

Raport de activitate

Contract Nr. PD 51 din 07/08/2020

ADSORBȚIA CYANOTOXINEI CYLINDROSPERMOPSIN LA SUPRAFAȚA NANOPARTICULELOR PLASMONICE, DETECȚIA ULTRASENSIBILĂ ȘI EVALUAREA PREZENȚEI ACESTEIA IN SITU, ÎN APE DIN TRANSILVANIA ȘI ÎN PRODUSE AQUATIC

Acronym: CYANOTOXRO



Etapa. Nr. 1

Caracterizarea vibrationala experimentală și teoretică a toxinei CYN

Explicarea mecanismului de adsorbție în condiții de înflorire a algelor în mediu

Perioada: 01.09.2020 – 07.12.2020

Rezumatul etapei

Prima etapă a proiectului constă în: obținerea și interpretarea spectrelor vibraționale Raman/SERS ale toxinei CYN, înțelegerea mecanismului de adsorbție și identificarea grupărilor funcționale implicate în adsorbție, stabilirea limitelor de detecție SERS și profilul excitării.

S-a realizat detectarea și cuantificarea toxinei CYN folosind SPR-SERS din nanoparticule metalice obținute în laborator și explicarea mecanismului de adsorbție.

Pentru fiecare activitate, în continuare sunt prezentate rezultatele obținute:

1.1. Obținerea și interpretarea spectrelor Raman și SERS ale toxinei CYN: înregistrarea spectrelor experimentale Raman și SERS a CYN-lui

S-a achiziționat un stoc de toxină și s-au înregistrat spectrele Raman și SERS ale toxinei cu spectrometrul Raman multilaser, confocal, de tip Renishaw InVia Reflex cuplat cu un microscop SPM NT-MDT Ntegra Spectra, folosind linia laser 532 nm. Spectrul Raman al soluției diluate, comercial disponibilă, conține doar benzi caracteristice solventului, concentrația fiind prea mică (24 μM.) pentru detectia Raman convențională. De aceea, este nevoie de utilizarea unei tehnici de amplificare a semnalului Raman cu ajutorul nanoparticulelor de metal nobile cu rezonanța plasmonică în domeniul vizibil (tehnica SERS).

Probele SERS au fost preparate prin adăugarea a 20 μ l de soluții de toxină de 24 μ M la 200 μ l de coloid de argint (AgNPs), rezultând o concentrație finală SERS de 2,1818 μ M. Pentru înregistrarea spectrelor SERS s-a folosit spectRIM picurând din soluția SERS obținută 10 μ l pe placă. După evaporarea solventului s-au înregistrat spectrele SERS.

1.2. Calculul teoretic Raman al moleculei CYN în soluție: obținerea spectrelor teoretice Raman ale toxinei CYN

S-a realizat spectrul teoretic Raman al CYN lichid, cu structurile moleculare optimizate B3LYP / 6-31G + (d, p) ale celor mai stabili doi conformeri ai CYN

1.3. Pregătirea în laborator de nanoparticule de metale nobile cu rezonanță plasmonică în intervalul vizibil și NIR: pregătirea de diferite stocuri de coloizi de argint

S-a pregătit mai multe stocuri de citrat redus de coloid de argint, cu excitație maximă 416 nm.

1.4. Identificarea speciilor de absorbție pe suprafața nanoparticulelor de argint (NPs) și a grupurilor funcționale implicate în interacțiunea CYN-NPs: obținerea setului de date experimentale SERS al speciilor adsorbite CYN

S-au înregistrat spectrele SERS pentru diferite concentrații.

1.5. Obținerea profilului de excitație SERS a speciilor adsorbite: Interpretarea spectrelor Raman și SERS ale toxinei CYN, atribuirea cu moduri vibraționale caracteristice

S-au făcut atribuiri modurilor vibraționale cele mai intense, caracteristice toxinei CYN. Calculele DFT au furnizat o interpretare fiabilă a spectrului Raman.

1.6. Management: coordonarea tuturor activităților și elaborarea documentațiilor

- Fiecare activitate a fost elaborată cu succes
- S-au făcut achizițiile conform devizului
- S-au pregătit toate actele pentru contractare
- S-au pregătit toate actele pentru prima raportare

1.7. Diseminare: 1 articol ISI trimis la publicare, pregătirea paginii web a proiectului

- Realizarea paginii web a proiectului: <https://www.itim-cj.ro/PNCDI/cyanotoxro/>
- Pregătirea/Trimiterea spre publicare a unui articol științific cu titlul: "Detection and discrimination of toxic fish tissue with Cyindrospermopsin cyanotoxin, using Raman and SERS spectroscopy", Cs. Müller Molnár, S. Cintă Pînzaru, V. Chiș, I. Feher, B. Glamuzina, la Spectrochimica Acta Part A.

Toate activitățile acestei etape au fost realizate cu succes!

Director Proiect,
Dr. Molnár Csilla

