

# RST - RAPORT ȘTIINȚIFIC ȘI TEHNIC

Contract Nr. 359PED din 23/10/2020

**DETECTAREA RAPIDĂ A PESTICIDULUI TBZ ÎN FRUCTELE ȘI  
LEGUMELE CONGELATE,  
COMERCIALIZATE PE PIAȚA DIN ROMÂNIA**

ACRONYM: **RapidDetTBZ**



**RapidDetTBZ**

## **Etapa nr. 1**

*Pregătirea și rezumarea datelor teoretice preliminare, dar extinse și rezultate experimentale ale spectroscopiei Raman pe TBZ efectuată preliminar*

## Rezumatul etapei

Prima etapă a proiectului constă în pregătirea și redarea datelor teoretice preliminare și rezultatelor experimentale obținute prin spectroscopie Raman pe tiabendazol (TBZ) și pregătirea paginii web a proiectului.

### Pentru fiecare activitate, în continuare sunt prezentate rezultatele obținute

#### 1.1. Obținerea unei baze de date preliminare pentru TBZ, care constă din datele efectuate preliminar: colectarea datelor caracteristice experimentale și teoretice vibraționale existente și studierea literaturii actuale referitor la articolele apărute pe TBZ

*S-a colectat toate datele caracteristice experimentale și vibraționale și s-a studiat literatura*

- Spectrele electronice (UV-VIS) ale tiabendazolului adsorbit pe nanoparticule coloidale: adsorbția maximă este între 444 nm - 474 nm regiuni de lungimi de undă.
- Spectrul Raman al tiabendazolului: s-a înregistrat spectrul Raman al TBZ solid, policristalin și spectrul teoretic atât în regiunea numerelor de undă mari cât și în regiunea numerelor de undă mici. Se observă o corelare foarte bună între modurile normale experimentale și calculate de vibrație, ceea ce ne oferă siguranța unei atribuirii corecte a frecvențelor de vibrație.
- Spectrul SERS al tiabendazolului: semnalul SERS al TBZ în soluție apoasă la concentrația  $1,96 \cdot 10^{-5}$  mol l<sup>-1</sup>, la pH 7, arată diferențe semnificative ale poziției și intensităților relative ale benzilor în comparație cu spectrul Raman, la concentrația  $10^{-2}$  mol l<sup>-1</sup>, sugerând un proces de chemisorbție. În spectrul SERS al soluției de TBZ se observă o lărgire a benzilor și o deplasare spre roșu (energii mai mici) a poziției acestora, în comparație cu spectrul Raman, sugerând o orientare înclinată spre paralel a scheletului molecular, față de suprafața de argint. Banda nouă de la  $1389 \text{ cm}^{-1}$  sugerează o mișcare complexă a scheletului molecular. Prezența benzii slabe la  $236 \text{ cm}^{-1}$  indică formarea legăturii Ag – N.
- Dependența de concentrație a spectrului SERS: s-a înregistrat o serie de spectre SERS ale TBZ dizolvat în apă pură, de la concentrații  $1,96 \cdot 10^{-5}$  mol l<sup>-1</sup> până la  $1,96 \cdot 10^{-11}$  mol l<sup>-1</sup>. Cu modificarea concentrației, s-a observat o modificare a intensităților unor benzi SERS specifice. Limita de detecție SERS a TBZ în soluție apoasă a fost determinată la  $10^{-11}$  mol l<sup>-1</sup>.

- Dependența de pH a spectrului SERS: ajustarea pH-ului soluției de TBZ a fost făcută înainte de a fi adăugată la nanoparticulele de argint. Concentrația SERS  $1,96 \cdot 10^{-5} \text{ mol l}^{-1}$  a fost aleasă pentru studierea modificării pH-lui în spectrul SERS.

1.2. Diseminare: pregătirea paginii web a proiectului

Link la pagina de web a proiectului: <https://www.itim-cj.ro/PNCDI/rapidettbz/>

**Toate activitățile acestei etape au fost realizate cu succes!**

**Director Proiect,**

*Dr. Molnár Csilla*

