru mai multe tipuri de ROS
- determinarea efectelor lungimii de unda a radiatiei UV si frecventei campului magnetic alternativ asupra proceselor studiate
- corelarea rezultatelor privind eficienta fotogenerarii de ROS sau desfasurarii reactiilor photocatalitice cu determinari UV-Vis privind largimea benzii interzise a semiconductorilor implicați in studiu si cu alte tipuri de caracterizari morfo-structurale si fotoelectrochimice
- scrierea unui articol stiintific si trimiterea lui spre publicare intr-o revista ISI cu factor de impact ridicat pe parcursul anului urmator

[1] Traian Popescu, Andreea R. Lupu, Valentin Raditoiu, Violeta Purcar, Valentin S. Teodorescu, On the photocatalytic reduction of MTT tetrazolium salt on the surface of TiO<sub>2</sub> nanoparticles: Formazan production kinetics and mechanism, Journal of Colloid and Interface Science 457 (2015) 108–120