

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA
ȘCOALA DOCTORALĂ ȘTIINȚE ALE NATURII

Consortiu: Universitatea Stat din Moldova, Institutul de Dezvoltare a Societății
Informaționale, Universitatea de Stat „Bogdan Petriceicu Hasdeu” din Cahul

Cu titlu de manuscris
C.Z.U.: 535.37:535.14:539.196(043.3)

MUNTEANU ION

**ACȚIUNEA COOPERATIV CUANTICA A IMPULSURILOR
SCURTE DE RADIAȚIE CU BIOMOLECULELE LA PROPAGAREA
LOR PRIN METAMATERIALE CU APLICAREA EI ÎN
DIAGNOSTICA, TRATAMENT SI INACTIVAREA PATOGENILOR**

Teză de doctor în științe fizice
131.01 - FIZICĂ MATEMATICĂ

Conducător științific:



ENACHE Nicolae,

doctor habilitat în științe fizico-
matematice, profesor universitar

Autor:



MUNTEANU Ion

Chișinău 2025

© MUNTEANU ION, 2025

CUPRINS

ADNOTARE	5
LISTA ABREVIERILOR	8
ÎNTRUDUCERE	9
1. DEZVOLTAREA TEHNOLOGIILOR DE DECONTAMINARE LA UTILIZAREA PULSURILOR SCURTE DE LUMINA ȘI A METAMATERIALELOR	16
1.1. Prezentare generala conform literaturii.....	16
1.2. Inactivarea microorganismelor ca funcție de doza absorbită.....	18
1.3. Inactivarea microorganismelor ca funcție de sursa aleasă.....	21
1.4. Rolul duratei pulsului în decontaminare și dimerizarea ADN.....	27
1.5. Utilizarea fibrelor capilare și a sferelor pentru captarea optică a biomoleculelor.....	32
1.6. Studiul eficienței ratei de inactivare a bacteriilor din soluția de drojdie.....	35
1.7. Concluzii la capitolul 1.....	36
2. METODICA EXPERIMENTULUI. ACȚIUNEA COERENTĂ A RADIAȚIILOR UV PULSATE CU BIOMOLECULELE.....	37
2.1. Aspecte ale interacțiunii radiațiilor cu materia.....	37
2.2. Reprezentarea clasică a radiației sub forma de puls.....	40
2.3. Mecanism de interacțiune a radiațiilor pulsate cu biomoleculele.....	43
2.4. Algoritmul de Soluționare a ecuației neliniare de vibrație a subsistemelor moleculare prin metoda iterației.....	52
2.5. Model neliniar de interacțiune a moleculelor cu radiații pulsate.....	57
2.6. Procedeu diagnostic de determinare a ratei de decontaminare a biomoleculelor din soluția de drojdie sub acțiunea radiației UVC pulsate ca funcție de timp.....	61
2.6.1. Analiza oscilografică a radiațiilor pulsate scurte.....	62
2.6.2. Metoda de analiza microscopică.....	67
2.6.3. Metoda spectroscopică de analiza.....	71
2.6.4. Analiza creșterii și reproducerii fungilor de drojdie în plăci Petri....	75
2.7. Concluzii la capitolul 2.....	78

3. INFLUENȚA INTENSITĂȚII RADIAȚIILOR UV ASUPRA RATEI DE DECONTAMINARE A AGENȚILOR PATOGENI.....	80
3.1. Aproximația Born Oppenheimer racordată la dimerizarea ADN sub acțiunea radiației.....	80
3.2. Dimerizarea ADN/ARN ca funcție a intensității radiațiilor UVC prin procesul Raman.....	84
3.3. Eliminarea subsistemului electronic acoperit de câmp UVC împrăștiat.....	93
3.4. Concluzii la capitolul 3.....	99
4. APLICAREA CANALELOR DE ROTAȚIE PENTRU DECONTAMINAREA AGENȚILOR PATOGENI ÎN METAMATERIALE PENETRATE DE RADIAȚII UVC.....	93
4.1. Aspecte ale interacțiunii agenților patogeni cu metamateriale penetrate UVC.....	100
4.2. Captarea și manipularea biomoleculelor sub acțiunea câmpului optic evanescent.....	101
4.3. Creșterea ratei de decontaminare a soluțiilor infectate cu ajutorul metamaterialelor compozite de forme geometrice diferite.....	103
4.3.1. Împachetări de elemente cu geometrii sferice.....	104
4.3.2. Împachetări de elemente cu geometrie cilindrică.....	108
4.4. Evaluarea volumului ocupat de bilele de cuarț și zonele lor evanescente într-un volum limitat. Simulare numerică a adâncimii zonei evanescente în funcție de unghiul de incidență.....	111
4.5. Determinarea adâncimii de penetrare în cioburi de cuarț.....	114
4.6. Manipularea biomoleculelor cu ajutorul canalelor de rotație prin metamaterialele pătrunse de radiații UVC.....	120
4.7. Descriere dispozitiv pentru decontaminarea lichidelor.....	123
4.8. Concluzii la capitolul 4.....	127
CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI.....	129
BIBLIOGRAFIE.....	131
DECLARAȚIA PRIVIND ASUMAREA RĂSPUNDERII.....	143
MULȚUMIRI.....	144
CURRICULUM VITAE.....	145

ADNOTARE

la teza „Acțiunea cooperativ cuantica a impulsurilor scurte de radiație cu biomoleculele la propagarea lor prin metamateriale cu aplicarea ei în diagnostica, tratament și inactivarea patogenilor”, prezentată de Munteanu Ion pentru conferirea gradului de doctor în științe fizice la specialitatea 131.01 „Fizică matematică”.

Structura tezei: Teza a fost perfectată la Institutul de Fizică Aplicată, Universitatea de Stat din Moldova, Chișinău, 2025, scrisă în limba română ce constă din introducere, patru capitole, concluzii generale și recomandări, 135 titluri bibliografice, 145 pagini dintre care 122 pagini de text de bază, 46 figuri. Rezultatele prezentate în teză au fost publicate în 15 lucrări științifice. În baza teoriilor dezvoltate am obținut două brevete de invenție, iar altul este în proces de obținere.

Cuvinte-cheie: radiații UV-C pulsate, metamateriale, decontaminare, dimerizare ADN, inactivare patogeni.

Domeniul de cercetare: biofizica, optică neliniară și optica cuantică.

Scopul lucrării: Scopul tezei este de a prezenta rezultatele cercetării referitor acțiunii cooperativ cuantice a impulsurilor scurte de radiație UV-C la propagarea lor prin metamateriale pentru inactivarea agenților patogeni.

Obiectivele cercetării: analiza interacțiunii dintre radiațiile UV-C cu materia; inactivarea agenților patogeni datorită radiației coerente UV-C pulsate aplicate; se propune descrierea neliniară a dependenței ratei de dimerizare ADN/ARN în funcție de radiația ultravioletă C sub forma de pulsuri scurte aplicată; aplicarea modelului Born-Oppenheimer la dimerizarea ADN-lui sub acțiunea radiației; manipularea biomoleculelor cu ajutorul canalelor de rotație prin metamaterialele pătrunse de radiații UVC; posibilitatea aplicării acestor concepții se propune echipamente de decontaminare cu dispersie a radiației în volum prin fibra/meta material sferic în dezinfectarea fluidelor (aer, apă, ser sangvin etc.); se studiază posibilitățile de aplicare și optimizare a intensității radiațiilor UVC aplicate în echipamentul de decontaminare propus pe volumul bazelor metamaterialelor.

Noutatea științifică și originalitatea rezultatelor obținute. Pentru prima dată s-a propus canalizarea radiației UV-C prin diferite sisteme optice speciale (metamateriale) utilizând diferite tipuri de combinații fibre-bile din cuarț. În investigațiile realizate experimental a fost determinat adâncimea de penetrare a radiației UV-C prin astfel de împachetări ale metamaterialelor la diferite intensități, cât și dependența dozei de radiație în raport cu rata de inactivare a soluției de drojdie. A fost dezvoltat și brevetat un dispozitiv pentru decontaminarea lichidelor și sterilizator UV-C.

Problema științifică importantă soluționată constă în evidențierea unui mecanism de inactivare eficientă în baza cercetărilor teoretice și experimentale luând în considerație corelația lor.

Semnificația teoretică a tezei în constă în dezvoltarea teoriei în modelul (aproximarea) Born-Oppenheimer și aplicarea lui la dimerizarea ADN-lui sub acțiunea radiației ultraviolete de tip C inclusiv dezvoltarea tehnologiilor de decontaminare a agenților patogeni la utilizarea pulsurilor scurte de radiație propagate prin metamateriale pentru creșterea ratei de decontaminare a soluțiilor infectate. Deoarece subsistemul electronic este mai rapid în comparație cu subsistemul de nuclee al biomoleculelor este cercetată soluționarea problemei cuantice de excitare a subsistemului electronic, considerând că subsistemul atomic de nuclee este lent și poate fi considerat fixat.

Valoarea aplicativă a tezei. Aceasta presupune posibilitatea aplicării rezultatelor cercetării descrise în teză pentru dezvoltarea și elaborarea unor dispozitive de decontaminare cu o rată înaltă de inactivare a agenților patogeni, prezenți în medii diferite precum: apă și suprafețe.

Implementarea rezultatelor științifice. Rezultatele obținute au fost utilizate în cadrul proiectului instituțional din cadrul Programului de Stat (2020-2023) Proiectul ANCD 20.80009.5007.01: Cooperativitate cuantică între emițători (nuclee, atomi, puncte cuantice, molecule, biomolecule, meta materiale) și aplicarea acestora în informatică, biofotonică avansată optogenetică, cât și din cadrul subprogramului 011206: Fenomene cooperativ-cuantice dintre atomi, biomolecule, cavități optice sub acțiunea radiației electromagnetice și aplicarea acestora în biofotonică pentru elaborarea echipamentelor moderne de decontaminare și diagnostica. Pe baza rezultatelor acestor studii, au fost propuse spre brevetare două dispozitive de decontaminare: unul se referă la dezinfecția lichidelor infectate, celălalt la sterilizarea instrumentarului chirurgical și de laborator. Ambele idei au obținut aviz pozitiv fiind introduse în registrul AGEPI cu numerele de depozit "s 2023 0031" respectiv "s 2024 0049"

SUMMARY

of the doctoral thesis "Cooperative quantum action of short radiation pulses with biomolecules during their propagation through metamaterials with its application in diagnostics, treatment and inactivation of pathogens", presented by Munteanu Ion for conferring the PhD degree in Physics at the specialty 131.01 "Mathematical Physics".

Structure of the thesis: The thesis was elaborated at the Institute of Applied Physics, State University of Moldova, Chisinau, 2025, is written in Romanian and consists of introduction, four chapters, general conclusions and recommendations, 135 bibliographic titles, 145 pages of which 122 pages of basic text, 46 figures. The results presented in the thesis are published in 15 scientific papers. Based on the developed theories, two patents were obtained, and another is in the process of being obtained.

Key words: pulsed UV-C radiation, quantum effects, metamaterials, decontamination, DNA dimerization, pathogen inactivation.

Research area: biophysics, nonlinear optics and quantum optics.

The aim of the thesis: The purpose of the thesis is to present the results of research on the cooperative quantum action of short pulses of UV-C radiation during their propagation through metamaterials for the inactivation of pathogens.

Objectives of the thesis: analysis of the interaction between UV-C radiation and matter; inactivation of pathogens due to the applied pulsed coherent UV-C radiation; the nonlinear description of the dependence of the DNA/RNA dimerization rate on the applied ultra violet C radiation in the form of short pulses is proposed; application of the Born-Oppenheimer model to DNA dimerization under the action of radiation; manipulation of biomolecules using rotation channels through metamaterials penetrated by UVC radiation; the possibility of applying these concepts is proposed; decontamination equipment with dispersion of radiation in volume through spherical fiber/metamaterial in the disinfection of fluids (air, water, blood serum, etc.); the possibilities of applying and optimizing the intensity of UVC radiation applied in the proposed decontamination equipment on the volume of metamaterial bases are studied.

Scientific novelty and originality: For the first time, it was proposed to channel UV-C radiation through various special optical systems (metamaterials) using different types of fibres/balls quartz combinations. In the experimental investigations, the penetration depth of UV-C radiation through such metamaterial packagings at different intensities was determined, as well as the dependence of the radiation dose on the inactivation rate of the yeast solution. Two patent applications were proposed for patenting: a liquid decontamination device and a UV-C sterilizer.

The solved scientific problem: consists in highlighting an efficient inactivation mechanism based on theoretical and experimental research, taking into account their correlation.

Theoretical Significance: of the thesis consists in the development of the theory in the Born-Oppenheimer model (approximation) and its application to DNA dimerization under the action of ultraviolet C radiation, including the development of technologies for the decontamination of pathogens using short radiation pulses propagated through metamaterials to increase the decontamination rate of infected solutions. Since the electronic subsystem is faster compared to the nuclear subsystem of biomolecules, the solution of the quantum excitation problem of the electronic subsystem is investigated, considering that the atomic subsystem of nuclei is slow and can be considered fixed.

Application value: This implies the possibility of applying the research results described in the thesis for the development and elaboration of decontamination devices with a high rate of inactivation of pathogens, present in different environments such as: water, air and surfaces.

Implementation of scientific results: The results obtained were used within the institutional project within the State Program (2020-2023) ANCD Project 20.80009.5007.01: Quantum cooperativity between emitters (nuclei, atoms, quantum dots, molecules, biomolecules, metamaterials) and its application in informatics, advanced biophotonics optogenetics, as well as within the subprogram 011206: Cooperative-quantum phenomena between atoms, biomolecules, optical cavities under the action of electromagnetic radiation and their application in biophotonics for the development of modern decontamination and diagnostic equipment. Based on the results of these studies, two decontamination devices were proposed for patenting: one refers to the disinfection of infected liquids, the other to the sterilization of surgical and laboratory instruments. Both ideas obtained a positive opinion and were entered in the AGEPI register with the deposit numbers "s 2023 0031" and "s 2024 0049" respectively.

АННОТАЦИЯ

К докторской диссертации **«Кооперативное квантовое взаимодействие коротких импульсов излучения с биомолекулами при их распространении через метаматериалы с применением его в диагностике, лечении и инактивации патогенов»**, представленной Munteanu Ion, для получения ученой степени доктора физических наук по специальности 131.01 «Математическая физика», Кишинев 2025.

Структура диссертации: Диссертация была выполнена в Институте Прикладной Физики, Кишинев, 2025, написана на румынском языке и состоит из введения, 4 глав, общих выводов и рекомендаций, 135 библиографических названий, 145 страниц, из которых 122 страницы основного текста научных статей.

Ключевые слова: импульсное УФ-С-излучение, метаматериалы, квантовые эффекты, димеризация ДНК, инактивация патогенов.

Сфера научных интересов: биофизика, нелинейная оптика и квантовая оптика.

Основная цель диссертации: Целью диссертации является представление результатов исследований кооперативного квантового действия коротких импульсов УФ-С-излучения при их распространении через метаматериалы для инактивации патогенов.

Цели диссертации: анализ взаимодействия УФ-С-излучения с веществом; инактивация патогенов за счет применяемого когерентного импульсного УФ-С-излучения; предложено нелинейное описание зависимости скорости димеризации ДНК/РНК от приложенного короткоимпульсного ультрафиолетового излучения С; применение модели Борна-Оппенгеймера к димеризации ДНК под действием радиации; манипулирование биомолекулами с использованием вращательных каналов через метаматериалы, проницаемые для УФ-С-излучения; предложена возможность применения данных концепций для оборудования дезактивации с рассеиванием излучения в объеме через сферическое волокно/метаматериал при дезинфекции жидкостей (воздуха, воды, сыворотки крови и т.п.); Изучены возможности применения и оптимизации интенсивности УФ-С-излучения, применяемого в предлагаемом дезактивационном оборудовании на основе объемных метаматериалов.

Научная новизна и оригинальность: Впервые было предложено направлять УФ-С-излучение через различные специальные оптические системы (метаматериалы) с использованием различных типов комбинаций волокон и кварцевых шариков. В ходе экспериментальных исследований была определена глубина проникновения УФ-С-излучения через такую метаматериальную упаковку при различной интенсивности, а также зависимость дозы облучения от скорости инактивации дрожжевого раствора. Разработаны и запатентованы устройство для обеззараживания жидкости и стерилизатор УФ-С.

Решенная научная проблема: заключается в выделении эффективного механизма инактивации на основе теоретических и экспериментальных исследований с учетом их взаимосвязи.

Теоретическое значение диссертации: заключается в развитии теории в модели Борна-Оппенгеймера (приближение) и ее применении к димеризации ДНК под действием ультрафиолетового излучения С, в том числе при разработке технологий дезактивации патогенов с использованием коротких импульсов излучения, распространяемых через метаматериалы, для повышения скорости дезактивации инфицированных растворов. Поскольку электронная подсистема является более быстрой по сравнению с ядерной подсистемой биомолекул, исследуется решение задачи квантового возбуждения электронной подсистемы, учитывая, что атомная ядерная подсистема является медленной и ее можно считать неподвижной.

Прикладное значение: Это предполагает возможность применения результатов исследований, описанных в диссертации, для разработки и создания дезактивационных устройств с высокой степенью инактивации патогенов, присутствующих в различных средах, таких как: вода, воздух и поверхности.

Внедрение научных результатов: Полученные результаты использованы в институциональном проекте в рамках Государственной программы (2020-2023) АНКО Проект 20.80009.5007.01: Квантовая кооперативность между излучателями (ядрами, атомами, квантовыми точками, молекулами, биомолекулами, метаматериалами) и ее применение в информатике, перспективной биофотонике, оптогенетике, а также в рамках подпрограммы 011206: Кооперативно-квантовые явления между атомами, биомолекулами, оптическими резонаторами под действием электромагнитного излучения и их применение в биофотонике для разработки современного дезактивационного и диагностического оборудования. По результатам этих исследований предложено к патентованию два дезактивационных устройства: одно относится к дезинфекции инфицированных жидкостей, другое - к стерилизации хирургических и лабораторных инструментов. Обе идеи получили положительное заключение и были внесены в реестр AGEPI с номерами депозитов «s 2023 0031» и «s 2024 0049» соответственно.

LISTA ABREVIERILOR

USP – Ultrashort Pulsed

CEM – câmp electromagnetic

EM – electromagnetic

MF– molecule fotonice

B-O – Born-Oppenheimer

IR – infraroșu

UV – radiație ultravioletă

UV-C – radiație ultravioletă de tip C

ADN – acidul dezoxiribonucleic

CARS – coherent anti-Stokes Raman spectroscopy

CRS – coherent Raman Scattering

Ref. – referința bibliografică

eV – electroni volți

IPL– intense pulsuri de lumina

VIS – domeniul vizibil

INTRODUCERE

Actualitatea temei și importanța problemei abordate

Pandemia COVID-19 a avut un impact profund asupra societății la nivel global, afectând sănătatea publică și stilul de viață al oamenilor. Pentru a limita răspândirea virusului SARS-CoV-2, au fost implementate măsuri de prevenire, precum distanțarea socială, purtarea măștilor de protecție și vaccinarea. Radiația UV-C, o formă de radiație ultravioletă, s-a dovedit eficientă în dezinfectarea aerului contaminat și a suprafețelor, având capacitatea de a distruge bacterii și virusuri, inclusiv SARS-CoV-2. Deși radiația UV-C este eficientă în procesul de decontaminare, utilizarea sa necesită precauție, deoarece expunerea directă poate fi extrem de dăunătoare pentru piele și ochi.

În ultimul timp, dezvoltarea tehnologiilor și echipamentelor de dezinfectare pentru gestionarea riscurilor asociate pandemiei a atras un interes semnificativ. Un concept inovator în domeniul echipamentelor de decontaminare se bazează pe utilizarea efectelor avansate de manipulare optică și cooperativă pentru inactivarea agenților patogeni. Una dintre aceste abordări vizează stabilirea rezistenței și inactivarea selectivă a agenților patogeni, luând în considerare dependența eficienței decontaminării de frecvența și durata pulsului de lumină. Alte efecte implică utilizarea pensetei optice în zone cu radiații intense, în special în cazul pulsurilor de radiație UV-C, precum și aplicarea acțiunii centrifuge asupra particulelor în rotație, cum ar fi patogenii sau aerosolii. Acest proces se bazează pe diferența dintre indicii de refracție optică ai agenților patogeni și purtătorii acestora (picături, aerosoli), care, conform efectului de „pensetă optică” (optical tweezer), sunt atrași în zonele cu radiație de intensitate mai mare.

Pentru a spori eficiența echipamentelor destinate inactivării agenților patogeni, au fost explorate noi modalități de interacțiune cooperativă neliniară între diferite tipuri de microorganisme în procesele de absorbție și emisie a fotonilor. Un model de cooperare neliniară a fost dezvoltat pe baza proceselor similare efectului Raman, observate în interacțiunea materie-laser din optica cuantică. Principalul rezultat al acestei teorii evidențiază că procesul de dimerizare în ADN/ARN depinde semnificativ de intensitatea radiației UV-C aplicate, demonstrând astfel un posibil fenomen microscopic cuantic al interacțiunii radiației UV-C cu ADN-ul.

Inactivarea patogenilor prin utilizarea radiației UV-C pulsate reprezintă o metodă inovatoare care folosește impulsuri scurte și intense, crescând eficiența inactivării microorganismelor în comparație cu sursele continue de radiație UV-C. Pe lângă deteriorarea

ADN-ului microbial, radiația pulsată poate induce efecte fotochimice suplimentare, amplificând procesul de inactivare. Astfel, această tehnologie se dovedește eficientă în dezinfectarea suprafețelor și a aerului, datorită capacității sale de a distruge structura ADN-ului sau ARN-ului microorganismelor, inclusiv bacterii, virusuri și fungi, împiedicându-le reproducerea și capacitatea de a provoca infecții.

Scopul principal al lucrării rezidă din denumirea tezei și constă în creșterea eficienței echipamentelor de inactivare a agenților patogeni ca urmare a acțiunii cooperativ cuantice a impulsurilor scurte de radiație UV-C cu biomolecule la propagarea lor printre elementele metamaterialului.

Obiectivele cercetării:

1. Cercetarea specificului interacțiunii radiației UV-C pulsate/continue conform literaturii. Evidențierea unor dezavantaje legate de penetrarea acesteia în interiorul fluidului translucid.
2. Investigarea posibilităților de penetrare a radiației UV-C în interiorul fluidului translucid (netransparent) utilizând fibre sau bile din cuarț care permit propagarea unde în interiorul acestuia.
3. Estimarea creșterii zonei de contact a unui metamaterial format din subsisteme de tip fibră sau bilă la împachetarea acestora, impactul acestei estimări asupra eficienței de inactivare a patogenilor.
4. Descrierea mecanismului de influență a duratei pulsului UV-C reieșind din interacțiunea neliniară a biomoleculelor cu radiația.
5. Cercetarea formării de dimeri moleculari în biomolecule (ADN, ARN) cu ajutorul modelului Born-Oppenheimer ajustat la câmpul electromagnetic extern. Influența sistemului rapid electronic asupra deplasării nucleelor sub acțiunea radiației coerente.
6. Estimarea posibilităților de reambalare a metamaterialelor și a efectelor rotirii patogenilor printre aceste metamateriale la elaborarea de echipamente noi cu o eficiență sporită în decontaminare.

Ipoteza de cercetare:

Utilizarea radiației UV-C pulsate, în corelație cu principiile modelului Born–Oppenheimer, permite optimizarea procesului de dimerizare a ADN-ului patogen, iar integrarea metamaterialelor în dispozitivele de decontaminare îmbunătățește eficiența inactivării microorganismelor prin controlul precis al propagării radiației. Această ipoteză presupune următoarele:

-Eficiența radiației UV-C pulsate în inducerea dimerizării ADN-ului patogenilor pentru inactivare.

-Aplicarea modelului Born–Oppenheimer în analiza interacțiunii radiației UV-C cu biomoleculele, separând mișcarea electronică de cea nucleară pentru a înțelege mai bine mecanismele fizico-chimice implicate.

-Rolul metamaterialelor în îmbunătățirea manipulării și direcționării radiației UV-C în dispozitivele moderne de decontaminare, sporind eficacitatea acestora.

Sinteza metodologiei de cercetare și justificarea metodelor de cercetare alese:

Această cercetare este de tip teoretic cât și experimental, combinând modele teoretice bazate pe modelul Born–Oppenheimer și efectul tweezer, cât și metode experimentale pentru testarea inactivării patogenilor aflați printre elementele metamaterialelor pătrunse de radiația UV-C pulsată. Aceste metode teoretice și experimentale presupun:

-modelarea interacțiunii radiației UV-C pulsate cu ADN-ul biomoleculelor utilizând modelul Born–Oppenheimer.

-transferul energetic al radiației UV-C asupra ADN-ului;

-stabilitatea și mecanismul de formare a dimerilor de timină;

-analiza modului în care câmpurile electromagnetice concentrate pot influența structura microorganismelor și propagarea radiației UV-C.

Justificarea metodelor alese:

-Modelul teoretic Born–Oppenheimer, oferă o bază fundamentală pentru înțelegerea mecanismelor la nivel molecular.

-Metamaterialele și efectul tweezer sunt investigate pentru a îmbunătăți precizia și eficiența aparatelor de decontaminare, aducând inovație tehnologică.

-metodele experimentale permit validarea practică a eficienței UV-C pulsate în inactivarea patogenilor și a modificărilor ADN-ului;

Metodele sus menționate fiind prezente în cercetările fizicii moderne efectuate în ultima perioada de timp, permit soluționarea multor probleme legate de inactivarea eficientă a patogenilor din diferite medii la interacțiunea lor cu radiația UV-C.

Semnificația teoretică și valoarea aplicativă a lucrării

1. A fost dezvoltată teoria cu utilizarea modelului (aproximarea) Born-Oppenheimer și aplicarea lui la dimerizarea ADN-lui sub acțiunea radiației UV-C
2. Extinderea tehnologiilor de decontaminare a patogenilor pentru creșterea ratei de decontaminare a soluțiilor infectate cu utilizarea pulsurilor scurte de radiație ultravioletă propagate prin metamateriale.
3. S-a elaborat două dispozitive de decontaminare cu o rată înaltă de inactivare a agenților patogeni cu aplicarea rezultatelor cercetării descrise în teză.

Problema științifică soluționată

A fost evidențiat un mecanism de inactivare eficientă a microorganismelor în baza cercetărilor teoretice și experimentale luând în considerație corelația lor, precum și dezvoltarea unui procedeu de decontaminare a agenților patogeni accelerați în mișcarea de rotație printre elementele metamaterialului sub influența radiației UV-C pulsate.

Rezultatele științifice principale înaintate spre susținere:

1. **Eficiență superioară a radiației UV-C pulsate, performanța surselor UV-C pulsate față de cele continue:** Tehnologia radiației UV-C pulsate, bazată pe expuneri scurte și intense, demonstrează o eficiență crescută în inactivarea patogenilor reducând semnificativ durata procesului de sterilizare comparativ cu sursele UV-C continue, care necesită timpuri de expunere prelunghite.
2. **Aproximația Born-Oppenheimer, aplicată în contextul dimerizării ADN** induse de radiația UV-C, permite modelarea dinamicii moleculare prin separarea mișcării nucleelor atomice de cea a electronilor, facilitând descrierea procesului de dimerizare printr-un model neliniar de interacțiune între subsistemele moleculare ale ADN-ului și pulsurile laser.
3. **Utilizarea metamaterialelor din cuarț:** Integrarea metamaterialelor translucide din cuarț în sistemele UV-C pulsate îmbunătățește penetrarea luminii, ceea ce conduce la o creștere substanțială a ratei de inactivare a patogenilor și la reducerea timpului de expunere necesar pentru decontaminare.

4. **Echipament modern de decontaminare avansată prin pulsații scurte UV-C și metamateriale translucide pentru eficiență optimizată în inactivarea patogenilor:**

Tehnologia bazată pe pulsații scurte de radiație UV-C, integrată cu metamateriale translucide din cuarț, optimizează penetrarea luminii și controlul dozei de iradiere, asigurând inactivarea rapidă și eficientă a patogenilor.

Aprobarea rezultatelor obținute

Rezultatele de bază ale lucrării au fost prezentate și discutate la **2 conferințe internaționale:** IEEE International Conference on e-Health and Bioengineering EHB 2022 - 10-th Edition, 17-19 November 2022, Hybrid Conference, Iasi – Romania, IEEE Conference Advanced Topics on Measurement and Simulation (ATOMS), Constanta. Romania, și **4 conferințe naționale:** *Conferința tehnico-științifică a studenților, masteranzilor și doctoranzilor*, 5-7 aprilie 2023, Chișinău, Conferința științifico-practică internațională „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”, Ediția a XI-a, 16-17 martie, 2024, Conferința Națională cu Participare Internațională: ȘTIINȚELE ale NATURII ÎN DIALOGUL GENERAȚILOR, ediția VII, 12-13 septembrie 2024, Chișinău, Volumul I, Chișinău, Conferința științifico-practică „TEHNOLOGII FIZICE AVANSATE CU APLICAREA UVS ÎN MONITORIZAREA ȘI MODELAREA FACTORILOR DE MEDIU”, Ediția a V – a, 8 Noiembrie 2024, și **10 târguri de invenții internaționale / naționale:** INVENTICA 2022, Iași, România, PRO INVENT 2022, perioada 26 - 28 octombrie 2022, România, EUROINVENT 15th European Exhibition of Creativity and Innovation, Iasi, Romania, 11-13 May 2023, “INVENTICA 2023” Iasi, PROINVENT, ediția a XXI-a, 25-27 octombrie 2023, CLUJ-NAPOCA, Salonului Internațional de Invenții și Inovații „Traian Vuia” 2023, Timișoara, International Exhibition INVENTCOR – 5th edition, 04-06 April 2024, Deva, Salonul Internațional de Invenții și Inovații „Traian VUIA”, 13-15 iunie 2024, Timișoara, Expoziția Europeană a Creativității și Inovării EUROINVENT, 6-8 iunie 2024, Iași, Expoziția Internațională Specializată INFOINVENT 2023 Ediția a XVIII-a, 22-24 noiembrie.

Publicații la tema tezei

În total rezultatele pe subiectul tezei sunt publicate în 15 lucrări științifice, dintre care 4 articole în reviste internaționale cotate Web of Science și SCOPUS (The European Physical Journal - Plus (EPJ Plus), MDPI Materials, European Biophysics Journal Springer, IEEE *Xplore*), 1 articol în reviste naționale (Studia Universitatis Moldaviae, Revista științifică a Universității de Stat din Moldova, 2024, nr. 1(171), 109-115.CZU: 535.37:616.314-089. (Categorie B)), 5 lucrări științifice în reviste din alte baze de date acceptate de către ANACEC , 5 rapoarte/teze ale comunicărilor la

congrese, conferințe, simpozioane, în culegeri, 3 brevete de invenție. Dintre acestea, 1 brevet de invenție, 2 articole și 2 rezumate, sunt publicate fără coautori.

Sumarul capitolelor tezei: constă din introducere, patru capitole, concluzii generale și recomandări. Lucrarea este prezentată pe 145 pagini (122 pagini text de bază) și conține 46 figuri, și 3 tabele.

În Introducere este descrisă actualitatea temei și importanța problemei abordate, este definit scopul principal și obiectivele cercetării. În funcție de scopul studiului a fost selectata metodologia de cercetare și justificarea metodelor de cercetare alese, încheind cu sumarul capitolelor prezente în teză.

Capitolul I descrie situația actuală în domeniul dezvoltării noilor tehnologii de decontaminare a patogenilor conform literaturii. Decontaminarea prin metode avansate a devenit un domeniu de cercetare esențial, având aplicații în medicina, industria alimentară, apărare și protecția mediului. În acest context, utilizarea pulsurilor scurte de lumină și a metamaterialelor oferă soluții inovatoare pentru inactivarea agenților patogeni prezenți în medii diferite.

Inactivarea microorganismelor prin metode fizice depinde de doza de energie absorbită și de tipul sursei utilizate. În acest sens s-a cercetat cazul tehnologiilor bazate pe radiație electromagnetică (UV-C continuu, laser cu pulsuri scurte de lumină), unde eficiența sterilizării este determinată de intensitatea și durata expunerii, precum și de sensibilitatea microorganismului la tratamentul aplicat. Este prezentat mecanismul dimerizării ADN la absorbția fotonilor UV de către baze pirimidinice (timina sau citozina) cu formarea dimerilor ciclobutanici între bazele adiacente. Aspecte ale manipulării fără contact a particulelor microscopice au fost studiate în care un fascicul laser focalizat creează o forță de captare ce permite manipularea precisă a biomoleculelor.

În capitolul II sunt prezentate unele aspecte ale interacțiunii radiațiilor UV-C cu materia. Patogenii, inclusiv bacteriile, virusurile și fungii, sunt vulnerabili la doze adecvate de radiație UV, care pot deteriora componentele celulare esențiale. Sunt demonstrate efectele letale în cazul patogenilor și biomoleculelor urmare a expunerii lor la radiații ultraviolete, iar principalul efect la interacțiunea UV-C cu ADN/ARN este dimerizarea bazelor pirimidine (timina și citozina). Se cercetează două momente importante în acest capitol, unul legat de interacțiunea pulsului scurt cu materia (biomoleculele), iar cel de al doilea este utilizarea zonei evanescente la introducerea metamaterialelor transparente în fluidul translucid. Ultimul efect duce la sporirea substanțială a suprafeței de contact dintre radiația UV-C și fluidul contaminat. Pentru elucidarea procesului de dimerizare se propune un model neliniar de interacțiune a subsistemelor moleculare ale ADN-ului

cu pulsurile laser. Se consideră că odată cu excitarea acestor subsisteme descrește frecvența de vibrație ca funcție de amplitudinea de excitare, în această situație am propus un algoritm de rupere/dimerizare a ADN-ului ce constă în renormalizarea frecvenței de vibrație după fiecare puls utilizat la excitarea biomoleculelor.

În capitolul III este descrisă Aproximația Born-Oppenheimer (B-O) la dimerizarea ADN sub acțiunea radiației UV-C, care presupune că mișcarea nucleelor (atomilor) și a electronilor într-o moleculă poate fi tratată separat, deoarece electronii sunt mult mai ușori și se mișcă mai rapid decât nucleele. Pentru descrierea dependenței intensității radiației UV-C de modificarea structurii ADN, am propus utilizarea aproximării B-O. Pentru a cunoaște rata de absorbție a fotonilor de către ADN fost cercetată dependența procesului de dimerizare de intensitatea radiației UV-C. Este descrisă interacțiunea unui sistem cuantic ADN-ul biomoleculelor cu un mediu extern ca radiația UV-C prin introducerea aproximației Born-Markov.

În capitolul IV o atenție deosebită a fost acordată interacțiunii agenților patogeni cu metamateriale penetrate UV-C. Am cercetat și s-a propus noi posibilități ale aplicării câmpului optic evanescent în detecția, captarea chiar manipularea biomoleculelor prin ghidare optică pe metamateriale compozite de forme geometrice diferite bine structurate. Deoarece experiențe pe viruși și bacterii în laboratoarele de fizică sunt interzise, am ales bacteriile din soluția de drojdie pentru studiu, care au o rezistență mult mai mare față de numeroși agenți patogeni care sunt mai sensibili la radiațiile UVC. Experimental s-a determinat adâncimea de penetrare a radiației UV-C în cioburi de cuarț apoi în soluția de drojdie. Rezultatele au arătat o creștere semnificativă a ratei de inactivare a bacteriilor prezente în soluția de drojdie. Toate ideile acumulate au servit la elaborarea unui aparat pentru decontaminare lichide brevetat la AGEPI în perioada efectuării tezei înregistrat în registru de brevete cu numărul MD 1723 Y 2023.10.31.

1. DEZVOLTAREA TEHNOLOGIILOR DE DECONTAMINARE LA UTILIZAREA PULSURILOR SCURTE DE LUMINA SI A METAMATERIALELOR.

1.1. Prezentare generala conform literaturii.

Existența vieții pe Pământ se datorează în mare măsură **luminii**, care reprezintă o condiție esențială pentru desfășurarea reacțiilor fotochimice implicate în fotosinteză, precum și pentru stabilitatea și formarea legăturilor chimice din materia organică, prin conversia energiei luminoase.

Interacțiunea dintre lumină și materie a fost intens studiată de-a lungul timpului. Încă din 1877, **Blunt și Downes** au investigat efectele expunerii prelungite la lumină asupra microorganismelor. Prin creșterea timpului de expunere al eprubetelor ce conțineau **soluție Pasteur** la lumina solară, aceștia au observat că eprubetele au rămas **libere de bacterii timp de câteva luni** [1]. Această descoperire timpurie a oferit un prim indiciu asupra efectului antimicrobian al radiației luminoase, deschizând calea pentru cercetări ulterioare în domeniul decontaminării prin lumină.

Efectele ce apar în urma interacțiunii radiației ultraviolete cu materia vie posedă un impact semnificativ asupra organismelor având atât efecte dăunătoare, cât și benefice. Ca efecte dăunătoare pot fi întâlnite interacțiuni la nivel celular (daune acidului dezoxiribonucleic (ADN-ului) care poate duce la mutații), arsuri sau cancer, iar printre efecte benefice pot fi menționate tratamentele medicale cum ar fi terapia fotodinamică sau sinteza de vitamina D în piele.

Absorbția luminii de către atomi determină tranziții ale electronilor de pe nivelele energetice fundamentale pe nivele excitate, iar acest lucru poate fi reprezentat prin relația:

$A^F + h\nu \rightarrow A^E$, unde A^F este atomul în stare fundamentală, $h\nu$ - energia cuantei de lumină iar A^E este atomul în stare excitată. În cazul când cuanta de energie absorbită de către atom este superioară energiei de legătură a electronului în atom, electronul este smuls, astfel atomul se transforma în ion pozitiv. Fiecare foton de lumină absorbit de un sistem compus din mai multe molecule, doar o moleculă este activată pentru reacția ulterioară afirmă legea Stark-Einstein, derivată de Albert Einstein conform teoriei sale cuantice (fotonice) dezvoltate.

Molecula poate utiliza energia absorbită de la foton diferit, în unele cazuri poate avea loc fenomenul de disociere a moleculelor (fotoliza), astfel formându-se radicali liberi, atomi sau ioni-radicali ce pot declanșa procese secundare. În alte cazuri atomii sau grupuri de atomi își pot schimba poziția în moleculă dar cu păstrarea componenței ei.

Radiațiile electromagnetice din domeniul vizibil posedă o acțiune biologică destul de pronunțată asupra biomoleculelor, deoarece energiile fotonilor de $3-7\text{ eV}$ sunt suficiente pentru ruperea legăturilor chimice a multor compuși, fapt ce și stă la baza fotosintezei [2].

O atenție deosebită voi acorda în aceasta lucrare anume radiațiilor electromagnetice din domeniul ultraviolet ale căror lungimi de unda sunt cuprinse între $100-400\text{ nm}$, deoarece aici fotonii posedă o energie mai mare decât cei ai luminii vizibile, de la aproximativ 3.1 până la 12.4 electroni volți (eV), unde valoarea de 12.4 eV reprezintă limita energiei minime necesară ionizării atomilor. Aceasta valoare ușor poate fi determinată cu ajutorul relației lui Planck [3]:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (1.1)$$

unde E este energia unui singur foton, h - constanta lui Planck ($h = 6.626 \times 10^{-34}\text{ J} \cdot \text{Hz}^{-1}$), c - viteza luminii ($c = 3 \times 10^8\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), iar λ - lungimea de unda. Dacă introducem în formula (1.1) $\lambda = 100\text{ nm}$, atunci se obține valoarea pentru $E = 12.4\text{ eV}$.

Absorbția radiațiilor UV de către ADN-ul biomoleculelor, se datorează în primul rând tranzițiilor electronice ale bazelor nucleotidelor, Timina (T), Adenina (A), Citozina (C) și Guanina (G). Fiecare bază absoarbe radiația UV la lungimi de undă specifice, rezultând spectre de absorbție caracteristice. Maximele pentru bazele ADN la absorbție apar la $\sim 265\text{ nm}$, unde timina și adenina având o absorbție mai mare în capătul inferior al intervalului, iar citozina și guanina având o absorbție mai mare în capătul superior al intervalului [4].

Pandemia COVID-19 care a afectat în mare măsură aproape toată populația de pe Terra ne-a făcut să realizăm din nou importanța dezinfecției și igienizării mediului în spațiile atât interioare cât și exterioare, locuri de interes public (scoli, spitale, săli clinice, magazine), etc... În acest sens, autorii [5, 6] consideră că iradierea cu ajutorul radiației UV-C (intervalul $200-290\text{ nm}$) posedă un potențial mare de dezinfecție germicid. Acțiunea radiației UV-C este o abordare antivirală directă, cu eficiență dovedită împotriva diferitelor viruși din aer, apă sau alte medii [7]. Prin urmare, importanța radiațiilor UV-C este acceptată și recunoscută deoarece iradierea UV-C a fost deja utilizată pentru prevenirea transmiterii și infectării cu diferiți viruși ce se găsesc în medii diferite [8].

Autorii [9] consideră că iradierea cu radiații ultraviolete (în special **UV-C**) este una dintre cele mai eficiente strategii antivirale, care a atras și continuă să atragă în mod deosebit atenția multor

cercetători. Tot ei afirmă că acest tip de radiație UV-C este capabil să inactiveze o gamă largă de patogeni, precum microbi, viruși, bacterii, ciuperci și drojdii.

1.2. Inactivarea microorganismelor ca funcție de doza absorbită.

S-a demonstrat că numeroase microorganisme pot fi inactivate datorită absorbției radiației UV-C de către ADN și ARN, ceea ce provoacă modificări structurale în acestea. În funcție de severitatea acestor modificări, microorganismele pot deveni incapabile de replicare. Alterările ADN-ului și ARN-ului induse de radiația UV-C depind de mai mulți factori, printre care rezistența microorganismelor la această radiație, durata expunerii și doza de radiație absorbită. Relația dintre doza absorbită și eficiența inactivării microbiene variază nu doar în funcție de tipul microorganismului, ci și de factori suplimentari, precum intensitatea sau puterea sursei de radiație UV-C, distanța dintre sursă și suprafața expusă, mediul în care se află microorganismele și timpul de expunere.

Este esențial să se determine doza minimă de radiație UV-C necesară pentru inactivarea biomoleculelor, deoarece această doză poate fi analizată din două perspective: iradierea cu intensitate scăzută pe o durată lungă de expunere sau iradierea cu intensitate foarte mare pe o durată scurtă de expunere. În ambele cazuri, doza totală de radiație transmisă patogenului este aceeași. Totuși, în primul scenariu, când intensitatea radiației este scăzută, structura ADN-ului nu este afectată semnificativ. În schimb, în al doilea caz, când intensitatea radiației este foarte mare, efectul poate duce la distrugerea completă a biomoleculei.

Intensitatea iradierii UV aplicată este descrisă în miliwați pe centimetru pătrat (mW / cm^2). Doza de iradiere UV necesară pentru a inactiva un anumit microorganism este de obicei descrisă printr-o intensitate a iradierii UV înmulțită cu timpul de expunere (adică $mW \times s / cm^2$ sau mJ / cm^2). Eficiența decontaminării patogenilor în funcție de iradierea UV poate fi calculată conform [11], folosind următoarea formula:

$$I_{patogen}(\%) = \frac{n_i - n_f}{n_i} \times 100\%, \quad (1.2)$$

unde $I_{patogen}(\%)$ este inactivarea patogenilor exprimat în procente, n_i și n_f sunt numărul de patogeni (i) inițial și (f) respectiv final. Pentru a cunoaște numărul patogenilor ramași în urma decontaminării se va folosi următoarea ecuație:

$$LOG10_{Inactiv.Pathogen} = -\log_{10}\left(1 - \frac{I_{patogen}}{100}\right). \quad (1.3)$$

Formula (1.3) calculează numărul de patogeni lăsați în urmă odată ce a avut loc decontaminarea. De exemplu, dacă în urma decontaminării unei suprafețe (sa presupunem o masă) dintr-o colonie de 1 milion de viruși de pe masa respectivă, o rată de inactivare de 1-log sau 90% va lăsa în urmă 100.000 de viruși. Tabelul (1) prezintă diferitele conotații:

Tabelul 1. Măsurarea exactă a ratei de reducere a patogenilor

LOG/Rata	1-log	2-log	3-log	4-log	5-log	6-log
Rata de inactivare (%)	90%	99%	99,9%	99,99%	99,999%	99,9999%
Virusi ramași din 1 milion	100.000	10.000	1.000	100	10	1

În literatura există multe studii referitor la doza de radiație UV utilizată pentru decontaminarea diferitor forme de patogeni [12,13], ca de exemplu studiu recent al autorilor [14], au stabilit cinetica de inactivare a SARS-CoV-2 dependentă de doză UV-C unde $\lambda = 254\text{ nm}$ și au raportat dozele necesare pentru sterilizarea completă a preparatelor virale uscate și umede între 4 s și 9 s la $0,85\text{ mW} / \text{cm}^2$ într-o cutie de testare.

Expunerea scurtă a virusului uscat la suprafață cu titru ridicat ($3-5 \times 10^6\text{ IU} / \text{ml}$) la lumină UV-C de ($16\text{ mJ} / \text{cm}^2$) a dus la o inactivare totală a SARS-CoV-2. Experimentele de dependență de doză raportate în [13] au arătat că ($3.5\text{ mJ} / \text{cm}^2$) au fost încă eficiente pentru a obține o reducere $a > 6 - \log$ de titre virale, în timp ce ($1.75\text{ mJ} / \text{cm}^2$) a scăzut infecțiozitatea doar cu un ordin de mărime. Pentru inactivarea totală a SARS-CoV-2, unele dintre studii au folosit doze mari de radiație UV-C de la $108\text{ mJ} / \text{cm}^2$ la mai mult de $1\text{ J} / \text{cm}^2$, unde timpul de expunere a variat de la 50 s până la câteva minute [15,16]. Prin urmare, este încă foarte important să se mai efectueze studii pentru a determina cu exactitate dozele UV-C necesare dar și suficiente pentru inactivarea patogenilor prezenți în diferite medii.

Conform teorii din lucrarea [17], cantitatea de inactivare virală atinsă pentru un anumit flux radiant UV (iradiere) este ușor descrisă cu ajutorul următoarei ecuații de dezintegrare de ordinul întâi

$$N_t = N_0 \times e^{-Z \cdot E \cdot t}, \quad (1.4)$$

unde: N_0 și N_t sunt numărul de particule virale viabile (virioni) la momentul zero și, respectiv, t secunde; Z este constanta de susceptibilitate (sensibilitate) UV pentru virus (m^2 / J); E este fluxul radiant (iradiere) (W / m^2); iar t este timpul în secunde.

Doza de iradiere UV ce poate fi primită de virus poate fi exprimată prin relația:

$$H = E \times t, \quad (1.5)$$

unde: H este doza de iradiere UV, exprimată în (J / m^2). Prin combinarea relațiilor (1.4) cu (1.5), se poate obține valoarea pentru constanta de susceptibilitate Z

$$Z = -\frac{1}{H} \times \ln \left(\frac{N_t}{N_0} \right) = -\frac{1}{H} \times \ln(f), \quad (1.6)$$

unde f este fracția de supraviețuire. Faptul ca relația dintre doza UV și logaritmul natural al fracției de supraviețuire, este liniară pentru majoritatea patogenilor (1.6), reiese că starea oricărui patogen expus sub radiația UV poate fi descrisă cu ajutorul lui Z , fără sa conteze doza UV suficient aplicată. Odată ce valoarea lui Z este determinată, atunci cu o precizie înaltă poate fi presupus comportamentul patogenului expus la o anumită doză de radiație UV indiferent de situație. Patogenii cu valori mari a lui Z sunt mai susceptibili la daune cauzate de radiația UV, pe când cei cu valori mici ale lui Z sunt mai greu de inactivat [17].

Conform teoriei descrise în [18], relația pentru doza de radiații UV care o pot primi agenții patogeni care se găsesc în interiorul unei conducte de ventilație este:

$$D = \int_{t_i}^{t_p} I_r(x, y, z) dt. \quad (1.7)$$

În relația (1.7), D este exprimată în J / m^2 și reprezintă doza de radiație UV primită de patogenii din interiorul conductei de ventilație, t_i și t_p sunt timpii în care agenții patogeni aflați în aer intră în conducta de ventilație și, respectiv, ajung în locația de interes. $I_r(x, y, z)$ reprezintă

iradierea spațială la locația spațială (x, y, z) . Când patogenii din aer sunt expuși la iradiere, fracția de supraviețuire (F_s) este o funcție exponențială după [19,20] ce se scrie ca

$$F_s = e^{-Z \cdot D}, \quad (1.8)$$

care este aceeași teorie conform [17]. Experimentele făcute în [19] demonstrează eficacitatea dezinfectării (η) în conducta de ventilație cu ajutorul lămpii UV în regim ON cat și OFF (pornit/oprit). Pe baza metodei respective, s-a determinat eficacitatea dezinfectării (η) care poate fi calculată ca:

$$\eta = \left(1 - \frac{\sum_t (n_{on,sampling})_t}{\sum_t (n_{off,sampling})_t} \right) \times 100\%, \quad (1.9)$$

unde, $\sum_t (n_{on,sampling})_t$ și $\sum_t (n_{off,sampling})_t$ sunt agenții patogeni din aer colectați în planul eșantionului ($y = 1,4$ m) pentru situațiile de pornire sau de oprire a lămpii UV în conductă.

Pentru o bună înțelegere a eficienței inactivării cu ajutorul UV, este necesar de cunoscut relația pentru procentul de agenți patogeni din aer inactivați prin iradierea UV, ce poate fi scrisă sub forma:

$$P_{uv} = \frac{\sum_{t=0}^{\tau} (n_{in} - n_{trap} - n_e)_t - n_s}{\sum_{t=0}^{\tau} n_{in,t}} \times 100\%, \quad (1.10)$$

unde τ este timpul total, n_{in} este numărul de patogeni injectați de pe suprafața limită de intrare la momentul t , n_{trap} reprezintă numărul de patogeni din aer de pe suprafața peretelui conductei la momentul t , n_e este numărul patogenilor care au scăpat și au fost evacuați din tub la momentul t , n_s este numărul patogenilor care încă sunt prezenți în aer. Numitorul, $n_{in,t}$ indică numărul total de patogeni din aer inactivați prin iradiere în timpul măsurării.

1.3. Inactivarea microorganismelor ca funcție de sursa aleasă

În anul 1801 fizicianul german Johann Ritter arată cum are loc transformarea clorurei de argint plasată în regiunea întunecată a spectrului Soarelui, lângă violet. Clorura de argint se transformă

din culoarea albă în negru mult mai repede, iar acest efect chimic era cauzat de o anumită formă de energie dincolo de violet astfel descoperind regiunea ultravioletă (UV) a spectrului solar [21]. Lumina UV provenită de la soare constituie aproximativ 5% și este unica sursă naturală de radiație pe Terra. Așadar, nu toată lumina solara UV ajunge pe suprafața terestră, fiind împărțită în UV-A (315–400 nm), UV-B (280-315 nm) UV-C (100-280 nm), pe pământ ajunge numai UV-A și o cantitate mică de UV-B, pe când UV-C este absorbita de stratul de ozon.

Reiese că numai lumina UV provenită de la soare poate fi considerată drept o sursă naturală, în rest totalitatea altor surse de radiații UV întâlnite sunt surse artificiale. Drept exemple de surse artificiale UV sunt radiații produse de arcuri electrice, radiații Cherenkov [26], lămpi cu vapori de mercur, lămpi negre, lasere. Cea mai răspândită sursa UV cost-efectiv este lampa cu mercur.

Până în prezent, au fost propuse mai multe modele ale câmpului de iradiere datorat lămpilor UV, precum sursa punctuală, sursă linie, sursă linie integrată, dar și altele [22, 23]. Modelul sursă punctuală poate fi întâlnit în literatură și ca legea pătratului invers care spune că iradierea scade odată cu distanțarea de la sursă. Modelul folosit aici se bazează pe factorii de vizualizare a radiației termice, care definesc cantitatea de radiație difuză transmisă de la o suprafață la alta [24].

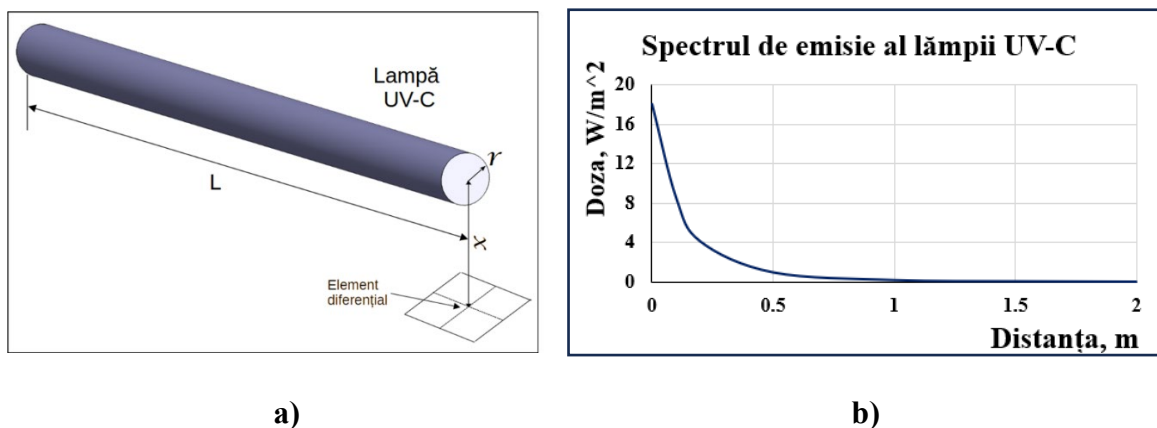


Fig. 1.1. a) Model de lampă UV-C. b) dependența dozei de radiație în raport cu distanța

Fig. 1.1.a, ilustrează o lampă UV-C în formă de cilindru de lungime L și raza r în care zona plană la care urmează să fie determinată iradierea UV ce este perpendiculară pe axă și este situată la una din marginile cilindrului. Graficul 1.1.b indică faptul că doza maximă (aproximativ 18-20 W/m²) este atinsă la distanța de 0 metri, sugerând că radiatorul este localizat la originea sistemului de coordonate, adică la adâncimea de 0 metri de la punctul de referință. Scăderea rapidă a dozei odată cu distanța confirmă că sursa emisie este poziționată la această adâncime inițială. Frația de iradiere radiativă care părăsește corpul cilindric și atinge o zonă diferențială [22] este:

$$F = \frac{L}{\pi H} \left[\frac{1}{L} \arctg \left(\frac{L}{\sqrt{H^2 - 1}} \right) - \arctg(M) + \frac{X - 2H}{\sqrt{XY}} \arctg \left(M \sqrt{\frac{X}{Y}} \right) \right]. \quad (1.11)$$

Parametrii ecuației (1.11) sunt definiți după cum urmează:

$$\begin{aligned} H &= x/r, \\ L &= l/r, \\ X &= (1 + H)^2 + L^2, \\ Y &= (1 - H)^2 + L^2, \\ M &= \sqrt{\frac{H-1}{H+1}}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

unde, l = lungimea segmentului lămpii (lungimea arcului), în centimetri;

x = distanța de la lampă până la zona diferențială, în centimetri;

r = raza lămpii, în centimetri.

Autorii [25] consideră că inactivarea microorganismelor sub acțiunea UV este direct proporțională legată de cantitatea de doză UV absorbită, iar aceasta relație se exprimă sub forma:

$$D = \int_0^t I dt. \quad (1.13)$$

În expresia (1.13), D este cantitatea de doză absorbită, I este intensitatea radiației și t este timpul de rezidență al agenților patogeni aflați în instalația de decontaminare (fotoreactor cu 2 lămpi UV-C drept sursă). Eficiența inactivării microorganismelor este de obicei cuantificată prin valoarea reducerii logaritmice (VRL), calculată ca logaritmul raportului dintre numărul inițial de microorganisme active și numărul de microorganisme active rămas la un anumit moment. Rata de inactivare a microorganismelor este considerată o funcție a dozei totale de radiație UV-C absorbită. Astfel, VRL poate fi exprimată ca:

$$VRL = \log \left(\frac{N_0}{N} \right) = f(D). \quad (1.14)$$

Tot ei [25], ca agent patogen fiind ales virusul pentru cercetare MS2 (E. coli bacteriofag ATCC 15597-B1) au demonstrat raportul de supraviețuire după relația:

$$S = \frac{dR^*}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{N}{N_0} \right) = -\ln(10) R^* I \frac{df(D)}{dD}, \quad (1.15)$$

astfel determinându-se curba de inactivare a MS2 care este dată de următoarea ecuație:

$$f(D) = 9 \times 10^{-10} D^3 - 3 \times 10^{-6} D^2 + 0.0062 D. \quad (1.16)$$

O altă sursă artificială de lumină UV este laserul. Principalele proprietăți ale radiației laser includ monocromaticitatea, coerența, direcționalitatea și intensitatea fasciculului. De asemenea, se pot menționa pulsurile laser, care pot avea durate extrem de scurte, de ordinul nanosecundelor sau chiar femtosecundelor. Există numeroase concepte teoretice care descriu funcționarea laserului, cum ar fi dinamica atomilor excitați și interacțiunea acestora cu fotonii.

$$\frac{dN}{dt} = R - \frac{N}{\tau}. \quad (1.17)$$

Relația (1.17) se referă la atomii excitați, unde N este numărul de atomi excitați, R este rata de excitație, iar τ este timpul de relaxare. Ecuația care descrie fotonii este:

$$\frac{dS}{dt} = \beta N - \frac{S}{\tau_m}, \quad (1.18)$$

unde S este numărul de fotoni, β este un coeficient care descrie eficiența emisiilor stimulante, iar τ_m este timpul mediu de viață al fotonilor în cavitatea laserului.

Un alt concept în acest sens presupune că relația de amplificare în laser poate fi modelată utilizând ecuații de tipul:

$$G = \frac{P_{out}}{P_{in}}, \quad (1.19)$$

unde G este amplificarea (Gain din engleza), (P_{out} este puterea de ieșire, iar P_{in} este puterea de intrare.

Un concept matematic care descrie teoria laserului este reprezentat prin ecuația de propagare a undelor electromagnetice, cum ar fi cele emise de un laser:

$$\nabla^2 E - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0, \quad (1.20)$$

unde E este câmpul electric al luminii și c este viteza luminii.

Toate fenomenele ce se asociază cu electricitatea și magnetismul clasic sunt guvernate de ecuațiile lui Maxwell care de fapt sunt un set de ecuații diferențiale cuplate:

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0, \\
\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\
\nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\
\nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}.
\end{aligned} \tag{1.21}$$

Aceste ecuații ale lui Maxwell (1.21) pot fi utilizate pentru calcule ale propagării undelor electromagnetice atât în plan bidimensional, cât și tridimensional (1.20). Dacă e să scriem prima ecuație $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ în componente, atunci se obține:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0. \tag{1.22}$$

Această ecuație se poate de redus la una simplă dacă e să presupunem că variații cu y și z , nu există. Atunci ultimii doi termeni sunt zero, și relația dată capătă următoarea forma:

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = 0. \tag{1.23}$$

Soluția componentei câmpului electric E_x , în direcția x de propagare, este o constantă, iar dacă se presupune că nu exista nici o variație a componentei câmpului magnetic B în y și z , putem vedea că E_x este de asemenea constantă în timp.

Câmpul E transversal, ușor poate fi rezolvat cu ajutorul a doua componente să zicem y și z . Admitem că avem direcția y de propagare a câmpului electric cu componenta z -zero. Este cert că dacă se rezolvă această problemă, cu siguranța se poate rezolva și cazul în care câmpul electric se propagă numai în direcția z . Soluția generală a acestor deduceri poate fi exprimată ca suprapunerea a două astfel de câmpuri. Dacă e să ne uităm la a două dintre ecuațiile lui Maxwell (1.21), pentru componentele lui E , se obține:

$$\begin{aligned}
(\nabla \times \mathbf{E})_x &= \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = 0, \\
(\nabla \times \mathbf{E})_y &= \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = 0, \\
(\nabla \times \mathbf{E})_z &= \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = \frac{\partial E_y}{\partial x}.
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Pentru componenta $\mathbf{x}$ a lui $\nabla \times \mathbf{E}$ valoarea este zero deoarece derivatele față de y și z sunt zero. Același lucru se observă și pentru componenta y care de asemenea este zero, unde primul termen este zero deoarece derivata față de z este zero, iar termenul al doilea este de asemenea zero deoarece E_z este zero. Relația $\partial E_y / \partial x$ fiind unica componentă ale lui $\mathbf{E}$ unde componenta z , nu este zero. Combinând aceste trei componente ale lui $\nabla \times \mathbf{E}$ ce sunt egale cu $-\partial \mathbf{B}_y / \partial t$ (1.21), se poate concluziona următoarele:

$$\frac{\partial \mathbf{B}_x}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{B}_y}{\partial t} = 0. \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}_z}{\partial t} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}. \quad (1.26)$$

În [27] este prezentat felul cum se obține relația de calcul în cazul undelor tridimensionale (20) cu ajutorul ecuației doi a lui Maxwell din (1.21), unde $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$. Înmulțind ambele părți ale acestei ecuații cu ∇ se va obține:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{B}) \quad (1.27)$$

Partea stângă a relației (1.27) este cunoscută ca vectorul laplacian al unui câmp vectorial ce poate fi scris ca suma a doi termeni, unul implicând divergența și celălalt laplacianul,

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}. \quad (1.28)$$

În spațiul tridimensional, divergența lui $\mathbf{E}$ este zero, deci rămâne doar termenul laplacian. De asemenea, din a patra dintre ecuațiile lui Maxwell (1.21) derivata după timp a lui $c^2 \nabla \times \mathbf{B}$ este derivata de ordinul 2 a componentei $\mathbf{E}$ în raport cu timpul t

$$c^2 \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{B}) = \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (1.29)$$

Combinând relația (1.28) cu (1.29) se obține următoarea ecuație de undă tridimensională pentru care are următoarea formă:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (1.30)$$

Această ecuație (1.30), scrisă desfășurat este:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (1.31)$$

Soluția generală a ecuației de undă tridimensională poate fi reprezentată ca o suprapunere a soluțiilor unidimensionale pe care le-am găsit deja (1.24, 1.25, 1.26), unde valoarea pentru viteza

luminii în vid este: $c_0 = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$.

1.4. Rolul duratei pulsului în decontaminare și dimerizarea ADN

Odată demonstrată capacitatea radiației UV-C de a inactiva microorganismele, este important să se analizeze tipul sursei de radiație UV-C pentru a determina condițiile în care eficiența decontaminării este maximă. După cum s-a menționat anterior, lămpile UV-C și laserele sunt cele mai utilizate surse de radiație continuă. Spre deosebire de lămpi, laserele pot funcționa atât în regim continuu, cât și în regim pulsat. Astfel, devine esențial să se investigheze în ce măsură efectul decontaminării microorganismelor este mai eficient: în regim continuu sau în regim pulsat.

Katherine L. Bialka și alții, în lucrarea [29] descriu cum eficiența dezinfectării prin iradiere policromatică pulsată a fost comparată cu cea a sistemelor UV monocromatice de joasă presiune (LP) și policromatice de medie presiune (MP), folosind două tipuri de actinometrie (ferioxalat și iodură-iodat) și o metodă de emisie spectrală absolută pentru măsurarea fluentei. Tot [29] declară că inactivarea *Escherichia coli* și fagii T4 și T7 ai patogenului surogat cu ajutorul radiației pulsate cu lungimea de undă de 295nm a fost semnificativ mai rapidă în comparație cu lămpile UV LP sau MP la niveluri de fluență echivalente.

Dezvoltarea tehnologiilor de decontaminare bazate pe interacțiunea pulsurilor scurte de radiație UV-C cu materia vie (biomolecule, virusuri, bacterii etc.) generează efecte complexe, care nu sunt încă pe deplin elucidate de comunitatea științifică. Explicarea acestor efecte necesită o înțelegere profundă a principiilor fizicii fundamentale.

În literatura de specialitate, există numeroase studii dedicate inactivării microorganismelor, care compară eficiența decontaminării între regimul pulsat și cel continuu [30, 31, 32]. Totuși, rămâne de clarificat particularitățile specifice care diferențiază aceste două regimuri. În esență, radiația continuă se referă în mare parte la energia electrică transferată fotonilor. Iradierea reprezintă cantitatea medie de energie incidentă pe unitatea de suprafață și unitatea de timp, putând fi exprimată prin următoarea relație:

$$D_{CL}(t) = \int_0^{t_{CL}} I_{CL} \times t \, dt. \quad (1.32)$$

Din relația (1.32) rezultă că inactivarea germicidă în regim continuu depinde de cel puțin trei factori: doza de radiație stabilită pentru experiment $D_{CL}(t)$, durata expunerii (t) la radiația UV-C și iradierea I_{CL} , care definește puterea incidentă pe unitatea de suprafață [33].

În [34], autorii raportează legătura dintre diferite tehnici de emisie a LED-urilor UV-C ilustrate în figura 1.2.

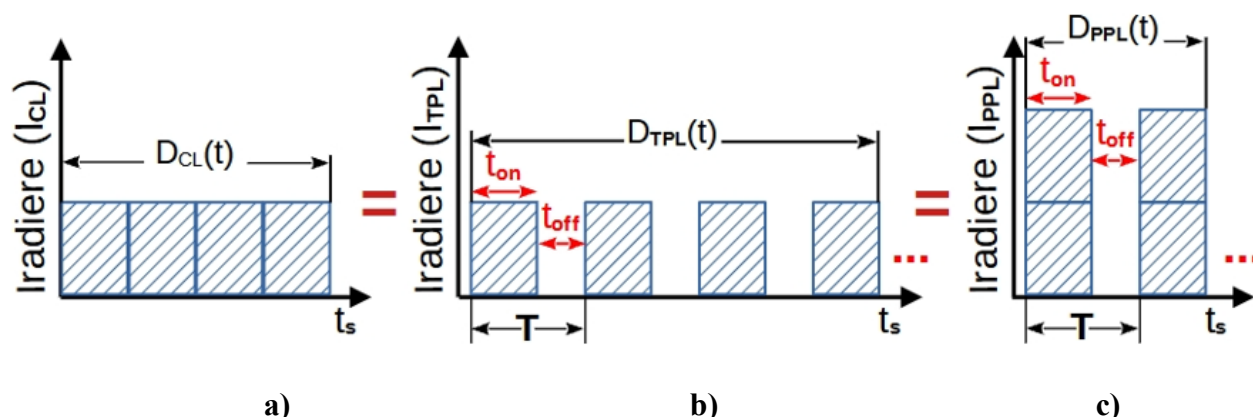


Fig. 1.2. Tehnici de emisie și dependența iradierii de timp pentru LED-urile UV-C. a) Lumină continuă (CL). b) Lumină pulsată în timp (TPL). c) Lumină pulsată de putere (PPL).

Fig. 1.2, descrie configurația a diferitor tehnici de iradiere a luminii LED UV-C utilizate pentru decontaminarea microorganismelor. Pentru a evidenția în cele 3 cazuri existența uneia și aceeași iradiere I_{CL} a fost împărțită partea hașurată în 4 sectoare. După cum se observă, în (Fig. 1.2a) este prezentată distribuția spectrală pentru o perioadă de timp pentru modul continuu de emisie de energie (fotoni), iar pentru lumina pulsată sunt prezentate 2 tipuri de moduri, Modul 1 (Fig. 1.2b) și Modul 2 (Fig. 1.2c), care diferă prin doza stabilită la diferite frecvențe sau cu alte cuvinte numărul de cicluri pe secundă.

Lumina pulsată prezintă un avantaj semnificativ față de lumina continuă. Acest avantaj nu se limitează doar la posibilitatea de a controla intensitatea luminii pulsate prin ajustarea parametrilor de frecvență, ci include și capacitatea de a regla atât durata pulsului, cât și ciclul de lucru. Această tehnică, în care impulsurile de radiație pulsate sunt caracterizate de un timp, o intensitate și o distribuție spectrală specifică, permite o livrare precisă și controlată a energiei pe

suprafața iradiată. Conform experimentelor [34], Modul 2 a demonstrat cel mai eficient efect bactericid. De asemenea, s-a evidențiat o diferență semnificativă între Modul 1 și Modul 2 în ceea ce privește dezinfectarea produselor proaspete.

Expresia care permite calculul dozei de radiație este asemănătoare cu expresia (1.32), și are forma:

$$D_{PPL}(t) = N_p \int_0^{t_{on}} I_{PPL} dt. \quad (1.33)$$

$D_{PPL}(t)$ se referă la dozele aplicate, exprimate în $J \cdot cm^{-2}$. Ecuațiile necesare pentru efectuarea modurilor de impuls sunt prezentate mai jos.

$$I_{PPL} = \frac{I_{CL} \times 100}{D}. \quad (1.34)$$

I_{PPL} este cantitatea de radiație emisă de lămpile LED UV-C în lumină pulsată, care depinde de I_{CL} , iar (D) este un ciclu de funcționare sau porțiunea unei perioade în care un semnal sau un sistem este activ [35,36], care se exprima prin relația:

$$D = \frac{PW}{T} \times 100\%, \quad (1.35)$$

unde, PW este lățimea impulsului sau timpul activ al impulsului și (T) este perioada totală a semnalului. Ciclul de funcționare (D) este raportul dintre timpul în care circuitul este pornit (t_{on}) și momentul în care circuitul este oprit (t_{off}), iar expresia de calcul pentru (t_{on}) va fi:

$$t_{on} = \frac{D \times T}{100}. \quad (1.36)$$

Timpul de pornire (t_{on}) este exprimat în secunde. Pulsul luminii depinde de ciclul de funcționare (D) și de frecvență. Perioada (T) depinde de frecvența pulsului selectată.

Efectele letale ale luminii pulsate pot fi atribuite conținutului său bogat de UV, duratei scurte, puterii de vârf ridicate și posibilității reglării atât duratei impulsului, cât și frecvența de ieșire, care joacă un rol semnificativ în inactivarea agenților patogeni. Forma curbei unui puls provenita de la lasere de tip mode-locked de exemplu, au adesea o formă temporală care arată

puterea optică în funcție de timp și din punct de vedere matematic aceasta formă poate fi descrisă ca o funcție de tip Gauss:

$$f(x) = \exp(-x^2). \quad (1.37)$$

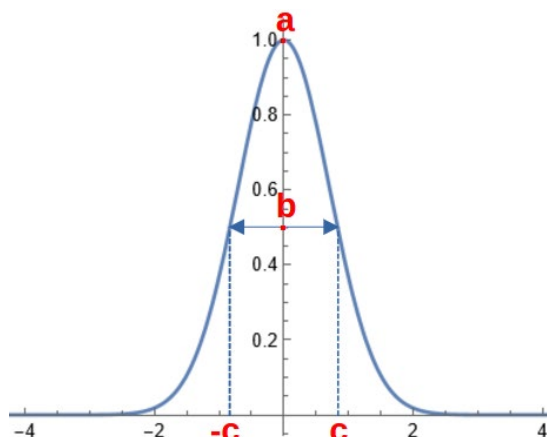


Fig. 1.3. Graficul funcției Gauss.

În Fig. 1.3 cu ajutorul ecuației (1.37) s-a obținut graficul unui Gaussian pe de o parte, iar pe alta parte forma unui puls care este o formă caracteristică simetrică „curbă clopot”. Parametrul a este punctul ce corespunde vârfului curbei, b este poziția centrului dintre vârf și baza, iar c este deviația standard ce controlează lățimea „clopotului”, respectiv a pulsului.

Vreau să atrag atenția aici referitor la funcțiile gauss care sunt adesea folosite pentru a reprezenta funcția de densitate de probabilitate a unei variabile aleatorii distribuite normal cu valoarea așteptată [37]. În acest caz parametrii $\mu = b$ și $\sigma_2 = c_2$, astfel expresia pentru funcția Gauss obține următoarea forma:

$$g(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}\right). \quad (1.38)$$

Relația (1.38) va fi utilizată în continuare ca formulă de calcul pentru determinarea concentrației și numărului de bacterii din soluția de drojdie, atât înainte, cât și după procesul de decontaminare cu radiație UV-C pulsată.

În ultimul timp, se acordă o atenție sporită problemelor biofizicii moderne, cum ar fi interacțiunea impulsurilor laser cu ADN-ul [38, 39], deoarece ADN-ul stochează și protejează toate informațiile esențiale pentru creșterea și reproducerea organismelor vii. Mai multe studii indică faptul că ținta celulară principală a radiației UV pulsate o reprezintă acizii nucleici [41, 42, 43], datorită capacității ADN-ului de a absorbi eficient lungimile de undă UV, ceea ce conduce la

formarea dimerilor de timină. Dimerul de ciclobutan-timină se formează ca un complex legat covalent între două baze de timină adiacente pe aceeași catenă de ADN (Fig. 1.4), reprezentând o fotoleziune indusă în special de radiația UV solară. Acesta este considerat un factor potențial în apariția cancerului de piele [44].

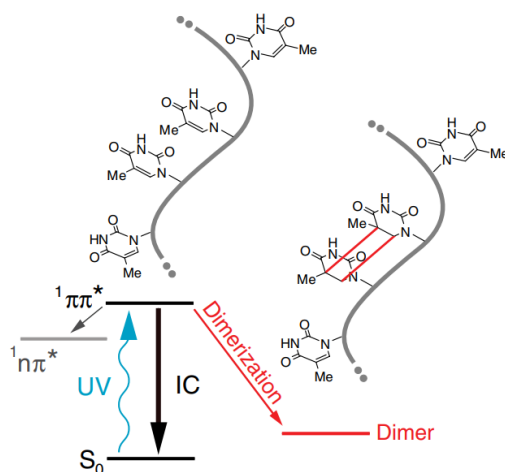


Fig. 1.4. Formarea dimerului de Timină urmare a acțiunii radiației UV. Imagine preluată din sursa [45].

În [46] se vorbește despre un experiment efectuat pe nouă voluntari sănătoși care au fost expuși la diferite forme ale radiației ca de exemplu UV-A sau la radiații UV solare simulate, sau intense pulsuri de lumina (IPL) din domeniul vizibil (VIS), ca mai apoi să fie determinate concentrațiile de dimer de timină și peroxid lipidic în speciunile de biopsie cutanată din locurile expuse. Rezultatele din acest experiment au arătat că doar expunerea la radiațiile UV solare ($7 - J/cm^2$ UV-A + $80 - mJ/cm^2$ UV-B) s-au produs cantități măsurabile de dimeri de timină în ADN din probele de biopsie cutanată, în timp ce radiațiile UV-A ($40 J/cm^2$) și IPL ($9 J/cm^2$) au indus creșteri de 3 ori, respectiv de 6 ori ale peroxidilor lipidici cutanați. În concluzie IPL-VIS poate genera stres oxidativ asemenea unui semn distinctiv al UV-A, dar nu induce dimeri de timină. Timpul de formare a dimerilor de timină după excitația ultravioletă, este de aproximativ 1 picosecundă [46].

Dimerii de timină (TT) induc o îndoire rigidă în structura ADN-ului, formând un unghi ascuțit care creează obstacole în timpul replicării ADN-ului de către ADN-polimerază. Aceasta întâmpină dificultăți în citirea dimerului și, frecvent, împerechează incorrect adenina (A) cu dimerii

de citozină (CC) în locul guaninei (G), ceea ce duce la apariția unei mutații [47]. Dacă se întâmplă acest lucru într-o genă importantă care controlează ca de exemplu creșterea celulelor, atunci aceasta mutație este fără posibilitate de replicare, iar efectele majore în acest caz pot duce chiar la cancer [48,49].

1.5. Utilizarea fibrelor capilare și a sferelor pentru captarea optică a biomoleculelor

Pandemia de COVID-19 a avut un impact semnificativ asupra umanității, determinând o reacție promptă din partea comunității științifice, care a dezvoltat diverse strategii pentru a contracara amenințarea agenților patogeni. Aceste strategii au inclus implementarea măsurilor de control pentru prevenirea transmiterii și încetinirea răspândirii virusului [50, 51]. Au fost create tehnologii inovatoare pentru inactivarea agenților patogeni [52, 53], multe dintre acestea utilizând radiația UV-C emisă de lămpi pentru decontaminarea virușilor și bacteriilor, cu rezultate pozitive demonstrate. De exemplu, patogenii expuși direct radiației UV-C cu lungimea de undă de 254 nm sunt inactivați eficient atât în aer, cât și pe suprafețe cu diverse geometrii.

Fenomenul undelor de galerie a fost observat acum aproximativ un secol de către Rayleigh, care l-a explicat pe baza observațiilor realizate într-o galerie antică situată sub cupola Catedralei Sf. Paul din Londra. Rayleigh a descoperit că, pe lângă acest efect, există un fenomen suplimentar: sunetul „se lipește” de suprafața peretelui și „alunecă” de-a lungul acesteia. El a demonstrat acest lucru prin experimente directe, utilizând un fluier ca sursă de sunet și o lumânare aprinsă ca detector [54]. În consecință, intensitatea sunetului în acest strat scade doar proporțional cu distanța, mult mai lent decât în spațiul liber. S-a constatat [55, 56] că în sferele dielectrice pot exista unde electromagnetice cu o structură spațială similară undelor de galerie.

În ultimul timp, efectul undelor de galerie a câștigat o recunoaștere amplă în comunitatea științifică, fiind aplicat în diverse domenii, cum ar fi rezonatoarele inelare integrate [57, 58]. Un model de astfel de rezonatoare inelare, în care configurația de bază implică cuplarea unidirecțională între un rezonator inel cu raza r și un ghid de undă, a fost propus de [59, 60] și este ilustrat în figura 1.5.

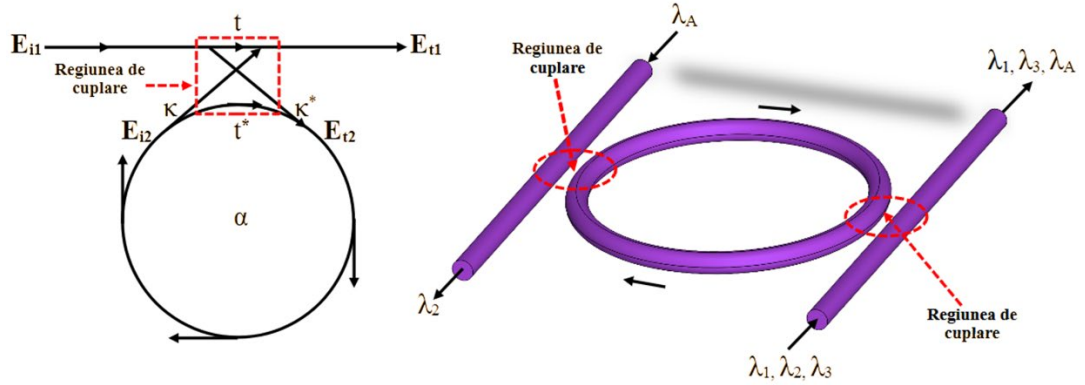


Fig. 1.5. a) Model de rezonator inelar cu un singur ghid de undă. b) Model de rezonator inelar cu două ghiduri de undă.

Dacă, cuplarea este limitată la undele ce călătoresc într-o direcție (reflecție nu exista), iar puterea totală ce intră este egală cu cea de ieșire, atunci cuplarea poate fi descrisă prin intermediul a două constante k și t , respectiv o matrice de împrăștiere unitară:

$$\begin{pmatrix} E_{t1} \\ E_{t2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t & k \\ t^* & k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{i1} \\ E_{i2} \end{pmatrix}, \quad (1.39)$$

unde, E_{i1}, E_{i2} sunt puterile la intrări în acest cuplaj ale undelor de călătorie, respectiv E_{t1}, E_{t2} puterile la ieșiri. Matricea de cuplare este unitară atunci satisface relația:

$$|k|^2 + |t|^2 = 1. \quad (1.40)$$

Forma specifică a lui k nu este atât de necesară, deoarece depinde de mecanismul special de cuplare utilizat. Relația (1.39) și relația pentru matricea de cuplare este unitară sunt completate de condiția de circulație în inel. Așadar, transmisia în jurul inelului este dată de următoarea relație:

$$E_{i2} = \alpha e^{i\theta} E_{t2}, \quad (1.41)$$

unde α este factorul de circulație interioară, fiind o mărime reală, iar pentru pierderi interne egale cu valoarea zero $\alpha = 1$. Din relațiile 1.39, 1.40, și 1.41 obținem:

$$E_{t1} = \frac{-\alpha + te^{-i\theta}}{-\alpha t^* + e^{-i\theta}}, \quad E_{t2} = \frac{-\alpha k^*}{-\alpha t^* + e^{-i\theta}}. \quad (1.42)$$

Semnalul care trece prin rezonator din ghidul de undă de intrare este egal cu:

$$|E_{t1}|^2 = \frac{\alpha^2 + |t|^2 - 2\alpha|t|\cos(\theta + \varphi_t)}{1 + \alpha^2|t|^2 - 2\alpha|t|\cos(\theta + \varphi_t)}, \quad (1.43)$$

unde, $t = |t|\exp(i\varphi_t)$, în timp ce puterea totală de circulație este:

$$|E_{i2}|^2 = \frac{\alpha^2(1 + |t|^2)}{1 - 2\alpha|t|\cos(\theta + \varphi_t) + \alpha^2|t|^2}. \quad (1.44)$$

Cele mai multe dintre caracteristicile interesante ale acestui rezonator apar aproape de rezonanță unde $(\theta + \varphi_t) = m2\pi$, iar m este un număr întreg. În astfel de situație la rezonanță ecuațiile (44, 45) pot fi scrise în felul următor:

$$|E_{t1}|^2 = \frac{(-\alpha^2 + |t|)^2}{(1 - \alpha|t|)^2}, \quad |E_{i2}|^2 = \frac{\alpha^2(1 - |t|)^2}{(1 - \alpha|t|)^2}. \quad (1.45)$$

Prima parte a ecuației (1.45) prezintă un interes deosebit, unde se arată că atunci când puterea transmisă dispăre (este zero) $|E_{t1}|^2 = 0$ la o valoare de cuplare $\alpha = |t|$, numită și „cuplare critică” care se datorează pierderilor interne (reprezentate prin α) fiind egale cu pierderile de cuplare reprezentate de $|t|$.

Condiția de cuplare critică reprezintă o proprietate esențială a ghidurilor de undă cuplate la rezonatoare. Aceasta se referă la situația în care pierderile interne ale rezonatorului și pierderile de cuplare ale ghidului de undă sunt egale într-un sistem rezonator-ghid de undă corespunzător [61]. În acest punct, transmisia rezultată la ieșirea ghidului de undă devine zero la frecvența de rezonanță.

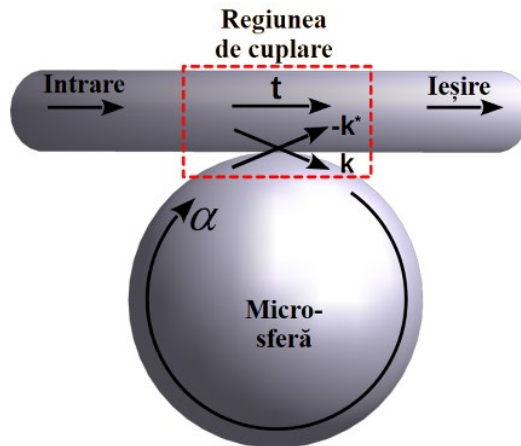


Fig. 1.6. Model de rezonator micro-sferă cu un ghid de undă potrivite ideal.

Referindu-ne la Fig. 1.6, pentru potrivirea modului ideal în acest cuplaj, sistemul ghid/micro-sferă poate fi descris printr-un singur parametru de cuplare (coeficientul de transmisie prin cuplaj) t și un factor de dus-întors a rezonatorului α , iar ca rezultat expresia pentru transmisia de putere T dincolo de rezonator are forma:

$$1 - T = \frac{C}{1 + f \sin^2\left(\pi \frac{\nu}{\Delta\nu_{FSR}}\right)},$$

$$f \equiv \frac{4\alpha t}{(1 - \alpha t)^2}, \quad (1.46)$$

$$C = 1 - \left(\frac{t - \alpha}{1 - \alpha t}\right)^2,$$

unde $\Delta\nu_{FSR}$ este intervalul spectral liber al rezonatorului, f este coeficientul de finețe și C este parametrul de cuplare al rezonatorului. În așa fel, controlul cuplării critice într-un rezonator cu micro-sferă de cuarț cu un factor de cuplare Q destul de mare ($\sim 10^7$) în modul undă de galerie cuplat la o conicitate a fibrei, a fost demonstrat.

1.6. Studiul eficienței ratei de inactivare a bacteriilor din soluția de drojdie

Având în vedere că numeroși agenți patogeni sunt mai sensibili la radiațiile UVC decât structurile celulare eucariote și ținând cont de riscurile asociate utilizării agenților infecțioși în experimentele noastre, am înlocuit fluidele contaminate cu o soluție de drojdie. ADN-ul drojdiei prezintă o rezistență superioară la radiațiile UVC comparativ cu cel al multor viruși sau bacterii.

Pentru studiul ratei de inactivare a agenților patogeni, au fost selectate colonii de drojdie cu un diametru de $10 - 30 \mu m$ specific pentru testele experimentale, datorită structurii lor celulare eucariote, care le conferă o rezistență superioară la radiațiile ultraviolete de tip C (UVC), în comparație cu coloniile celulare procariote patogene. Sporii de drojdie (pseudo hife sau hife false) [63] sunt organisme unicelulare dispuse în lanțuri de celule interconectate. Populațiile microbiene remanente reprezintă, în realitate, forma predominantă de existență microbiană în mediile naturale. Acestea conferă agenților patogeni o capacitate sporită de a se proteja împotriva stresului ambiental și de a supraviețui pe perioade îndelungate în condiții de foame și alte forme de stres.

1.7. Concluzii la capitolul 1.

Scopul principal al Capitolului I este de a oferi o prezentare generală cuprinzătoare a stadiului actual al cercetărilor și progreselor tehnologice în domeniul decontaminării patogenilor, cu accent pe utilizarea radiației UV-C, inclusiv metodele bazate pe pulsații scurte de lumină și integrarea metamaterialelor. Capitolul își propune să evidențieze contextul științific și tehnologic al acestor metode, punând baza pentru cercetarea propusă în teză.

Obiectivele Capitolului I sunt: Analiza literaturii de specialitate privind metodele fizice de inactivare a patogenilor, cu accent pe radiația UV-C continuă și pulsată; Evaluarea eficienței tehnologiilor existente de decontaminare bazate pe radiații electromagnetice, inclusiv avantajele și limitările acestora; Explorarea mecanismelor de bază ale interacțiunii radiației UV-C cu biomoleculele, în special procesul de dimerizare a ADN-ului/ARN-ului; Prezentarea principiilor de manipulare optică a particulelor, cum ar fi efectul de pensetă optică, și a aplicațiilor metamaterialelor în decontaminare; Identificarea lacunelor în cunoașterea actuală și justificarea necesității dezvoltării unor noi abordări pentru creșterea eficienței inactivării patogenilor.

Tehnologiile bazate pe pulsuri scurte de lumină și metamateriale revoluționează metodele de decontaminare prin soluții rapide, eficiente și ecologice. În viitor, integrarea acestor tehnologii ar putea elimina necesitatea utilizării substanțelor chimice periculoase, oferind un mediu mai sigur în domenii critice precum medicina, industria alimentară și protecția mediului.

Doza absorbită este esențială în decontaminare întrucât microorganismele au praguri minime de inactivare. Laserul și pulsurile scurte au avantaje pentru aplicații specifice. Durata pulsului joacă un rol esențial în eficiența procesului de decontaminare, influențând mecanismele prin care microorganismele sunt inactivate. De asemenea, în cazul expunerii la radiație ultravioletă (UV), unul dintre efectele cheie asupra ADN-ului este dimerizarea, un proces care împiedică replicarea microorganismelor.

Metamaterialele pot crește eficiența decontaminării, reducând consumul de energie și timpul de iradiere. Metamaterialele precum fibrele capilare și sferele optice din cuarț îmbunătățesc eficiența tehnicilor de captare optică, permițând o manipulare precisă a biomoleculelor pentru aplicații în diverse domenii ca biomedicina, nanotehnologii, altele.

2. METODICA EXPERIMENTULUI. ACȚIUNEA COERENTA ALE RADIAȚIILOR UV PULSATE CU BIOMOLECULELE.

2.1. Aspecte ale interacțiunii radiațiilor cu materia

Radiația reprezintă energia propagată sub formă de unde sau particule și poate fi clasificată în două categorii principale: radiații ionizante și radiații neionizante. Radiațiile ionizante au energii suficient de mari pentru a ioniza atomi sau molecule, detașând electroni din structura acestora, spre deosebire de radiațiile neionizante, care au energii mai scăzute. Ambele tipuri de radiații fac parte din spectrul electromagnetic, însă limita dintre ele nu este clar definită. Unele surse [64] consideră radiațiile X drept graniță între cele două categorii, conform Fig. 2.1.

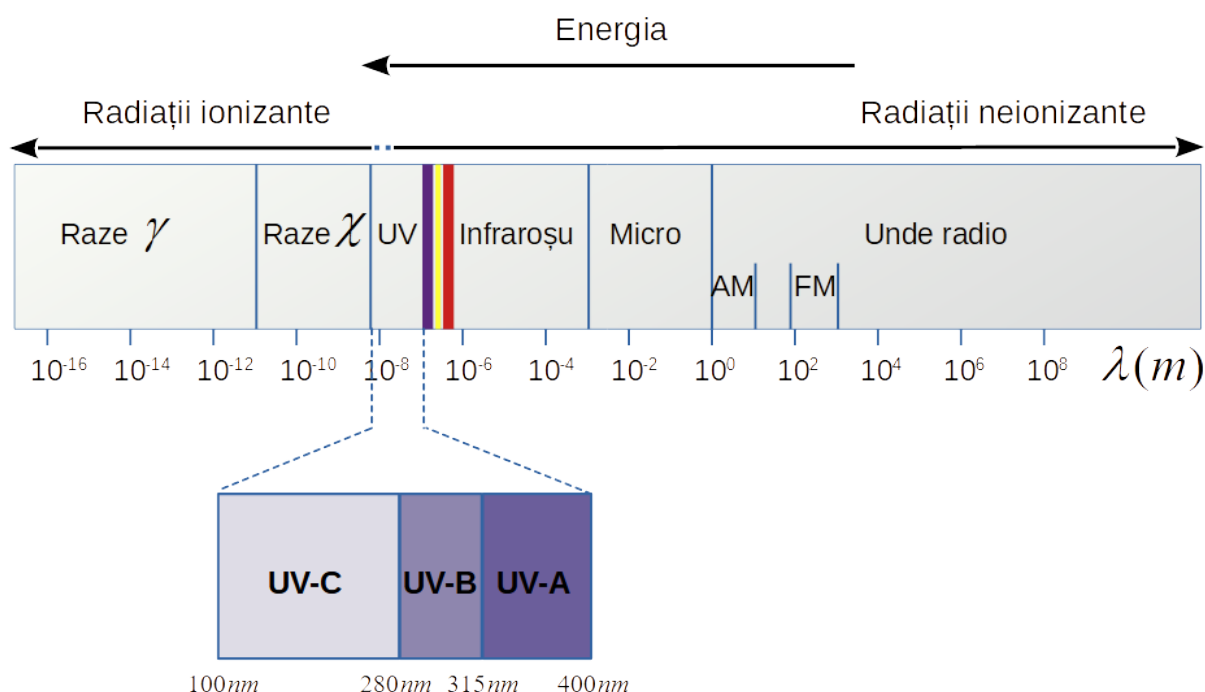


Fig.2.1 Spectrul electromagnetic. Hotarul dintre radiația ionizantă și cea neionizantă.

Odată ce aceste radiații au energii diferite, respectiv și interacțiunea lor cu materia este diferită. Dacă materia o privim ca pe o substanță care are masă și ocupă spațiu având volum și totodată ea este compusă din atomi unde totalitatea atomilor alcătuiesc moleculele, atunci interacțiunea radiațiilor cu materia este una foarte diversă. La energii mari ale radiației, adâncimea de penetrare în materie este mult mai mare în comparație cu radiațiile care au energiile mici. O atenție deosebită se va acorda în acest capitol interacțiunii radiațiilor ultraviolete cu biomoleculele.

Iradierea cu radiații ultraviolete (UV) este o metodă cunoscută și utilizată încă din 1877, când Downes și Blunt au observat că măbind timpul de expunere al eprubetelor care conțin soluție Pasteur la lumina solară, eprubetele au rămas libere de bacterii timp de câteva luni [65]. Fiind studiate și testate pe larg, radiațiile ultraviolete sunt în prezent utilizate pe scară largă pentru inactivarea agenților patogeni virali. Este cunoscut în mod convențional ca domeniul de radiație ultraviolet conține trei categorii de energie în creștere ale căror lungimi de unda sunt: UV-A (315-400 nm), UV-B (280-315 nm) și UV-C (100-280 nm) [66]. Odată ce radiațiile UV-A, respectiv UV-B sunt cunoscute de toți ca fiind dăunătoare în cazul expunerii de lungă durată pot provoca diferite complicații precum cancer de piele, arsuri sau leziuni la nivelul ochilor, atunci efectele radiațiilor UV-C sunt cunoscute mai mult în rândul oamenilor de știință. S-a raportat că radiația UV-C cu lungimea de unda de 222 nm exercită o capacitate de sterilizare comparabilă cu cea a UV-C de 254 nm, dar fără a produce dimeri de ciclobutan pirimidină în ADN [67], iar lămpile UV-C de 222 nm pot fi utilizate în siguranță pentru sterilizarea pielii umane fără dezvoltarea cancerului de piele.

Cercetările recente demonstrează că pulsurile de radiație scurte și ultracurte de ordinul nano ori picosecundelor ar opri fenomenul de provocare a leziunilor cancerigene datorită faptului că fotonii absorbiți sunt utilizați doar în fotoreacțiile dirijate de rupere a unor legături chimice bine cunoscute. Fenomenul de acumulare a energiei în țesutul organic dispare atunci când durată pusului este mai mică față de timpul de viață a excitărilor moleculare.

Astfel utilizarea pulsurilor UV-C în inactivarea și sterilizarea produselor alimentare ar avea un efect dublu. Acest efect păstrează calitatea produsului alimentar inactivând doar patogenii [68].

Se cunoaște că radiațiile ultraviolete pot fi utilizate în diferite domenii ca fiind un dezinfectant puternic împotriva agenților patogeni prezenți în diferite medii. Odată ce domeniul radiațiilor ultraviolete este destul de mare (200–400nm) diferă acțiunea lor asupra activității biologice și adâncimea de penetrare a țesutului patogenului. La lungimi de undă scurtă de exemplu radiația UV-C se consideră a fi cea mai periculoasă pentru microorganisme cu o adâncime de penetrare în aceasta situație este de aproximativ 60–80 μm [69]. S-a stabilit și o relație direct proporțională dintre lungimea de undă a radiației UV și adâncimea de penetrare a acesteia în țesutul organic. Această relație stabilește o creștere a adâncimii de penetrare în țesutul celular odată cu creșterea lungimii de undă și se observă o scădere a adâncimii de penetrare optică în sistemul vascular sangvin. Datele arată că radiațiile UV-A au o adâncime de penetrare a țesutului uman ce

poate ajunge de la 0,5 până la 1 mm, pe când lumina roșie poate penetra până la 8–10 mm, infraroșu apropiat - până la 2–3 cm. [70]

Autorii [71] consideră că adâncimea de penetrare a radiațiilor ultraviolete (UV) în pielea umană, dependentă de lungimea de undă, reprezintă un parametru esențial pentru evaluarea impactului fotobiologic al acestora. La lungimi de undă mai scurte, acizii nucleici absorb intens radiația UV. Radiațiile ultraviolete pot pătrunde cu ușurință prin membranele bacteriilor și ale altor agenți patogeni, afectând ADN-ul acestora și inhibându-le capacitatea de replicare.

Radiațiile UV-C sunt extrem de eficiente în inactivarea bacteriilor, virusurilor, sporilor de mucegai, drojdiilor și algelor, fiind ideale pentru sterilizarea aerului, lichidelor și suprafețelor din spațiile închise, fără a necesita contact direct. Unul dintre efectele radiațiilor UV-C este sterilizarea sau inactivarea biomoleculelor, prin inducerea unui efect fotochimic asupra timinei, cunoscut sub numele de dimerizare. Acest proces implică formarea unei legături necorespunzătoare între doi purtători de informație adiacenți, timină-timină (T=T).

Dimerii de timină se formează în urma unui impuls scurt de excitație UV, cu condiția ca bazele să fie corect orientate în momentul absorbției luminii. Astfel, se creează un complex legat covalent între două timine adiacente (T=T) pe aceeași catenă de ADN, conform Fig. 2.2.

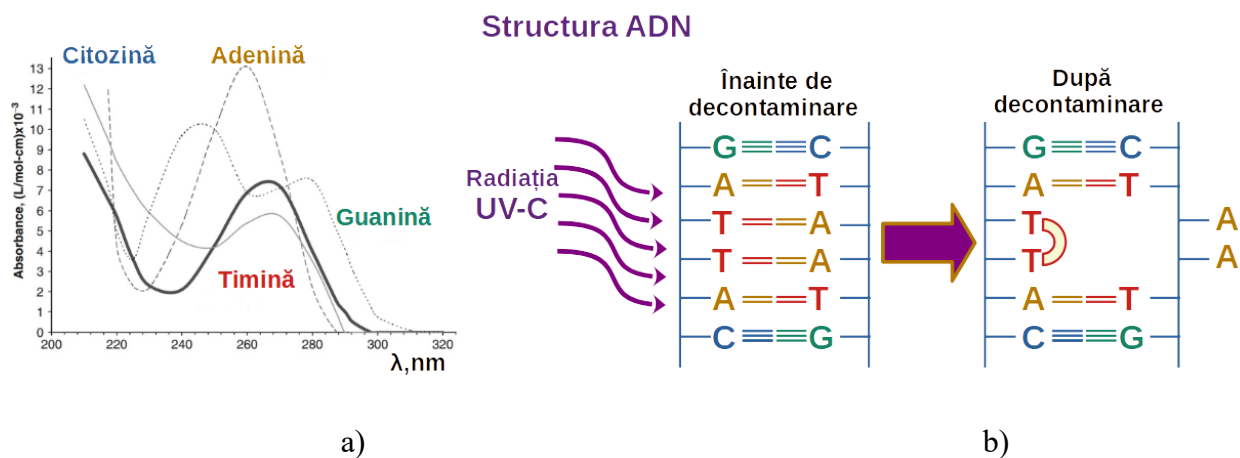


Figura 2.2 a) Structura ADN-ului, inclusiv spectre de absorbție UV în domeniul ultraviolet pentru fiecare element de bază; b) Formarea dimerului de timina.

Citozina formează trei legături de hidrogen cu guanina, în timp ce timina formează doar două legături de hidrogen cu adenina (vezi Fig. 2.2). Prin urmare, perechea timină-adenină reprezintă o verigă mai slabă în structura dublu-helicoidală a ADN-ului. În cazul expunerii virusurilor și

bacteriilor la radiații ultraviolete de tip C (UV-C), poate apărea formarea dimerilor de pirimidină în structura ADN-ului lor.

În mod specific, în lanțul ADN, perechile adiacente de baze T=A (timină-adenină) pot suferi o dimerizare prin absorbția radiației UV-C, ceea ce duce la formarea anormală de legături covalente între două molecule de timină (T=T). Această modificare structurală produce leziuni directe în ADN, compromițând procesele de replicare virală. Acest efect poate fi observat chiar și la doze foarte reduse de radiație, sub 4 mJ/cm² [72,73].

În urma acestei deteriorări, microorganismul devine inofensiv, deoarece ADN-ul afectat nu mai poate fi utilizat în procesele esențiale de transcripție (metabolism) și replicare (diviziune celulară). Odată înțelese efectele UV-C asupra materiei biologice, următorul pas este identificarea metodelor de generare artificială a acestor radiații, diferite de sursele naturale, în scopul explorării unor aplicații benefice pentru sănătatea umană.

2.2. Reprezentarea clasică a radiației sub forma de puls

În optică, un impuls ultracurt este un impuls electromagnetic, a cărui durată este de ordinul unei picosecunde (10^{-12} secunde) sau mai puțin. Este bine cunoscut faptul că laserele constituie dispozitivele optice fundamentale utilizate în generarea impulsurilor ultracurte de lumină [82]. Totuși, în funcție de modul de funcționare, unele lasere emit lumină continuă, în timp ce altele funcționează în regim pulsant. Laserele pulsate sunt caracterizate prin emisia de rafale de lumină la intervale regulate, având o putere medie mai redusă, dar o putere de vârf semnificativ mai mare în timpul fiecărui impuls. Această caracteristică permite impulsurilor scurte să depășească pragul de rupere al legăturilor chimice din materiale, fără a produce efecte termice extinse sau ardere — un aspect esențial pentru experimentul nostru. În general, cu cât durata impulsului este mai scurtă, cu atât puterea instantanee (peak power) pe care o poate atinge laserul este mai mare, datorită disipării minime de căldură în materialul țintă. Astfel, laserele pulsate sunt superioare celor cu emisie continuă (CW – *Continuous Wave*) în aplicațiile care necesită precizie extremă și interacțiune minim invazivă cu materialele. Pentru claritate, voi introduce câteva noțiuni legate de emisia/pulsația laser, ilustrate mai jos:

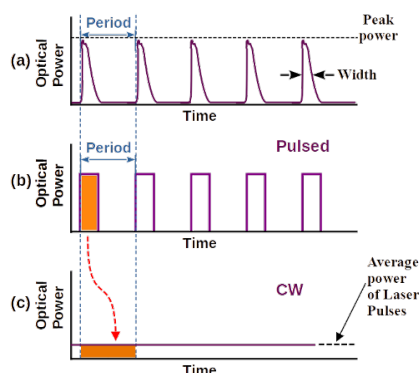


Figura 2.3 Emisia laser modelată. Lasere pulsate (a, b) și laser continuu CW (c).

Energia pulsului este o măsură a emisiei pe o perioadă, în care fiecare perioadă conține un singur impuls și toată energia emisă în timpul unei perioade întregi este furnizată de impulsul prezentat ca regiunile umbrite în Fig. 2.3, atât laserul pulsat, cât și versiunea CW oferă aceeași energie în timpul unei perioade de impuls. Prin urmare, în cazul laserului pulsat se știe că:

$$\text{Energia impulsului (jouli)} = \text{Puterea medie (wați)} * \text{Durata impulsului (secunde)}, \quad (2.1)$$

unde, puterea medie este o expresie a emisiei de putere medie în timp, exprimată în wați. Energia impulsului este energia totală a unui impuls sau, alternativ, puterea medie, nu puterea de vârf. Puterea de vârf – cea mai mare putere de ieșire de la laser (puterea în timpul unui impuls), sau împărțirea energiei pe impuls la lățimea impulsului (în timp) și vom obține puterea de vârf. Acum, este important să înțelegem care este efectul modificării lățimii sau perioadei pulsului? Pentru aceasta se va analiza figura următoare:

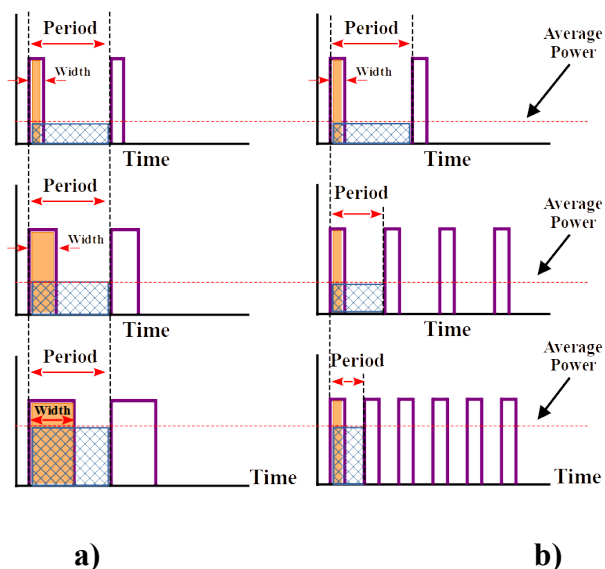


Figura 2.4. Puterea medie emisă de laser, controlată de lățimea și perioada impulsului. Perioada constantă reprezentată în (a) și lățimea constantă a impulsului în (b).

Atât energia pulsului (zona umbrită) cât și energia medie (linia roșie punctată) depind de lățimea impulsului, observată în Fig. 2.4(a). Prin urmare, variind pentru a crește (sau a micșora) lățimea impulsului, valorile pentru energia impulsului și puterea medie vor fi mărite sau, respectiv, scăzute. Energia pulsului (zona umbrită) nu depinde de perioadă, dar energia medie (linia roșie punctată) vezi Fig. 2.4(b). Odată ce perioada este redusă, puterea medie crește sau perioada poate fi mărită pentru a reduce puterea medie. Pulsurile care sunt livrate mai mult (sau mai puțin) frecvent, determină modificarea puterii medii. Schimbarea doar a perioadei nu modifică energia pulsului, deoarece lățimea impulsului și puterea de vârf nu se modifică. Puterea de vârf a pulsului poate fi ridicată atunci când energia pulsului este scăzută, iar puterile de vârf ridicate pot aduce modificări în structura ADN-ului agenților patogeni [87], astfel încât în experimentele care vor fi descrise mai târziu, se va folosi laserul Nd: YAG pulsat cu lungimi de undă 254 nm cu energie de la 20 la 850 mJ și puls cu 5 ns.

Reprezentarea clasică a radiației sub forma de puls electromagnetic se bazează pe descrierea câmpurilor electrice și magnetice care se propagă în spațiu, conform ecuațiilor lui Maxwell. Un puls electromagnetic este o perturbație localizată în timp și spațiu, care poate fi descrisă matematic prin funcții specifice:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

unde: $\mathbf{E}$ - câmpul electric, $\mathbf{B}$ - câmpul magnetic, ρ - densitatea de sarcină, $\mathbf{J}$ - densitatea de curent, ϵ_0 - permitivitatea electrică a vidului și μ_0 este permeabilitatea magnetică a vidului. Pentru un puls în vid ($\rho = 0$, $\mathbf{J} = 0$), ecuațiile (2.1) devin:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad \nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2}, \quad (2.2)$$

unde $c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$ este viteza luminii.

Forma unui puls electromagnetic poate fi descris printr-o funcție care depinde de poziție și timp, de exemplu, un puls gaussian care se propagă în direcția Z :

$$E(z, t) = E_0 e^{-\left(\frac{z-ct}{\sigma}\right)^2} \cos(k(z-ct)), \quad (2.3)$$

unde: E_0 - amplitudinea câmpului electric, σ - lăţimea pulsului, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ este numărul de undă, λ - lungimea de undă, iar $(z - ct)$ este termenul care descrie propagarea pulsului cu viteza c . Câmpul magnetic $\mathbf{B}$ este legat de $\mathbf{E}$ prin relaţia: $B = \frac{1}{c} \hat{k} \times E$, unde $\hat{k}$ este vectorul unitar în direcţia de propagare.

Energia pulsului sau densitatea de energie a câmpului electromagnetic este dată de relaţia:

$$u = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2 \mu_0} B^2. \quad (2.4)$$

Pentru o undă plană în vid, $E = cB$, astfel încât: $u = \epsilon_0 E^2$. Energia totală a pulsului se obţine integrând densitatea de energie peste volumul pulsului: $U = \int u dV$.

Impulsul electromagnetic este dat de vectorul Poynting integrat peste timp şi suprafaţă:

$$p = \frac{1}{c^2} \int S dV, \text{ unde } S = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \text{ este vectorul Poynting.}$$

2.3. Mecanism de interacţiune a radiaţiilor pulsate cu biomoleculele

În această subsecţiune, se va descrie mecanismul fizic de decontaminare a sistemului de viruşi iradiaţi de radiaţiile UV. Acest mecanism poate fi asociat cu majoritatea tipurilor de patogeni existenţi. Prin urmare reprezentarea schematică a unui virus ataşat la o celulă este reprezentată în Fig. 2.5 (a). Ca structură, virusul este o particulă submicroscopică, alcătuită dintr-o parte centrală numită genom viral, format din material genetic, care poate fi ADN sau ARN, şi o teacă sau înveliș protector de natură proteică, numită capsidă. La rândul lor Capsida şi genomul viral alcătuiesc nucleocapsida.

Autorii [74] consideră corpul uman precum un organism complex care are nevoie de energie pentru a menţine funcţionarea corectă. Adenozin trifosfat (ATP) este sursa de energie pentru utilizare şi stocare la nivel celular. Structura ATP este o nucleozidă trifosfat, constând dintr-o bază azotată (adenină), un zahăr riboză şi trei grupe fosfat legate în serie. ATP este denumit în mod obişnuit „moneda energetică” a celulei, deoarece furnizează energie uşor eliberată în legătura dintre a doua şi a treia grupare fosfat. Acest lucru nu se întâmplă şi în cazul viruşilor, deoarece ei nu pot genera sau stoca energie sub formă de ATP, dar trebuie să-şi obţină energia şi toate celelalte

funcții metabolice din celula gazdă, Fig. 2.5 (a). Altfel spus, fără o celulă gazdă, virușii nu își pot îndeplini funcțiile de menținere a vieții sau nu se mai pot reproduce.

Au fost elaborate multe metode de inactivare a virusurilor precum metode chimice, temperaturile mai mari de 70 grade Celsius, radiațiile electromagnetice ionizante în doze de 2,7 – 3,0 kGy (kiloGray, $Gy = J / kg$), tratamentele de înaltă presiune (300-400 MPa) cuplate cu tratamente termice (de ex 522 °C pentru 5 minute) [75] dar tratamentul UV este considerat a fi unul dintre cele mai eficiente. Iradierea UV funcționează prin radierea virușilor cu lumină ultravioletă (vezi Fig. 2.5 b.), care este tot aceeași lumină ce determină la oameni să dezvolte arsuri solare pe suprafața corpului.

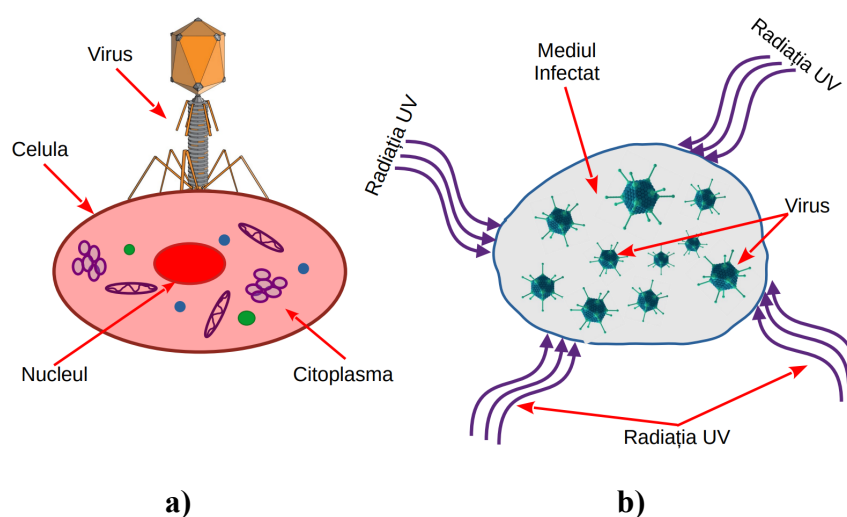


Fig. 2.5. Reprezentare schematică a (a) virusului atașat la o celulă și (b) decontaminarea unui mediu biologic infectat cu laser UV

Tehnica iradierii UV-C pulsate cu ajutorul laserului, inactivează virusurile prin distrugerea ADN-ului, cu formarea de legături dimer T=T. O altă abordare în acest sens este aceea că, după iradiere, virusul începe să oscileze, într-un fel sau altul tinde să se comporte ca fononii din rețeaua solidă, iar din punct de vedere al mecanicii cuantice Hamiltonianul liber al sistemului molecular poate fi reprezentat conform aproximației Born–Oppenheimer (B-O) $\hat{H}_e \hat{H}_n$, unde $\hat{H}_e$ este energia electronilor de legătura în interacțiune cu câmpul laser la excitare, iar $\hat{H}_n$ este energia subsistemului de nuclee a biomoleculei, care poate fi reprezentă printr-un set de oscilatori neliniari cu coordonata generalizată $X_i = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$. Vom simplifica prolema cercetând doar comportamentul unui nucleu sau set de nuclee din regiunea r a moleculei.

$$\hat{H}_n = \frac{M}{2} \left\{ \frac{d^2 X}{dt^2} + \Omega^2 X^2 - 2\chi X^4 / M \right\}. \quad (2.5)$$

Aici, considerăm un singur mod de vibrație al virusului, unde M este masa efectivă a moleculei virale (segment de proteina ADN), Ω este frecvența de vibrație a nucleelor moleculare ale patogenului, χ caracterizează parametrul anarmonic al modului de vibrație. Primul termen din Hamiltonianul (2.5) reprezintă stările posibile de energie cinetică ale particulei, în timp ce al doilea și al treilea termen reprezintă stările posibile de energie potențială corespunzătoare. Pentru a înțelege mai bine acest mod de vibrație considerăm situația coardei în care se introduce noțiunea de densitate de masa $\rho = \sum_i M_i / v$, unde M_i este masa unei subdiviziuni a moleculei în vibrație (de ex. Carbon, Oxigen, azot etc...), iar v este volumul acestei subdiviziuni moleculare. Deci prin M în expresia (2.5) se are în vedere $\rho \times v$ ca și în cazul corzii.

Deoarece subsistemul electronic este rapid în comparație cu subsistemul de nucleee al biomoleculelor, $\tau_e / \tau_n \sim m / M < 1$, este necesar să soluționăm problema cuantică de excitare a subsistemului electronic, considerând ca subsistemul atomic de nucleee este lent și poate fi considerat fixat. Energia acestei interacțiuni cu subsistemul electronic poate fi reprezentată ca suma dipolilor electronici în interacțiune cu câmpul laser $\hat{H}_I = -P^*(r, X)E(r)$, unde $P^*(r, X)$ și $E(r)$ este polarizarea și câmpul în regiunea biomoleculei patogenului. Deoarece procesul este de tip Raman putem elimina nivelele virtuale ale subsistemului electronic așa cum este expus în [98]. Totuși fenomenologic am putea să descompunem polarizarea după câmp așa cum este prezentat în [76]:

$$P^*(r, X_s) = P_0 + \alpha_j(X_s)E_j^*(r) + \alpha_{j,l}(X_s)E_j^*(r)E_l^*(r) + \dots + \quad (2.6)$$

În rezonanța de tip Raman doar al doilea termen dă aport în excitările vibraționale neliniare ale nucleelor moleculei. Trecând la timpuri mai mari polarizarea electronica poate fi descompusa în serie după coordonatele X a subsistemului de nucleee al biomoleculei. Modul de vibrație al unei biomolecule patogene (virus, bacterie, fung, etc...) excitat de laserul UV poate fi scris explicit reprezentând în seria Taylor descris de expresia de mai jos

$$\alpha_j(X) \approx \alpha_j(0) + X \partial \alpha_j(0) / \partial X \quad (2.7)$$

unde setul de coordonate X reprezintă gradele de libertate ale nucleelor în vibrație neliniară [77].

Considerând ca în acord cu legea a doua a lui Newton produsul dintre masa și accelerație trebuie să fie egală cu forța, $M\ddot{X} = -\frac{\partial}{\partial X}\{H_n + H_i\} - \gamma\dot{X}$, astfel se obține următoarea ecuație:

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + (\Omega^2 - 4\chi X^2)X = F_{ext} / M = [\partial\alpha_j(0) / \partial X]E_j^*(t)E(t) / M, \quad (2.8)$$

unde γ este parametrul de amortizare, $\gamma \times v$ forța de amortizare a vibrațiilor și $\Omega = \sqrt{k/M}$ reprezintă constanta anarmonică a oscilatorului. Partea dreaptă a expresiei (2.8) corespunde forței motrice impulsive produsă de laserul de excitație asupra subsistemului nuclear lent al biomoleculei și poate fi calculată ca derivata după coordonatele generalizate ale subsistemului nuclear $F(t) = -\partial\hat{H}_I / \partial X$. Derivând după X expresia pentru α_j obținem pentru forță expresia de mai jos

$$F_{ext} = [\partial\alpha_j(0) / \partial X]E_j^*(t)E(t), \quad (2.9)$$

unde expresia, $E_j^*(t)E(t)$ reprezintă produsul vectorului electric la frecvența de pompaj și Stokes astfel ca acest produs poate fi reprezentat prin diferența de frecvențe la exponenta $E_j^*(t)E(t) \sim \exp[(\omega_p - \omega_s)] + H.c.$ Aici trebuie de considerat că diferența dintre frecvența de pompaj și frecvența Stokes trebuie să fie aproximativ egală cu frecvența proprie a oscilatorului molecular format din nucleee, $\Omega_0 \approx \omega_p - \omega_s$

Polarizabilitatea are o parte statică care induce o împrăștiere Rayleigh elastică și este modulată de deplasarea oscilantă X . Pentru o amortizare mică, deplasarea este $X(t) = X_0 e^{-i\gamma t} \sin\Omega t$. Amplitudinea deplasării X_0 față de poziția de echilibru a virusului este dată de:

$$X_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{n\tau}{ck\omega} a_0' E_0 e^{-(\Omega_0\tau/2)^2}. \quad (2.10)$$

Aici E_0 și τ sunt intensitatea de vârf și, respectiv, lățimea impulsului laserului, conectate prin relație :

$$E_L(t) = E_0 \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right], \quad (2.11)$$

α_0 este derivata de polarizabilitate proporțională cu amplitudinea împrăștierii Raman, n este indicele de refracție, c viteza luminii și k permitivitatea mediului dielectric.

Sa introducem valoarea forței externe $F_{ext} / M = \frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M} \exp[i(\omega_p - \omega_s)t]$ unde $\Omega_0 = \omega_p - \omega_s$, iar $\Delta = \Omega - \Omega_0 \rightarrow 0$ se numește abaterea de la rezonanța $F_{ext} / M = \alpha' E_p^*(0) E_s(0) \exp[i\Omega_0 t]$, $\alpha' = [\partial \alpha_j(0) / \partial X]$. În acord cu acest concept ecuația (2,8) devine următoare:

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + [\Omega^2 - 4\chi X^2]X = \frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M} \exp[i\Omega_0 t]. \quad (2.12)$$

Cu ajutorul softului Wolfram Mathematica am construit graficul funcției $\left[\left\{ x''[t] + (W - 4 * k * x[t]^2) * x[t] = 0, x[0] = 1, x'[0] = 0 \right\}, x, \{t, 0, 30\} \right]$, pentru a înțelege dacă există și care ar fi valoarea punctului critic unde biomolecula nu mai oscilează.

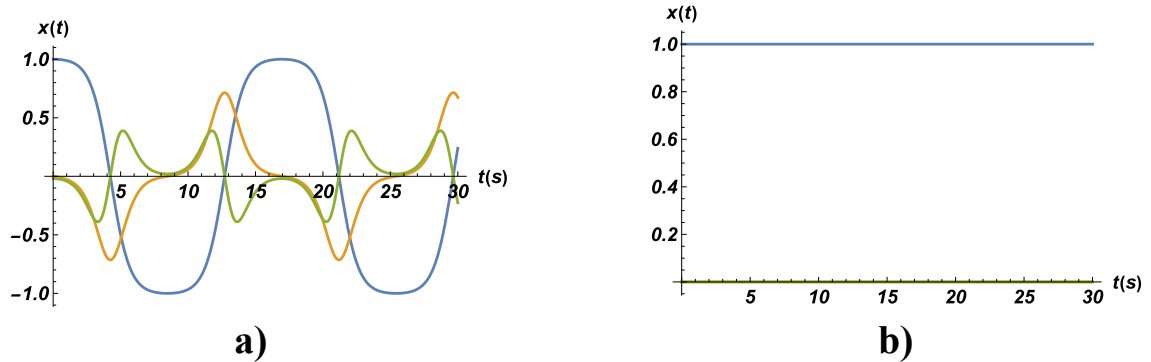


Fig. 2.6. Dependența vibrației biomoleculei de timp. a) Pană la punctul critic $\chi = 0,25$ exista vibrația moleculei b) $\chi > 0.25$ molecula e rupta, nu mai oscilează

În primul ordin al teoriei perturbațiilor neglijăm neliniaritatea față de componenta liniară $\Omega^2 \gg 4\chi(X^2)$,

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + [\Omega^2]X = \frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M} \exp[i\Omega_0 t] \quad (2.13)$$

Soluția acestei ecuații este soluția ecuației omogene $\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + \Omega^2 X = 0$ plus o soluție a ecuației neomogene $X = \exp[\lambda t]$

Găsim soluții ale ecuației omogene sub forma: $\lambda^2 + \gamma\lambda + \Omega^2 = 0$

$$\lambda = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{-1} \sqrt{-\frac{\gamma^2}{4} + \Omega^2} = -\frac{\gamma}{2} \pm i\Omega \sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{4\Omega^2}},$$

$$X = C \{ \exp[\{-\frac{\gamma}{2} + i\Omega\}t] + \exp[\{-\frac{\gamma}{2} - i\Omega\}t] \} = 2C \exp[\{-\frac{\gamma}{2}t\}] \left\{ \frac{\exp[i\Omega t] + \exp[-i\Omega t]}{2} \right\} = 2C \exp[\{-\frac{\gamma}{2}t\}] \cos(\Omega t),$$

$$\exp[i\Omega t] = \cos(\Omega t) + i \sin(\Omega t),$$

$$\exp[-i\Omega t] = \cos(\Omega t) - i \sin(\Omega t),$$

Soluția ecuației omogene atenuază și nu are sens să o calculezi, $X(t) = X_0 \exp[i\Omega_0 t]$.

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + [\Omega^2] X = A(0) \exp[i\Omega_0 t].$$

Dacă lumina este continuă atunci:

$$\frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M} \exp[i\Omega_0 t] = A(0) \exp[i\Omega_0 t], \text{ rezultă că } A(0) = \frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M}.$$

Dar dacă lumina e pulsată atunci $\frac{\alpha' E_p^*(t) E_s(t)}{M} \exp[i\Omega_0 t] = A(t) \exp[i\Omega_0 t]$. Derivata lui A(t)

este cu mult mai mică decât $\Omega_0 |A(t)|$, și în astfel de situație $|\Delta A(t) / \Delta t| \ll \Omega_0 |A(t)|$. Din ecuația diferențială rezultă următoarea expresie pentru amplitudinea pulsului laser la ieșire.

$$(i\Omega_0)^2 X_0 \exp[i\Omega_0 t] + \gamma i\Omega_0 X_0 \exp[i\Omega_0 t] + \Omega^2 X_0 \exp[i\Omega_0 t] = A(0) \exp[i\Omega_0 t], \quad (2.14)$$

$$X_0 \{ \Omega^2 - \Omega_0^2 + i\gamma\Omega_0 \} = A(0),$$

$$X_0 = \frac{A(0)}{\Omega^2 - \Omega_0^2 + i\gamma\Omega_0}. \quad (2.15)$$

Această soluție trebuie de introdus în ecuația neliniară pentru oscilator (2.8) la renormarea frecvenței: $\Omega^2 - 4\chi X^2$ se substituie cu $\Omega^2 - 4\chi X_0^2$, astfel că frecvența noului oscilator devine nenormată $\tilde{\Omega}^2 = \Omega^2 - 4\chi X_0^2$. Procedura de calcul se începe din nou în ecuația (2.14). Desigur că vom primi un $\bar{X}$ care se exprima prin frecvența oscilatorului nenormată, similara cu soluția (2.15). După ce am găsit noua soluție ne întoarcem din nou la oscilator și în loc de X_0^2 introducem $\bar{X}_0^2$. Ceea ce observăm ca amplitudinea să înceapă să crească atunci când există o abatere de la rezonanță

$\Delta^2 = \tilde{\Omega}^2 - \Omega_0^2$ este pozitiv, atunci renormarea duce la atingerea valorii parametrului $\Delta^2 = \Omega^2 - \Omega_0^2 - 4\chi X_0^2$ tinde la zero și excitarea moleculelor are loc în avalanșă. Acest lucru duce la o dimerizare efectivă.

Sa cercetăm cazul 2 când durată pulsului este mult mai mică decât frecvența.

$$X_0 \exp[i\Omega_0 t] C; \quad |\Delta A(t) / \Delta t| \gg \Omega_0 |A(t)|$$

$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + \Omega^2 X = A(t)$ unde, $A(t) = \frac{\alpha' E_p^*(m) E_s(m)}{M} \exp[-(t-t_0)^2 / 2\tau_p^2]$, τ_p este durată pulsului sau lățimea lui în timp $\tau_p \ll \Omega_0^{-1}$.

Este cunoscut din literatura că la emisia LASER lumina nu este total monocromatică. Datorită faptului că moleculele excitate se mișcă termic, o parte din ele intră în rezonanță cu linia de generare, iar altă parte părăsesc această frecvență de generare. Deoarece rezonatorul plan are frecvențe multiple $2\pi C / \lambda$ rezonatorului în linia de rezonanță a moleculelor la emisia UV-C nimeresc o mulțime de aceste frecvențe așa cum este arătat în fig. 2.7 (b).

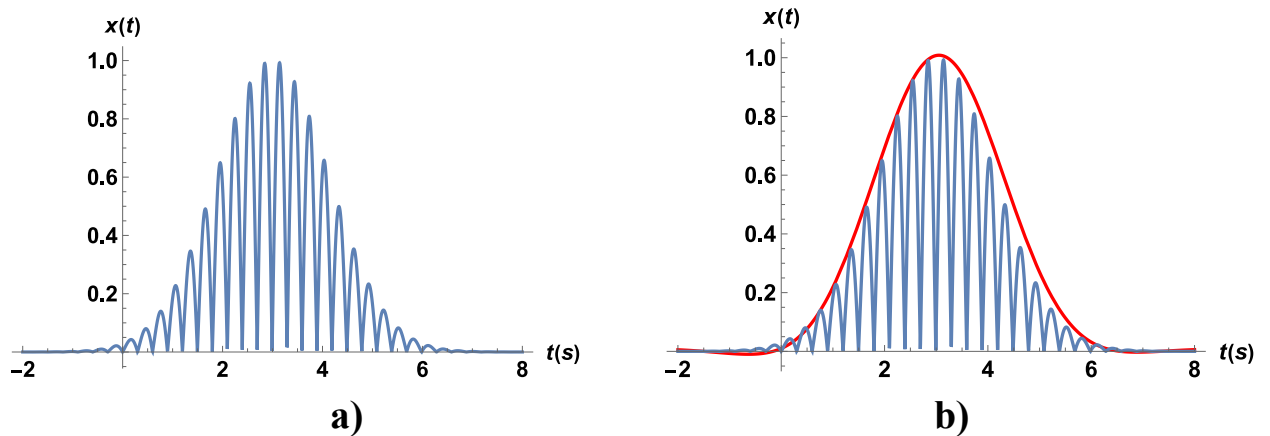


Fig. 2.7. a) Reprezentare grafică a frecvenței de oscilație a moleculelor b)

Înfășurătoarea sau forma pulsului în raport cu frecvența de oscilație a moleculelor dată de expresia $\exp[-(t-t_0)^2 / \tau^2] \sin(\omega t)$ cu valori $\tau = 1.6$; $t_0 = 3$; $\omega = 20$

Distanța dintre aceste frecvențe proprii ale rezonatorului este egală cu $2\pi C / \lambda$, deci această frecvență poate fi de ordinul terahertzilor, frecvența des întâlnită în vibrațiile bimoleculare. La înmulțirea intensității câmpului electric al aceluiași puls $E \times E$ la sigur vor fi combinații de astfel de frecvențe la diferențe. Aceste diferențe la exponenta pot provoca vibrații de ordinul terahertzilor. Anume în partea dreaptă a ecuației oscilatorului se întâlnesc astfel de frecvențe și nicidecum

frecvența laser în UV-C. Aici se cere o rezonanță între diferența de frecvențe pentru E și E^* , și frecvența vibrațiilor moleculare descrise mai sus. Acest lucru l-am studiat în primul caz și am demonstrat efectul de trecere la rezonanță la excitarea neliniară a biomoleculelor. Totuși în anumite circumstanțe acest efect greu de rezonanță poate fi omis. De exemplu atunci când durata pulsului este mai scurtă decât perioada de vibrație, în joc intră intensitatea pulsului și nicidecum frecvența lui. În acest caz putem soluționa problema cu ajutorul funcțiilor lui Green și de asemenea putem scoate dependența de frecvențe în fața integralei în soluția:

$$Z(t) = C_0 \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^\infty dt' A(t') \theta(t-t') \exp[(i\Omega - \gamma/2)(t-t')]. \text{ Cazul } \tau_p \ll \Omega_0^{-1} \text{ va fi}$$

cercetat în paragraful următor.

Dacă e să considerăm ca virusul se găsește în interiorul unei gropi de potențial, în stare de echilibru. În absența radiațiilor UV sistemul viral este încă activ, atunci caracteristic virusului în această situație este că va emite o frecvență maximă ω fără să oscileze (Fig. 2.8 (a)). Pe de altă parte, aplicându-i un puls scurt de radiații, situația se modifică drastic în ceea ce privește dinamica virusului, deoarece odată cu creșterea amplitudinii modului de oscilație al virusului, frecvența emisă a oscilatorului local (virusului) scade. Figura 2.6 (b) reprezintă prima acțiune a impulsului UV asupra sistemului viral.

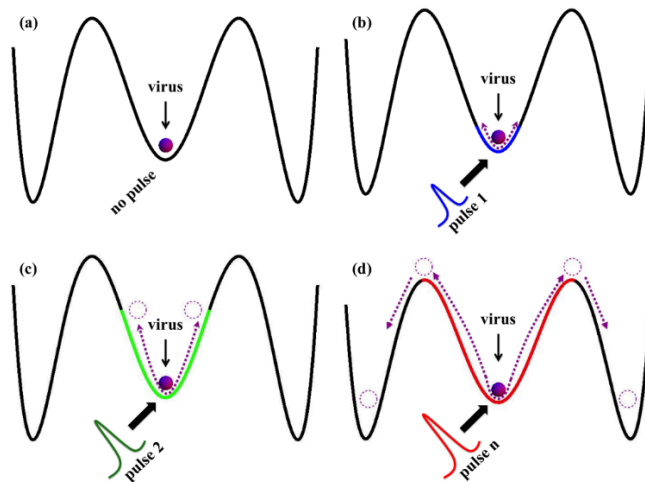


Figura 2.8. Reprezentarea schematică a inactivării virusului sub acțiunea radiației UV a impulsului de lumină pentru (a) nicio iradiere a virusului, (b) virusul este iradiat cu primul puls, (c) virusul este iradiat cu al doilea impuls și (d) n- radiații impulsuri.

Pot fi observate mici vibrații ale virusului în jurul poziției de echilibru (săgeata din Fig. 2.8 (b)). După iradierea cu primul impuls UV, virusul începe să emită o frecvență descrisă de formula :

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 - 4\chi X_0^2} \quad (2.16)$$

Având în vedere că al doilea impuls interacționează cu modul de vibrație al oscilatorului neliniar (mod virus) la interval de timp, $t < \gamma$ soluția particulară a expresiei (2.16) poate fi aproximată cu o nouă expresie:

$$\tilde{X}_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{n\tau}{ck\omega} \alpha'_0 E_0 e^{-(\tilde{\omega}\tau/2)^2}. \quad (2.17)$$

Este absolut evident că în astfel de caz frecvența oscilatorului scade, iar o nouă amplitudine $\tilde{X}_0$ se manifestă în creștere. Această situație corespunde cazului (c) din Fig. 2.8, în care regiunea de vibrație a virusului este marcată cu o săgeată. În situația respectivă, virusul emite cu o frecvență mai mică decât în cazul precedent. În așa mod putem continua excitarea oscilatorului neliniar cu alte impulsuri în același interval de timp până când scăderea frecvenței emise de virus este compensată de creșterea amplitudinii oscilației virusului. După n impulsuri, frecvența emisă este zero: $\sqrt{\omega^2 - 4\chi\tilde{X}_0^2} = 0$ și frecvența neliniară $\omega^2 - 4\chi X^2 \sim 0$ este o funcție neperiodică (indicată prin săgeată în Fig. 2.8 (d)). Această situație corespunde inactivării unui oscilator neliniar (virus sau bacterie) unde mai departe oscilatorul sare la următoarea sondă. Tranziția sistemului în alte stări metastabile poate fi controlată cu cei mai mari termeni de oscilație neliniară, cum ar fi $U(X) = \frac{m\omega^2 X^2}{2} - kX^4 + \eta X^6$, având în vedere că $U(X)$ este un potențial simetric, adică $U(X) \sim U(-X)$.

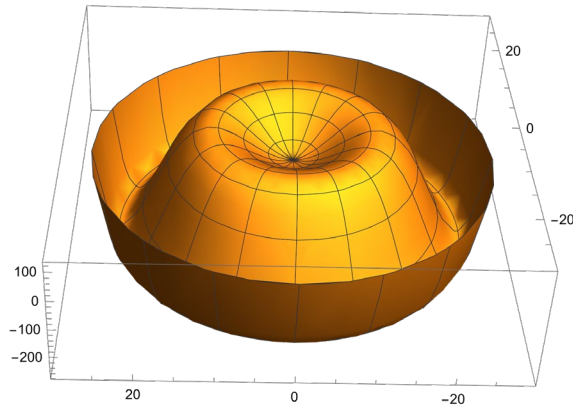


Fig. 2.9. Potențialul neliniar cu două minime

Potențialul neliniar din Fig. 2.9, determină tranziția sistemului molecular între două minime energetice distincte. De exemplu, sistemul poate trece dintr-un minim central într-un minim lateral

și invers. Dacă minimum central este situat la un nivel energetic superior celui lateral, atunci fotoreacția chimică se desfășoară cu degajare de căldură (proces exotermic). În schimb, dacă minimum central este energetic inferior minimumului lateral, fotoreacția necesită absorbția fononilor sau vibronilor din câmpul termic, indicând un proces endotermic.

2.4. Algoritmul de Soluționare a ecuației neliniare de vibrație a subsistemelor moleculare prin metoda iterației.

Ecuația caracteristică oscilatorului neliniar este următoarea:

$$\frac{\partial X}{\partial t} + i\Omega X = F(t), \quad (2.18)$$

unde $F(t)$ este forța generalizatoare externă $F(t) = E_p^*(t)E_s(t)\exp[i\Omega_0 t]$, iar $E_p^*(t)E_s(t)$ sunt amplitudini ale câmpului de pompaj și Stokes pentru puls. În cazul staționar $E_p^*(0)E_s(0) = \text{const}$. În cazul pulsului noi avem $F(t) = \exp[-(t-t_0)^2/\tau^2]\sin(\Omega t)$.

$$\frac{\partial X}{\partial t} + i\Omega X = 0 \quad (2.19)$$

$$\frac{dX}{X} = -i\Omega dt, \quad \int \frac{dX}{X} = -i\Omega \int dt + \log C,$$

unde $X(t) = C \exp[-i\Omega t]$, iar variind constanta $X(t) = C(t) \exp[-i\Omega t]$, este soluția ecuației.

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{d}{dt} C(t) \exp[-i\Omega t] = \exp[-i\Omega t] \frac{dC(t)}{dt} + C(t) \frac{d}{dt} \exp[-i\Omega t] = \exp[-i\Omega t] \frac{dC(t)}{dt} - i\Omega C(t) \exp[-i\Omega t].$$

Introducem termenii în ecuația (2.18), și se obține:

$$\exp[-i\Omega t] \frac{dC(t)}{dt} - i\Omega C(t) \exp[-i\Omega t] + i\Omega C(t) \exp[-i\Omega t] = F(t); \quad (2.20)$$

$$\exp[-i\Omega t] \frac{dC(t)}{dt} = F(t), \text{ iar } \frac{dC(t)}{dt} = \exp[+i\Omega t] F(t), \text{ respectiv } C(t) = \int_0^t dt' \exp[+i\Omega t'] F(t'),$$

Ne ducem la soluție și scriem:

$$X(t) = C(t) \exp[-i\Omega t] = \int_0^t dt' \exp[-i\Omega t] \exp[+i\Omega t'] F(t') = \int_0^t dt' \exp[-i\Omega(t-t')] F(t'), \text{ sau}$$

$$\int_0^{\infty} dt' \mathcal{G}(t-t') \exp[-i\Omega(t-t')] F(t') = \int_0^{\infty} dt' G(t-t') F(t'),$$

$$\mathcal{G}(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{daca } t \geq t' \\ 0 & \text{daca } t < t' \end{cases},$$

$G(t-t') = \mathcal{G}(t-t') \exp[-i\Omega(t-t')]$ se mai numește funcția Green, iar soluția va fi:

$$Z(t) = C_0 \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^{\infty} dt' A(t') G(t-t'). \quad (2.21)$$

Sa cercetam cazul bătailor . Ecuația $\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + \Omega^2 X = A(t)$, poate fi scrisă în felul următor:

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + (i\Omega + \gamma/2) \frac{\partial X}{\partial t} + (-i\Omega + \gamma/2) \frac{\partial X}{\partial t} + \Omega^2 X = A(t),$$

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{dX}{dt} + (i\Omega + \gamma/2) X \right\} - (i\Omega - \gamma/2) \left\{ \frac{dX}{dt} + \frac{\Omega^2}{(-i\Omega + \gamma/2)} X \right\} = A(t),$$

$$\frac{\Omega^2}{(-i\Omega + \gamma/2)} = \frac{\Omega^2 [i\Omega + \gamma/2]}{(i\Omega + \gamma/2)(-i\Omega + \gamma/2)} = \frac{\Omega^2 [i\Omega + \gamma/2]}{\Omega^2 + (\gamma/2)^2} \simeq \frac{\Omega^2 [i\Omega + \gamma/2]}{\Omega^2} = [i\Omega + \gamma/2].$$

Scriem încă odată ecuația

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{dX}{dt} + (i\Omega + \gamma/2) X \right\} - (i\Omega - \gamma/2) \left\{ \frac{dX}{dt} + [i\Omega + \gamma/2] X \right\} = A(t),$$

$$Z(t) = \frac{dX}{dt} + [i\Omega + \gamma/2] X,$$

$$\frac{d}{dt} Z(t) - (i\Omega - \gamma/2) Z(t) = A(t),$$

$$\frac{d}{dt} Z(t) - (i\Omega - \gamma/2) Z(t) = 0 \text{ este soluția particulară, unde soluția ei este:}$$

$$Z(t) = C(0) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t].$$

Folosim metoda variației constantei pentru ecuația neomogenă

$$\frac{d}{dt} Z(t) - (i\Omega - \gamma/2) Z(t) = A(t); \quad \text{Considerând constantă dependența de timp}$$

$$Z(t) = C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t],$$

$$\frac{d}{dt}[C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t]] - (i\Omega - \gamma/2)C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] = A(t),$$

$$\exp[(i\Omega - \gamma/2)t] \frac{d}{dt} C(t) + C(t) \frac{d}{dt} \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] - (i\Omega - \gamma/2)C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] = A(t),$$

$$\exp[(i\Omega - \gamma/2)t] \frac{d}{dt} C(t) + (i\Omega - \gamma/2)C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] - (i\Omega - \gamma/2)C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] = A(t),$$

$$\exp[(i\Omega - \gamma/2)t] \frac{d}{dt} C(t) = A(t),$$

$$\frac{d}{dt} C(t) = A(t) \exp[(-i\Omega + \gamma/2)t],$$

$$C(t) = C_0 + \int_0^t dt' A(t') \exp[(-i\Omega + \gamma/2)t'],$$

Soluția generală a expresiei de mai sus este $Z(t) = C(t) \exp[(i\Omega - \gamma/2)t]$, sau

$$Z(t) = \{C_0 + \int_0^t dt' A(t') \exp[(-i\Omega + \gamma/2)t']\} \exp[(i\Omega - \gamma/2)t],$$

$$Z(t) = C_0 \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^t dt' A(t') \exp[(-i\Omega + \gamma/2)t' + (i\Omega - \gamma/2)t],$$

$$\text{Dacă } \theta(t - t') = 0, t' > t,$$

$$\text{și } \theta(t - t') = 1, t' < t, \text{ atunci:}$$

$$Z(t) = C_0 \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^t dt' A(t') \theta(t - t') \exp[(i\Omega - \gamma/2)(t - t')] + \int_t^\infty dt' A(t') \theta(t - t') \exp[(i\Omega - \gamma/2)(t - t')],$$

$$Z(t) = C_0 \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^\infty dt' A(t') \theta(t - t') \exp[(i\Omega - \gamma/2)(t - t')],$$

$G(t - t') = \theta(t - t') \exp[(i\Omega - \gamma/2)(t - t')]$, după cum am menționat mai sus se numește funcția

Green, iar soluția este:

$$Z(t) = C_0 \exp[(i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^\infty dt' A(t') G(t - t'),$$

$$Z^*(t) = C_0^* \exp[(-i\Omega - \gamma/2)t] + \int_0^\infty dt' A(t') G^*(t - t'),$$

$$Z(t) = \frac{dX}{dt} + [i\Omega + \gamma/2]X,$$

$$Z^*(t) = \frac{dX}{dt} + [-i\Omega + \gamma/2]X,$$

$$Z(t) - Z^*(t) = 2i\Omega X.$$

$$\begin{aligned} A(t) &= E_p^*(t)E_s(t)\exp[i\Omega_0 t] = E_p^*(0)E_s(0)[\tau\sqrt{2\pi}] \lim_{\tau \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\tau\sqrt{2\pi}} \exp[-(t-t_0)^2 / 2\tau_p^2] \right\} \exp[i\Omega_0 t] = \\ &= E_p^*(0)E_s(0)[\tau\sqrt{2\pi}]\delta(t-t_0)\exp[i\Omega_0 t_0], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_p(t) &= \frac{2}{\Omega} \int_0^\infty dt' A(t') \theta(t-t') \exp[(-\gamma/2)(t-t')] \sin \Omega(t-t') = \\ &= E_p^*(0)E_s(0) \frac{2[\tau\sqrt{2\pi}]}{\Omega} \exp[i\Omega_0 t_0] \int_0^\infty dt' \delta(t'-t_0) \theta(t-t') \exp[(-\gamma/2)(t-t')] \sin \Omega(t-t') = \\ &= \alpha' E_p^*(0)E_s(0) \frac{2[\tau\sqrt{2\pi}]}{M\Omega} \exp[i\Omega_0 t_0] \exp[(-\gamma/2)(t-t_0)] \sin \Omega(t-t_0). \end{aligned}$$

Dezvoltând conceptul de decontaminare propus în articolul [62] credem că neliniaritatea introdusă în ecuația $\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + [\Omega^2 - 4\chi X^2]X = F/M = [\partial\alpha_j(0)/\partial X]E_j^*(t)E(t)/M$; a fost rezolvată prin metoda integrațiilor. Mai întâi am presupus că neliniaritatea este foarte mică $[\Omega^2 > 4\chi X^2]$. După ce am soluționat ecuația și am obținut $X_p(t)$ introducem aceasta soluție în valoarea frecvenței de vibrație $[\Omega^2 - 4\chi \langle X_p^2 \rangle]$ unde $\langle X_p^2 \rangle$ este media după timp de la expresia X_p^2 . De exemplu media lui $\sin^2 \Omega(t-t_0)$ este egală cu $1/2$. Deoarece următorul puls de lumina trebuie să vină peste un timp Δt mai scurt ca timpul de atenuare a vibrațiilor moleculare $2/\gamma$. Atunci obținem o renormare a frecvenței oscilatorului care conform expresiei de mai sus devine mai mică decât $\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + \langle \Omega^2 \rangle X = F/M = [\partial\alpha_j(0)/\partial X]E_j^*(t)E(t)/M$; Începem procedura de soluționare a ecuației primite cu noua frecvență renormată. Obținem din nou soluția pentru $X_p(t)$ în care Ω este substituit cu rădăcina din media pătratică $\sqrt{\langle \Omega^2 \rangle}$. După aceasta din nou ne adresăm la ecuația (1) și în loc de $[\langle \Omega^2 \rangle - 4\chi X^2]$. Din nou este aproximat cu $[\langle \Omega^2 \rangle - 4\chi \langle \bar{X}_p^2 \rangle]$, unde media pătratică conține soluția nouă cu frecvența renormată:

$$\tilde{X}_p(t) = \alpha' E_p^*(0) E_s(0) \alpha' E_p^*(0) E_s(0) \frac{2[\tau\sqrt{2\pi}]}{M\sqrt{\langle\Omega^2\rangle}} \exp[i\Omega_0 t_0] \exp[(-\gamma/2)(t-t_0)] \sin\sqrt{\langle\Omega^2\rangle}(t-t_0).$$

Observăm că parametrul $\tau / \sqrt{\langle\Omega^2\rangle}$ crește odată cu scăderea frecvenței renormate, ceea ce înseamnă că eficiența pulsului al doilea a crescut lovind în oscilatorul anarmonic. După a doua renormare frecvența de vibrație a moleculei și mai mult scade $\langle\Omega^2\rangle_2 = \langle\Omega^2\rangle - 4\chi\langle\bar{X}_p^2\rangle = \Omega^2 - 4\chi\langle X_p^2\rangle - 4\chi\langle\bar{X}_p^2\rangle < \Omega^2$. Procedura continuă cu următoarele pulsuri până când frecvența nenormată $\langle\Omega^2\rangle_n = \Omega^2 - 4\chi\langle X_p^2\rangle_1 - 4\chi\langle\bar{X}_p^2\rangle_2 - \dots - 4\chi\langle\bar{X}_p^2\rangle_n = 0$, ceea ce corespunde distrugerii totale a oscilatorului conform Fig. 2.8 ce exprimă în maximum potențialului de vibrație cu ajutorul a A_n consecutive.

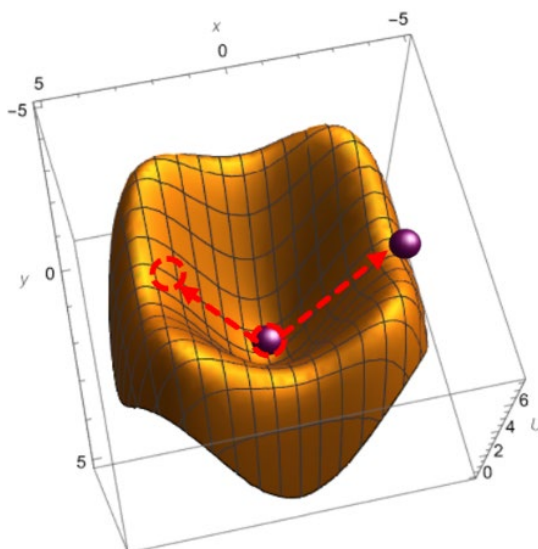


Figura 2.10. Oscilator neliniar cu perete finit a gropii de potențial

Spre deosebire de un oscilator liniar cu potențial parabolic, potențialul neliniar permite ca, pentru o anumită amplitudine, particula sau molecula să părăsească regimul de oscilație stabilă. În limbaj molecular, acest fenomen corespunde ruperii legăturilor chimice dintre subsistemele bimoleculare. De exemplu, în structura ADN-ului, sub acțiunea luminii, legăturile hidrogenice dintre timină și adenină pot fi rupte atunci când intensitatea radiației depășește un prag critic, determinând astfel modificări structurale cu impact asupra stabilității și funcționalității biomoleculei.

2.5. Model neliniar de interacțiune a moleculelor cu radiații pulsate

Spectroscopia Raman neliniară coerentă, descrisă inițial de N. Bloembergen [78] și ulterior extinsă în 1963 de autorii Ref. [79], a deschis noi direcții de cercetare, generând progrese semnificative în următoarele decenii. Eficiența procesului coerent de generare anti-Stokes depinde de capacitatea materialului/ eșantionului (atomi, molecule și bio-molecule) de a răspunde la trei frecvențe optice prin producerea unei mișcări electronice oscilatorii la o a patra frecvență anti-Stokes, pompă, Stokes și oscilatoare locale de vibrație. Susceptibilitatea de ordinul trei este compusă din părți care depind de prezența unui mod vibrațional, și părți care sunt de natură pur electronică, cunoscute sub denumirea de contribuții rezonante și, respectiv, nerezonante. În 1974, Begley et al. [80] au rezumat cele mai importante avantaje ale spectroscopiei vibraționale bazate pe mecanismul de generare anti-Stokes coerent neliniar, care este cu cinci ordine de mărime mai puternic față de semnalele spontane care sunt peste împrăștierea Raman. În mai multe circumstanțe, această tehnică neliniară evită interferența cu un fond de fluorescență excitat cu un foton care afectează adesea măsurătorile convenționale Raman.

Tot autorii Ref. [81] au raportat metoda (CARS), din engleza "coherent anti-Stokes Raman spectroscopy", drept un instrument atractiv pentru spectroscopie vibrațională rapidă. Pentru aplicarea laserelor Ultrashort Pulsed (USP) în Coherent Raman Scattering (CRS) sau CARS în procedura de decontaminare a virusilor și a bacteriilor în multe cazuri este necesară cunoașterea și utilizarea modelelor propuse, nu numai în dimensiunile relative ale virusilor și bacteriilor, dar și simetria lor [82]. Pentru a distruge structurile periculoase ale virusului care înmulțesc CRS și CARS în multe cazuri, este necesar să se cunoască nu numai dimensiunile virusului, ci și simetria, topologia și elementele de structură ale virusilor și bacteriilor. Majoritatea virusurilor depind de existența capsidelor de forma sferice: învelișuri protectoare de diferite dimensiuni compuse din subunități proteice Fig.2.11.

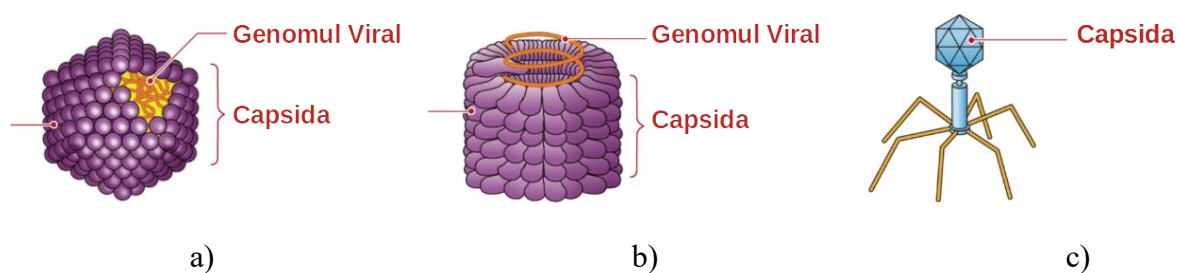


Figura 2.11 Geometrii diferite a capsidei virusilor. a) Formă sferică-triunghiulară; b) Formă de solenoid; c) Bacteriofag cu forma capsidei sferică-triunghiulară

Până în prezent designul (forma) capsidei a rămas evaziv, iar presiunile evolutive generale care îl modelează pot ajuta la împiedicarea rațională a ciclului de viață al virusului și la proiectarea de nano-ansambluri eficiente. Autorii Ref [83] bazându-se pe ideea că cele mai simple modele de capsidă sunt cele mai bune, ceea ce s-a dovedit a fi adevărat pentru toate capsidăle virale disponibile. Teoriile au ca rezultat un tabel periodic semnificativ din punct de vedere fizic al capsidelor virale, care descoperă presiuni evolutive puternice și globale, oferind, de asemenea, explicații geometrice altor proprietăți ale capsidei (rigiditate, aspecte pleiomorfe, cerințe auxiliare etc.) care au fost considerate anterior a fi proprietăți neînrudite ale virusului individual. În opinia noastră, topologia intrinsecă a capsidelor poate fi de folos la stabilirea cit mai exactă a modurilor de vibrație și de simetrie ale acestei structuri virale. Pentru a estima posibilă excitație anarmonică a componentelor virusului prin neîncrederea selectivă a acestora în timpul excitației Raman coerente, energia de vibrație locală a modurilor poate fi cuplată printr-un termen anarmonic neliniar. De exemplu, două moduri de vibrație Q și Θ pot fi reprezentate ca funcție simetrică în raport cu valoarea pătrată a acestor coordonate normale. Ca vibrație locală, energia modurilor poate fi cuplată printr-un termen anarmonic neliniar.

$$H_0 = \frac{M_q}{2} \left(\frac{dQ}{dt} \right)^2 + \frac{M_\Theta}{2} \left(\frac{d\Theta}{dt} \right)^2 + \frac{M_q \Omega_q^2 Q^2}{2} + \frac{M_\Theta \Omega_\Theta^2 \Theta^2}{2} - k_q Q^4 - k_\Theta \Theta^4 - k_{\Theta,q} \Theta^2 Q^2. \quad (2.22)$$

Unde M_i , Ω_i and k_i sunt masa efectivă, frecvența și parametrul anarmonic pentru modul de vibrație $i (i \equiv q, \Theta)$, respectiv $k_{q,\Theta}$ reprezintă cuplarea neliniară a modurilor normale de oscilații ale moleculei. Termenii anarmonici introduși în Hamiltonianul ecuației (2.22) descriu posibilă distrugere a sistemului pentru o excitație mai mare a sistemului provocată de impulsuri laser scurte [84] unde durata pulsului $\tau_L < 1/\Omega_i$. În astfel de situație modurile Q și Θ devin aperiodice conform teoriei catastrofei [85], iar sistemul de ecuații pentru două moduri ia forma:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} Q(t) + \{\Omega_q^2 - 4\chi_q Q^2 - 2\chi_{q\Theta} \Theta^2\} Q + 2\Gamma_q \frac{d}{dt} Q(t) &= F_q(t), \\ \frac{d^2}{dt^2} \Theta(t) + \{\Omega_\Theta^2 - 4\chi_\Theta \Theta^2(t) - 2\chi_{\Theta,q} Q^2\} \Theta(t) + 2\Gamma_\Theta \frac{d}{dt} \Theta(t) &= F_\Theta(t). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Aici am introdus constanta de atenuare Γ_i , a fiecărui mod de cuplare prin interacțiune neliniară, $\chi_{ij} = k_{ij} / M_i$. Termenul anarmonic al fiecăruia dintre moduri este descris prin constanta neliniară $\chi_i = k_i / M_i$. Potențialul anarmonic este descris de potențialul de localizare tridimensional din Fig. 2.12a.

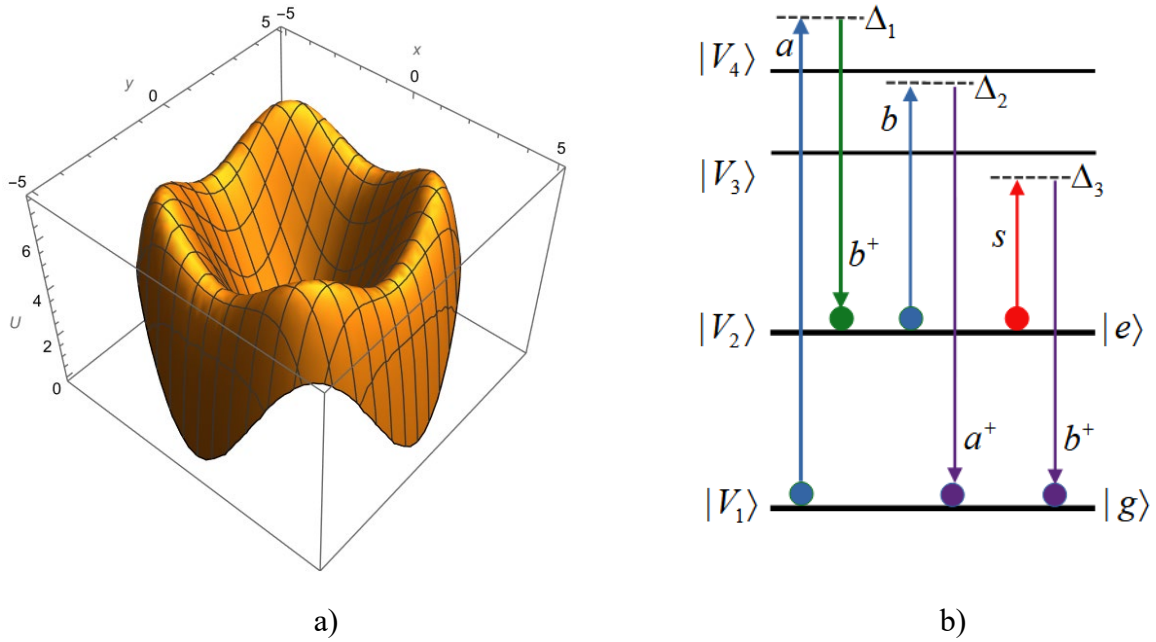


Fig. 2.12 a) Dependența energiei potențiale a oscilatorului neliniar de cele două moduri normalizate $x = \sqrt{M / 2\Omega}Q$ și $y = \sqrt{M / 2\Omega}\Theta$. b) Schema energetică pentru un astfel de potențial neliniar cu posibil Raman excitație.

Impulsurile scurte laser externe, interacționează cu dipolul molecular al componentelor virusului, astfel încât în reprezentarea simplă, aceasta capătă forma $H_I = -(P(E), E(t, z))$. Așadar, câmpul laser induce polarizarea biomoleculei, ale cărei componente în reprezentarea similară are caracter de tensor, care depinde de simetria moleculelor excitate (de componentele virusului sau bacteriilor) $P_j(E) = a_{jl}E_l$, iar datorită caracterului tensor al celor două moduri de oscilații propuse, descompunem $a_{jl}(Q, \Theta)$, în serie Taylor relativ la componentele normale Q și Θ

$$a_{jl} \approx a_{jl}^0 + \frac{\partial a_{jl}}{\partial Q}Q + \frac{\partial a_{jl}}{\partial \Theta}\Theta + \varepsilon(Q^2; \Theta^2; Q\Theta).$$

Odată ce introducem expresia pentru a_{jl} în relația Hamiltoniană, observăm că interacțiunea cu modurile locale de vibrație poate fi descrisă de următoarea funcție $U_I = a'_{jlk}E_jE_lQ_k$, unde $Q_1 = Q$; si $Q_2 = \Theta$ iar $a'_{jlk} = \frac{\partial a_{jl}}{\partial Q_k}$ trebuie să fie maxim

simetric în funcție de simetria biomoleculelor virusului sau bacteriilor. Având în vedere că pulsul laser are aceeași polarizare, îl putem reprezenta prin funcția Gauss dependentă de timp $E_i = E_0 \exp[-(t / \sqrt{2}\tau_L)^2] \cos(\omega t)$. Acum rămâne să rezolvăm ecuațiile liniare de necuplare (2.23) ca în referința [86]. Pentru aceasta înlocuim părțile drepte în sistemul de ecuație cu forțele motrice generalizate $F_j = -\partial U_I / \partial Q_j$ și reprezentăm soluția în aproximația liniară $Q_j = Q_{0j} \exp[-\Gamma_j t] \sin(\Omega_j t)$, unde amplitudinea are următoarea dependență de intensitatea, E_0^2 , durata pulsului, τ_L și frecvența locală de oscilație a modului normal j , Ω_j se va obține

$$Q_{0j} = \frac{\sqrt{\pi} \tau_L E_0^2 a_j'}{2\Omega_j} \exp[-(\Omega_j \tau_L)^2 / 4].$$

Observând aceeași dependență exponențială de $\Omega_j \tau_L$ ca în Ref. [86], punem problema excitării sistemului de oscilatoare de cuplare (2) astfel încât “frecvența neliniară” $\sqrt{\Omega_q^2 - 4\chi_q \langle Q^2 \rangle - 2\chi_{q\Theta} \langle \Theta^2 \rangle}$ să obțină valoarea zero, ceea ce corespunde distrugerii modului de vibrație local după numărul finit de impulsuri laser scurte. Dacă e să considerăm setul de impulsuri consecutive “n” care sunt generate în intervalul de timp $T < \Gamma_j^{-1}$, astfel încât energia cumulată de oscilatorul local după impulsurile predecesoare să poată fi utilizată în următoarele excitații de impuls. De exemplu, după primul impuls, amplitudinile modelelor Q și Θ sunt descrise prin expresia de mai sus. Introducerea acestei expresii în sistemul de ecuații (2) obținem următoarele valori medii ale lui Q^2 și $\Theta^2 < Q_j^2 > = \frac{\pi \tau_L^2 E_0^4 a_j'^2}{22^2 \Omega_j^2} \exp[-(\Omega_j \tau_L)^2 / 2]$.

În așa fel, obținem noi moduri de oscilator neliniar de frecvențe ale sistemului de ecuații (2.23) descrise prin ecuații diferențiale liniare cu frecvențe renormalizate prin primul impuls

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} Q(t) + \{\Omega_q^2 - 4\chi_q \langle Q^2 \rangle - 2\chi_{q\Theta} \langle \Theta^2 \rangle\} Q + 2\Gamma_q \frac{d}{dt} Q(t) &= F_q(t), \\ \frac{d^2}{dt^2} \Theta(t) + \{\Omega_\Theta^2 - 4\chi_\Theta \langle \Theta^2 \rangle - 2\chi_{\Theta,q} \langle Q^2 \rangle\} \Theta + 2\Gamma_\Theta \frac{d}{dt} \Theta(t) &= F_\Theta(t). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Soluțiile acestor ecuații, similare cu expresia (2) unde în loc de Q_{0j} , este folosită de noua expresie:

$$Q(t_2) = Q_{01} \exp[-\Gamma_q t_2] \sin(\tilde{\Omega}_q t_2) + Q_{02} \exp[-\Gamma_q t_2] \sin(\tilde{\Omega}_q t_2). \quad (2.25)$$

Partea a doua a relației (2.25) conține soluția particulară a excitației oscilatorului după al doilea impuls unde : $Q_{02} = \frac{\sqrt{\pi}\tau_L E_0^2 a'_q}{2 \sim \dot{U}_q} \exp[-(\sim \tilde{\Omega}_q \tau_L)^2 / 4]$, iar $\tilde{\Omega}_q = \sqrt{\Omega_q^2 - 4\chi_q \langle Q^2 \rangle - 2\chi_{q\Theta} \langle \Theta^2 \rangle}$.

Procedură data de excitare a oscilatorului neliniar poate continua atât timp până când una dintre amplitudinile oscilațiilor atinge linia de separare maximă a funcției potențiale neliniare $U_0(Q, \Theta)$ reprezentată în fig.2.12(a). Aceasta interpretare corespunde situației în care frecvența modului vibrațional a atins valoarea zero după n impulsuri scurte și în acest caz rezultă că:

$$\Omega_q^2 - 4\chi_q \langle Q_n^2 \rangle - 2\chi_{q\Theta} \langle \Theta_n^2 \rangle = 0,$$

sau

$$\Omega_\Theta^2 - 4\chi_q \langle \Theta_n^2 \rangle - 2\chi_{q\Theta} \langle Q_n^2 \rangle = 0. \quad (2.26)$$

Într-adevăr, acest efect poate fi observat într-un singur impuls de excitare descris de sistemul neliniar al ecuației (2.23).

Metoda de excitare descrisa mai sus depinde de condiția atribuită duratei pulsului aplicat în raport cu frecvența de vibrație a biomoleculelor $Q\tau_L < 1$. Deoarece oscilatorul molecular local este descris prin ecuații neliniare, frecvența locală depinde de energia excitată a unei astfel de biomolecule. Pentru a evita această dificultate, este mai bine să luăm în considerare un puls laser mare $\Omega\tau_L^{-1} > \Omega\tau_L > 1$, astfel încât în momentul excitării cu ajutorul radiației pulsate să putem provoca excitații selective biomoleculelor.

2.6. Procedeu diagnostic de determinare a ratei de decontaminare a biomoleculelor din soluția de drojdie sub acțiunea radiației UVC pulsate ca funcție de a timp.

Iradieră cu radiații ultraviolete de tip C (UV-C) este o tehnică care poate distruge capacitatea microorganismelor de a se reproduce. Aceste metode sunt posibile cu ajutorul laserelor. Radiația laser pulsată are un efect devastator în comparație cu cea continuă, deoarece are o energie de vârf mult mai mare pe segmente înguste de timp, și poate provoca excitații ale materiei în proporții mult mai mari. De aceea în aceasta lucrare mă voi axa pe radiația laser pulsată ca fiind foarte eficientă în decontaminarea agenților patogeni.

Pulsurile optice permit investigarea materiei în corelație cu timpul [87], ridicând numeroase întrebări fundamentale. De exemplu: *ce efecte are o propagare scurtă a unui impuls optic asupra biomoleculelor? Cum interacționează un număr finit de impulsuri cu patogenii într-un interval de timp definit? Care este doza minimă necesară de radiație pulsată pentru inactivarea totală a patogenilor?*

Pentru a răspunde acestor întrebări, este esențial să evaluăm în ce măsură metodele experimentale disponibile pot furniza informațiile necesare. Totuși, experimentele care implică patogeni periculoși necesită condiții speciale de siguranță pentru a preveni răspândirea acestora în afara mediului controlat al laboratorului.

Din acest motiv, se preferă utilizarea unor organisme-model, cum ar fi bacteriile și fungii non-patogeni, care nu prezintă riscuri pentru cercetători și pentru mediul înconjurător, chiar și în cazul unui contact direct. În cadrul acestui studiu, bacteriile din soluția de drojdie a fost considerată cea mai potrivită, datorită proprietăților sale experimentale convenabile. În plus, rezistența ciupercilor de drojdie la radiația UV-C este comparabilă cu cea a speciilor de *Candida sp.* și, în unele cazuri, similară cu rezistența unor bacterii procariote [88]. Acest aspect face ca drojdia să fie un model biologic adecvat pentru investigarea eficienței decontaminării prin radiație pulsată UV-C.

În acest caz, se va încerca de a opera cu durata impulsurilor laser la diferite frecvențe în ideea de a observa unele efecte fizice asupra fungilor din soluția de drojdie. Pentru a vedea aceste schimbări ale materiei în urma acționării cu radiații UV-C, tehnici precum microscopia optică, spectroscopia optică sunt binevenite pentru a fi folosite. Iar pentru a fi siguri de modificările apărute fungilor în urma efectelor fizice aplicate, vom supune soluția de drojdie la creșterea și multiplicarea în plăci Petri. Aceasta tehnica de creștere și multiplicare în plăci Petri oferă informații valoroase asupra dinamicii populației și creșterii fungice în timp. Datele obținute experimental, clar v-or demonstra eficiența utilizării radiațiilor UV-C în scopul inactivării patogenilor, în cazul nostru a fungilor de drojdie.

2.6.1. Analiza oscilografică a radiațiilor pulsate scurte

În această secțiune se va studia eficiența radiației UV-C emise de către laser în regim de puls, cu scopul inactivării bacteriilor din soluția de drojdie. Ideea principală este concentrată în estimarea formei și lățimii impulsului transmis până și după iradiere din proba. Pentru a aborda matematic și a analiza eficiența radiației UV-C emise de un laser în regim de puls, cu scopul

inactivării bacteriilor din soluția de drojdie, și pentru a estima forma și lățimea impulsului transmis înainte și după iradiere, putem dezvolta un model matematic care să descrie procesul.

Un impuls laser UV-C cu durata de 5 ns (nanoseconde) poate fi aproximat matematic ca o funcție Gaussiană sau o funcție de tip sech^2 (hiperbolic secant pătrat), datorită formei tipice a impulsurilor laser scurte. Configurația schematică a experimentului pentru realizarea acestei idei este prezentată în Fig. 2.13.

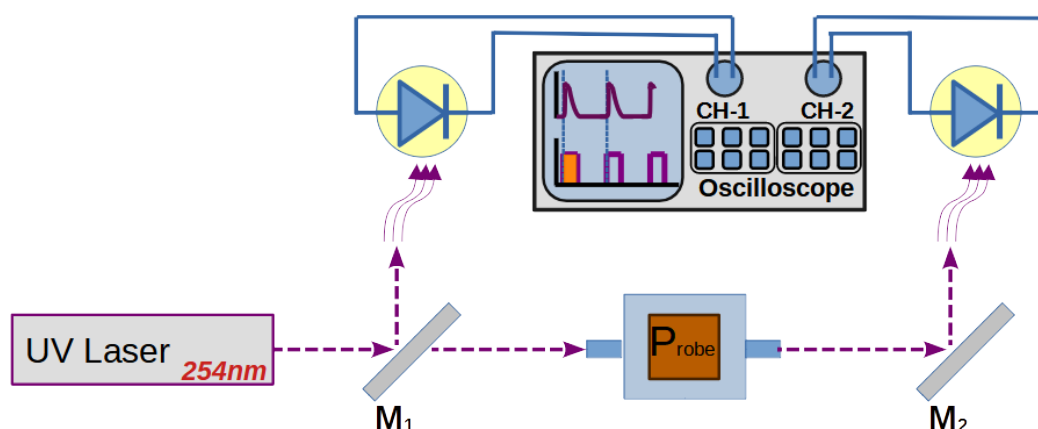


Fig. 2.13. Schema instalației de detectare a formei impulsului

Aici, se va folosi un laser UV-C care funcționează în regim de puls cu durata unui puls de 5ns și cu lungimea de undă de 254 nm. Energii joase de aproximativ 4 mJ se vor utiliza pentru a nu provoca deteriorarea fotodetectorului. Pentru detectarea și înregistrarea formei inițiale ale pulsului, impulsul emis este separat de divizorul de fascicul M1, unde o bună parte a energiei impulsului de aproximativ 96% este transmisă probei și doar o mică parte a pulsului de aproximativ 4% este reflectată către fotodetector. Impulsul care iese din proba este reflectat mai departe spre fotodetector de către divizorul de fascicul M2. În așa fel semnalul detectat al ambelor impulsuri și datele de reconstrucție sunt înregistrate la osciloscop.

Intensitatea impulsului $I_{puls}(t)$ este descrisă de o funcție Gaussiană:

$$I_{puls}(t) = I_0 e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}},$$

unde: I_0 - intensitatea maximă a impulsului,

t_0 - timpul central al impulsului,

σ - parametrul care determină lăţimea impulsului, legat de durata impulsului τ (din engleza FWHM, Full Width at Half Maximum) prin relaţia: $\tau = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2.355 \sigma$.

În cazul nostru pentru un impuls de 5 ns sau $\tau = 5 \times 10^{-9} \text{ s}$,

$$\sigma \approx \frac{\tau}{2.355} \approx \frac{5 \times 10^{-9}}{2.355} \approx 2.12 \times 10^{-9} \text{ s}.$$

Osciloscopul înregistrează o medie a 100 de impulsuri pentru a reduce zgomotul. Numeric, acest proces poate fi modelat astfel:

- generăm 100 de impulsuri cu zgomot Gaussian adăugat:

$$I_k(t) = I(t) + \epsilon_k(t), \quad \epsilon_k(t) \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\text{zgomot}}^2),$$

- calculăm media:

$$I_{\text{mediat}}(t) = \frac{1}{100} \sum_{k=1}^{100} I_k(t).$$

În Fig. 2.14, este prezentat forma pulsului detectat cu ajutorul osciloscopului atunci când un număr diferit de impulsuri sunt transmise prin soluţia de drojdie.

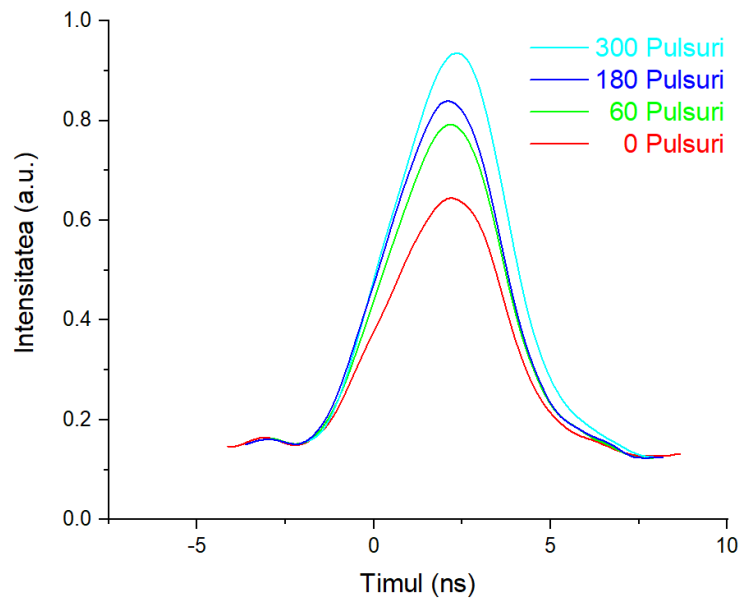


Fig. 2.14. Forma pulsului după diferiţi timpi de iradiere

Din punct de vedere fizic, aici apare noţiunea de număr de pulsuri, frecvenţă, durata pulsului şi doza de radiaţie. Într-un fel sau altul toate aceste noţiuni au acelaşi sens ca de exemplu, odată cu scăderea numărului de impulsuri scade şi doza de radiaţie similar cu schimbarea frecvenţei la

interval de timp constant. Graficul roșu din Fig. 2.14, corespunde unui impuls transmis prin sondă. În această situație, intensitatea pulsului detectată de osciloscop corespunde cu 0,6 unități. După ce soluția este iradiată cu 60 de impulsuri UVC, se poate observa că intensitatea detectată crește la 0,8 (vezi curba verde). Acest lucru înseamnă că o parte din bacterii au fost inactivate. În cele din urmă, pentru iradierea soluției cu 180 (albastru) și 300 de impulsuri (violet) intensitatea fasciculului laser detectat crește la 0,95. După cum se poate observa, rata de inactivare crește și ajunge la maxim.

O analiză bazată pe energia totală a impulsului de $E_{\text{total}} = 30 \text{ mJ} = 30 \cdot 10^{-3} \text{ J}$ unde puterea medie P_{medie} a impulsului poate fi estimată ca raportul dintre energia totală și durata impulsului τ :

$$P_{\text{medie}} = \frac{E_{\text{total}}}{\tau} = \frac{30 \cdot 10^{-3}}{3.65 \cdot 10^{-9}} \approx 8.22 \cdot 10^6 \text{ W} = 8.22 \text{ MW},$$

indică o intensitate extrem de mare pe durata foarte scurtă a pulsului.

Doza aplicată pe unitatea de suprafață (D , în mJ/cm^2) depinde de energia impulsului și de aria secțiunii fasciculului. Presupunând o arie $A = 1 \text{ cm}^2$ (valoare ipotetică pentru simplificare):

$$D = \frac{E_{\text{total}}}{A} = \frac{30}{1} = 30 \text{ mJ}/\text{cm}^2.$$

Pentru $n = 300$ impulsuri (vezi Fig. 2.14.)

$$D_{\text{total}} = 300 \cdot 30 = 9000 \text{ mJ}/\text{cm}^2 = 9 \text{ J}/\text{cm}^2.$$

Folosind modelul cinetic anterior $N = N_0 \cdot e^{-k \cdot t}$, unde $k = k_0 \cdot D$, și presupunând $k_0 = 0.00033 \text{ cm}^2/\text{mJ} \cdot \text{s}$, se obține că:

$$k = 0.00033 \cdot 9000 = 2.97 \text{ s}^{-1}.$$

Pentru $t = 30 \text{ s}$ (durata totală a iradierii cu 300 impulsuri):

$$\frac{N}{N_0} = e^{-2.97 \cdot 30} = e^{-89.1} \approx 0.$$

Aceasta indică o inactivare aproape completă a fungilor la o doză cumulată de $9 \text{ J}/\text{cm}^2$.

În cele ce urmează, voi prezenta trei grafice ilustrate în Figura 2.15, elaborate pe baza calculelor detaliate și a analizei anterioare a impulsurilor laser UV-C (Q-Smart/Q-Scan), luând în considerare energia totală a fiecărui impuls de 30 mJ. Aceste grafice sunt concepute pentru a oferi o reprezentare cantitativă și riguroasă a datelor experimentale, reflectând comportamentul temporal și energetic al radiației emise, esențial pentru evaluarea eficienței procesului de iradiere și a impactului asupra probelor biologice, cum ar fi fungii de drojdie.

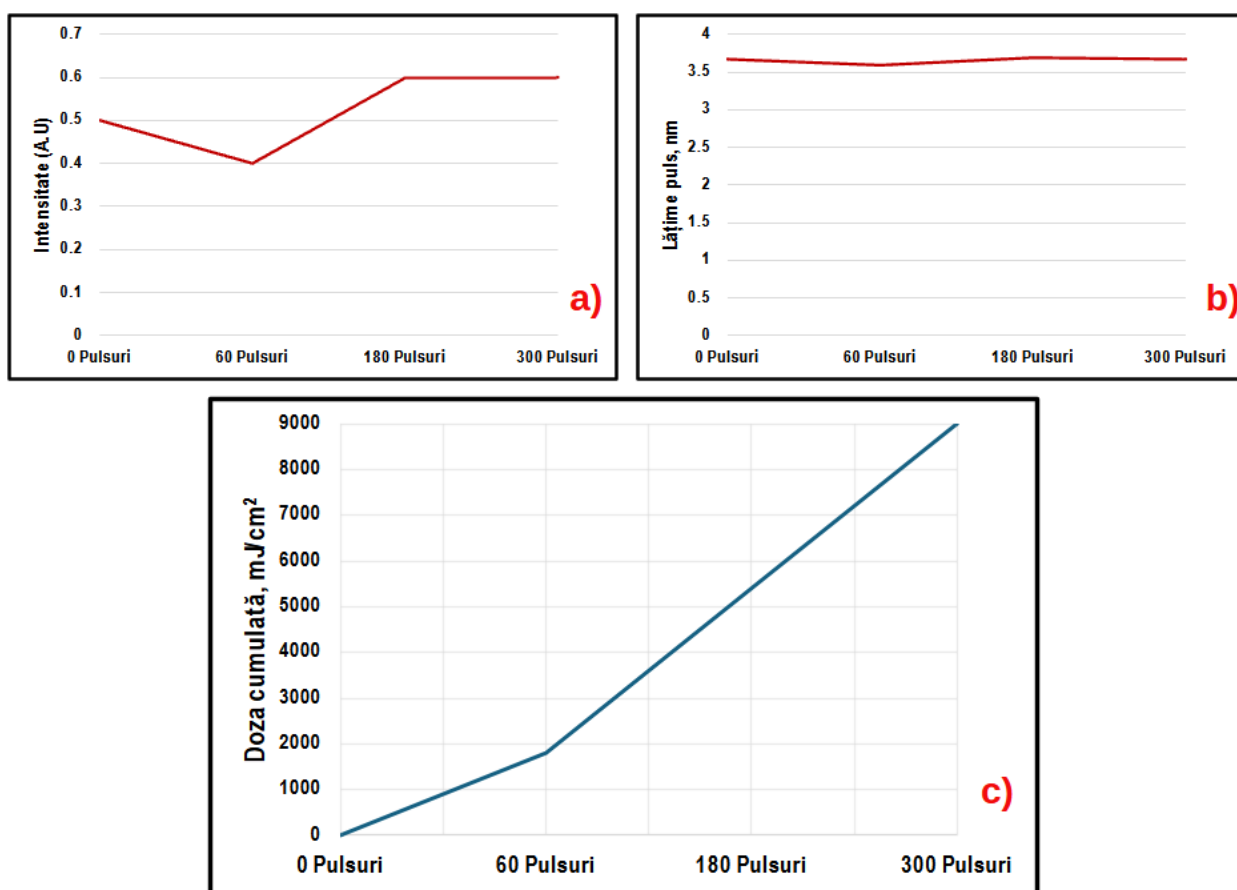


Fig. 2.15. a) Dependența intensității ca funcție de numărul de pulsuri. b) Variațiile lățimii impulsului. c) Doza totală aplicată în funcție de numărul de impulsuri.

Figura 2.15.a arată cum variază intensitatea maximă (exprimată în a.u.) în funcție de numărul de impulsuri. Din grafic se observă că intensitatea scade ușor la 60 de pulsuri (0.4 a.u.), apoi crește și se stabilizează la 0.6 a.u. pentru 180 și 300 de pulsuri. Variațiile lățimii impulsului în funcție de numărul de impulsuri sunt ilustrate grafic în figura 2.15.b, unde se observă o variație ușoară între 3.59 ns și 3.69 ns, indicând o stabilitate relativă a duratei impulsului. Doza cumulată față de numărul de impulsuri este prezentat în graficul din figura 2.15.c. Acest grafic arată doza cumulată (în mJ/cm²) în funcție de numărul de impulsuri, presupunând o arie a fascicului de 1 cm² și o energie de 30 mJ per impuls. Doza cumulată crește liniar cu numărul de impulsuri: 1800

mJ/cm² la 60 pulsuri, 5400 mJ/cm² la 180 pulsuri, și 9000 mJ/cm² la 300 pulsuri, reflectând o creștere proporțională a energiei livrate.

2.6.2. Metoda de analiză microscopică

Analiza microscopică se referă la diferite tehnici și metode de cercetare a structurii materialelor prin microscopie optică și electronică. În prezent, o multitudine de tehnici de analiză și caracterizare a materialelor sunt disponibile, ocupând o poziție unică în investigarea diferitelor caracteristici, cum ar fi morfologia, compoziția și structura chimică, topologia, proprietățile de suprafață, proprietățile moleculare și microstructura [89]. Printre cele mai cunoscute tehnici de analiză microscopică ce pot fi utilizate în acest sens se numără: microscopia optică (MO), microscopia electronică de baleiaj (MEB, eng. SEM – Scanning Electron Microscopy), microscopia electronică în transmisie (MET, eng. TEM – Transmission Electron Microscopy) și microscopia de forță atomică (MFA, eng. AFM – Atomic Force Microscopy) [90,91]. Pentru a înțelege mai bine rolul acestor tehnici, în Fig. 2.15 este reprezentată diferența dintre aceste metode, precum și utilizarea lor în cercetare.

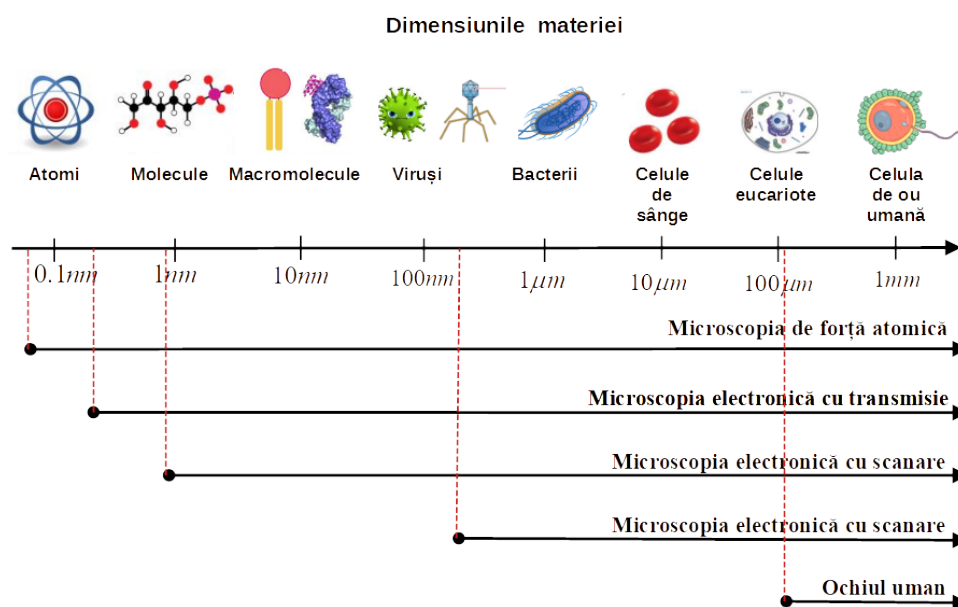


Fig. 2.15. Tehnici de cercetare a materiei

Microscopia optică este cea mai veche dintre tehnicile de microscopie, fiind, de asemenea, cea mai simplă, deoarece materia cercetată poate fi vizualizată direct cu o putere de mărire de până la 1500 $\times$, cu o rezoluție teoretică de 200 – 300 nm în rezoluție laterală și în 500 – 700 nm rezoluție axială [92]. Este o tehnică de imagistică bidimensională la baza căreia servește un microscop optic simplu cu două lentile convergente, un obiectiv și un ocular ce utilizează teoria optică a lentilelor pentru a funcționa. Lumina care iese din probă este colectată de obiectiv și direcționată către ocular.

Rezoluția laterală a unui microscop optic este limitată de lungimea de undă a luminii utilizate și de apertura numerică a obiectivului, fiind descrisă de formula lui Abbe:

$$R_{\text{lateral}} = \frac{\lambda}{2 \cdot NA},$$

unde λ este lungimea de undă a luminii (de obicei în intervalul 400–700 nm pentru lumina vizibilă), iar NA este apertura numerică a obiectivului. Pentru un obiectiv tipic cu $NA = 1.4$ și $\lambda = 550\text{nm}$, rezoluția laterală este de aproximativ 200nm. Rezoluția axială, pe de altă parte, este dată de:

$$R_{\text{axial}} = \frac{2 \cdot \lambda}{NA^2}$$

Aceasta descrie capacitatea microscopului de a distinge detalii în direcția axei optice. Microscopia optică ajută la observarea diferitelor caracteristici, cum ar fi dimensiunea, forma, uniformitatea, conținutul de goluri, analiza defecțiunilor și controlul calității [93].

Cu ajutorul microscopiei optice am obținut o serie de imagini bidimensionale (2D), care s-au dovedit extrem de utile în cercetarea suspensiei de drojdie. Pe baza acestor imagini, am putut determina concentrația fungilor de drojdie pe unitatea de arie, atât înainte, cât și după procesul de decontaminare realizat prin expunerea la radiații UV-C. Rezultatele au fost obținute utilizând un microscop optic cu o putere de mărire de 400×, au arătat pentru fungii de drojdie o morfologie de la forme ovale, sferice până la forme neregulate cu dimensiuni cuprinse între 15–30 μm . Totodată, a fost determinat numărul de fungi per imaginile obținute înainte de aplicarea radiațiilor ultraviolete, care este de aproximativ 800 de colonii pe mm^2 . Distribuția dimensiunilor pare să fie aleatorie, dar numărul de colonii scade cu dimensiunea. Pentru numărul (n) și diametrul (d) coloniilor de drojdie din seturile de probe experimentale pe care le-am obținut, se propune folosirea distribuției Gauss pentru descrierea statistică [94], care este definită ca:

$$W(n, d) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left[-\frac{(n - n_0)^2}{2\sigma_n^2}\right] \times \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{d_n}^2}} \exp\left[-\frac{(d_n - d_{n_0})^2}{2\sigma_{d_n}^2}\right]. \quad (2.27)$$

Relația (2.27) reprezintă două distribuții Gauss corelate dintre care o distribuție după diametru fungilor, iar alata după o mediere a numărului de fungi din mai multe imagini obținute cu ajutorul microscopul optic din diferite părți ale probei (Fig. 2.16).

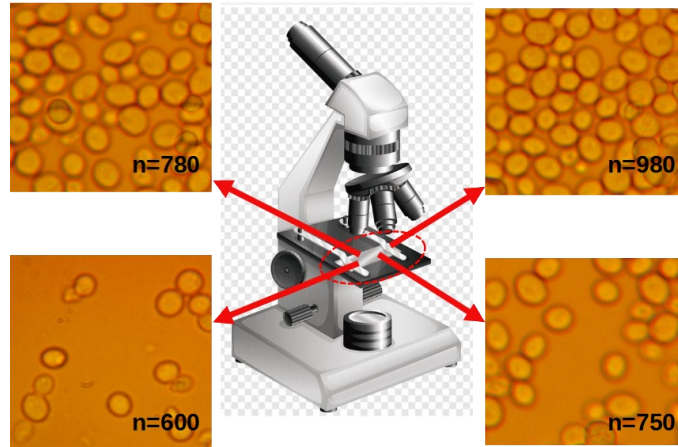


Fig. 2.16. Ilustrație privind medierea numărului de fungi la diferite părți ale probei

Această distribuție descrie probabilitatea ca o colonie să aibă un anumit diametru d . Pentru a caracteriza variația concentrației fungilor înainte și după decontaminare, am calculat variația procentuală a densității coloniilor:

$$\Delta C = \frac{N_i - N_f}{N_i} \cdot 100,$$

unde N_i, N_f reprezintă numărul de colonii pe unitate de arie înainte și, respectiv, după aplicarea radiațiilor UV-C. Pentru a modela efectul radiațiilor UV-C asupra coloniilor, am utilizat o ecuație exponențială de descreștere a populației fungilor în funcție de doza de radiație D :

$$N(D) = N_0 \cdot \exp(-kD),$$

unde N_0 este numărul inițial de colonii, k este constanta de eficiență a decontaminării, iar D este doza de radiație UV-C (exprimată în mJ / cm^2). Această ecuație permite estimarea ratei de reducere a coloniilor în funcție de intensitatea și durata expunerii la radiații.

În relația 2.27, valorile σ_{d_n} este variația dimensiunii iar σ_n - variația numărului de colonii de drojdie pentru aceleași diametre d_n . Pentru o analiză a rezultatelor experimentale pe care le-am obținut, vom estima valorile medii ale numărului $n_0 \approx 7$ și $\sigma_n = 2$, cu mărimea diametrului (d) ale coloniilor de drojdie prezente în probele pregătite pentru decontaminare. Alte valori luate în calcul ca fiind valorile înainte de decontaminare sunt $d_{n_0} / d_{sp} = 0.05 / n_0$ și $\sigma_{d_n} = 0.1 / d_{sp}$, unde d_{sp} este diametrul imaginii obținute cu ajutorul microscopului optic (Fig. 2.17a).

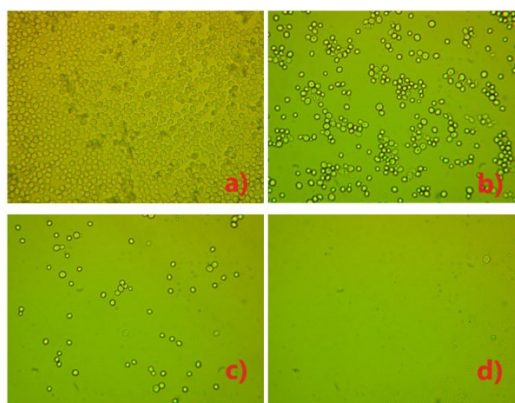


Figura 2.17. Imaginii obținute cu ajutorul microscopului optic. a) înainte de decontaminare ; b), c) și d) după decontaminare

Urmare a radiațiilor ultraviolete aplicate asupra soluției de drojdie la intervale de timp diferite de 5, 10, și 20 de minute (vezi Fig. 2.17 a, b, c), se observa o diminuare a numărului de fungi pe imaginile obținute. Acest lucru spune despre o acțiune eficientă a radiațiilor UV-C în procesul de decontaminare. Metoda microscopiei optice oferă date clare despre numărul de patogeni și dimensiunea lor pe unitate de arie, dar nu poate oferi informații despre forma de via a materiei. Pentru a investiga integritatea formei microorganismelor, la fiecare interval de timp studiat au fost efectuate dropcast-uri pe plachete de siliciu. Filmele subțiri obținute prin dropcast au fost analizate prin microscopie electronică de baleiaj (SEM), care permite observarea detaliilor morfologice la o mărire de aproximativ 2500x.

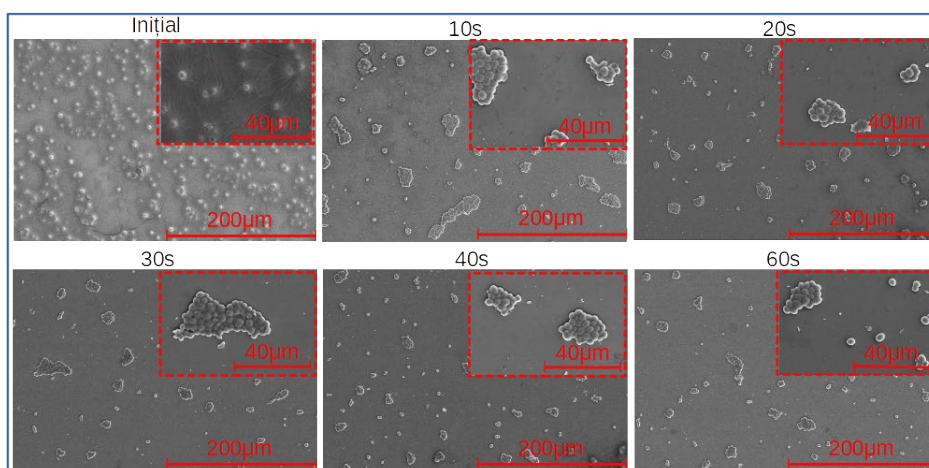


Figura 2.18. Micrografii SEM ale soluției inițiale și la diferite timpuri de iradiere (10, 20, 30, 40 și, respectiv, 60 de secunde), cu magnificare 500 și 2500x.

Rezoluția SEM este superioară microscopiei optice, fiind limitat de lungimea de undă a electronilor și de energia fasciculului, descris de relația de Broglie:

$$\lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}},$$

unde λ_e este lungimea de undă a electronilor, h este constanta Planck ($6.626 \times 10^{-34} J \cdot s$), m_e este masa electronului ($9.109 \times 10^{-31} kg$), iar E este energia fasciculului de electroni. Pentru un SEM tipic cu $E = 20 keV$, lungimea de undă a electronilor este de ordinul picometrilor, permițând rezoluții de până la 12 nm. Odată ce explorăm materia la o mărire de 2500x, este posibil să observăm modificări morfologice ale fungilor de drojdie, cum ar fi deformări ale membranei celulare sau fragmentarea coloniilor. Pentru a cuantifica efectul radiațiilor UV-C asupra inactivării coloniilor, am modelat reducerea populației fungilor folosind o ecuație diferențială care descrie rata de inactivare:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -kNI,$$

unde $N(t)$ reprezintă numărul de colonii viabile la timpul t , k este constanta de inactivare (în cm^2 / mJ), iar I este intensitatea radiației UV-C (în mW / cm^2). Soluția acestei ecuații diferențiale este dată de legea exponențială de descreștere: $N(t) = N_0 \exp(-kIt)$, unde N_0 este numărul inițial de colonii, iar t este timpul de expunere la radiații (în secunde).

2.6.3. Metoda spectroscopică de analiza

Spectrometria optică reprezintă una dintre metodele fizice moderne de studiu al structurii și proprietăților substanțelor, având la bază interacțiunea materiei cu radiația electromagnetică, fie aceasta monocromatică, fie un spectru continuu de radiații. În urma acestui proces, materia poate produce fenomene de împrăștiere a radiației sau de absorbție selectivă, caracteristice fiecărui compus în parte.

Atunci când energia radiației incidente este absorbită de către substanță, la nivel molecular se produc tranziții ale moleculelor din starea fundamentală către stări excitate (nivele energetice superioare), așa cum este ilustrat în Fig. 2.19. O astfel de tranziție este posibilă doar în cazul în care energia fotonului incident corespunde exact diferenței dintre două niveluri energetice ale moleculei: $E = E_{\text{excitat}} - E_{\text{fundamental}}$.

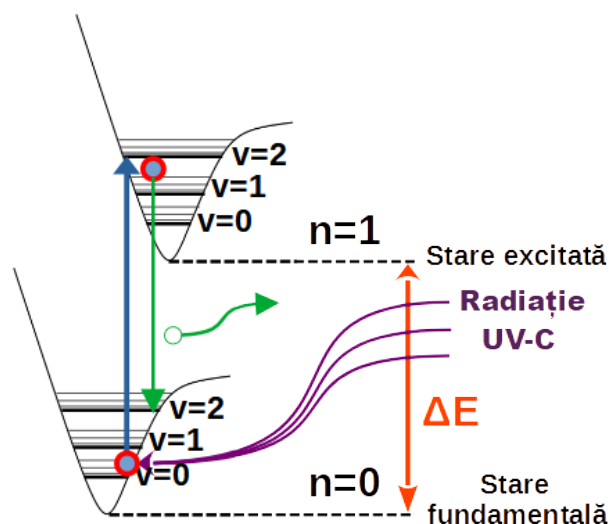


Figura 2.19 Absorbția radiației UV-C de către molecula cu tranziția ei pe nivele energetice.

În figura de mai sus ΔE este diferența de energie între starea fundamentală și cea excitată, însă λ este lungimea de undă a radiației incidente implicate în tranziția cuantică a moleculei de pe un nivel pe altul și se supune următoarei relații:

$$\Delta E = E_e - E_f = \frac{hc}{\lambda}, \quad (2.28)$$

unde, $\lambda = \frac{hc}{\Delta E}$ este lungimea de undă, iar frecvența $\nu = \frac{\Delta E}{h}$, E_f și E_e sunt energia stării fundamentale și celei excitate, h – constanta lui Planck, c – viteza luminii în vid și ν – frecvența radiației emise.

Odată ce moleculele ajunse în stări energetice superioare, după un timp de viață de $t \approx 10^{-8} s$, revin la starea inițială sau fundamentală fie prin pierdere ne-radiativă de energie, fie prin emisia unor radiații caracteristice celor de excitare (cea absorbită). Natura nivelelor energetice este determinată de domeniul spectral al radiațiilor de excitare. Apariția unei linii în spectrul de absorbție analizat se datorează tocmai acestei radiații, iar procesul de formare a liniilor spectrale se numește spectru de absorbție al sistemului respectiv, care ușor poate fi analizat cu ajutorul unui spectrofotometru, fiind o reprezentare a absorbției A în dependența de ν sau λ . Altfel spus, înregistrarea radiației care iese din proba conduce la obținerea de spectre moleculare, astfel încât după natura lor spectrele pot fi de absorbție sau de emisie. Ca urmare, spectrele corespunzătoare, numite spectre electronice, dau informații asupra stării electronice a moleculelor [95]. În dependența de lungimea de undă λ aplicată la iradierea probei, tehnici de spectroscopie

electromagnetică sunt cunoscute ca: spectroscopie a rezonanței magnetice nucleare ($\lambda > 100\mu m$), spectroscopie în infraroșu sau IR ($\lambda = 1-20nm$), spectroscopie ultraviolet-vizibil sau UV-Vis ($\lambda = 200-800nm$), spectrometrie de absorbție a razelor X ($\lambda < 100nm$), etc. Se va acorda atenție în acest capitol metodei de spectroscopie ultraviolet-vizibil și microscopiei electronice cu scanare, deoarece ele reprezintă metodele fizice moderne de studiu a structurii și proprietăților substanțelor anorganice și organice. Odată ce mulți compuși absorb radiațiile din domeniul UV-Vis, metoda respectivă de analiză spectrală este utilizată pe scară mare la determinarea unei game largi de substanțe, în special probele în fază lichidă și solidă.

Descrierea cuantică a tranziției nu este altceva decât absorbția radiației UV-C este descrisă de interacțiunea câmpului electromagnetic al fotonului cu dipolul electric al moleculei.

Probabilitatea tranziției este dată de regula de aur a lui Fermi: $W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \hat{H}_{int} | \psi_i \rangle|^2 \rho(E_f)$,

unde ψ_i, ψ_f sunt funcțiile de undă ale stărilor inițiale și finale, $\hat{H}_{int}$ este Hamiltonianul de interacțiune, $\rho(E_f)$ este densitatea de stări la energia finală, și $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Pentru un câmp

electromagnetic Hamiltonianul de interacțiune este produsul vectorial dintre momentul de dipol electric al moleculei $\vec{\mu}$ și câmpul electric al radiației $\vec{E}$, sau $\hat{H}_{int} = -\vec{\mu} \cdot \vec{E}$. Elementul de matrice al dipolului este: $\langle \psi_f | \vec{\mu} | \psi_i \rangle = \int \psi_f^* \vec{\mu} \psi_i dV$, iar totodată această integrală determină probabilitatea tranziției. Ca de exemplu dacă $\langle \psi_f | \vec{\mu} | \psi_i \rangle = 0$, tranziția este interzisă (reguli de selecție).

Fungii din soluția de drojdie, inofensivi și ușor de studiat în laborator, prezintă o rezistență mai mare la radiațiile UV-C decât multe bacterii sau viruși, inclusiv COVID-19, conform studiilor [96]. Pentru cercetarea metodelor spectroscopice, acești fungi au fost iradiați cu radiații UV-C pulsate la intervale variate. Partea principală a echipamentului de măsurare, este prezentat în Fig. 2.20, constă din sursa de radiație ultravioletă C care emite radiații scurte în impulsuri de 254 nm către proba plasată într-un suport de cuvetă cu patru porturi de lumină perpendiculare unul pe celălalt.

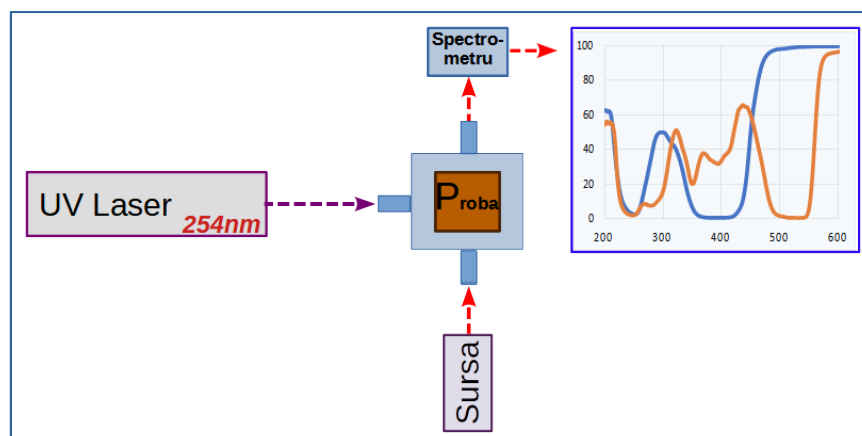


Fig. 2.20. Schema Instalației de analiză spectrală

Astfel sursa UV-C utilizată pentru decontaminarea soluțiilor poluate a fost posibilă cu ajutorul a doua lasere, unul solid (Q-smart) și altul pe baza de soluție (Q-scan). Primul laser (Nd:YAG) operează cu un fascicul pulsant cu lungimea de undă de 1064 nm și cu o durată a pulsului de 5 ns . Pentru a obține lungimi de undă din domeniul ultraviolet s-a procedat în felul următor: pulsul de la laserul solid a fost trecut printr-un generator de dublare a frecvenței 2ω , astfel încât la ieșire sa obținut $\lambda/2$ adică 532 nm . Mai departe acest puls cu lungimea de undă $\lambda = 532\text{ nm}$ a fost trecut printr-un laser cu soluție de cumarină 500, unde la ieșire din el sa obținut lungimea de undă dorită $\lambda = 254\text{ nm}$, cu durată a pulsului de 5 ns . Prin încercări de configurații experimentale repetate (vezi Fig. 2.21), au fost identificați parametrii experimentali ai acestei instalații pentru care am obținut iradierii de calitate optimă.

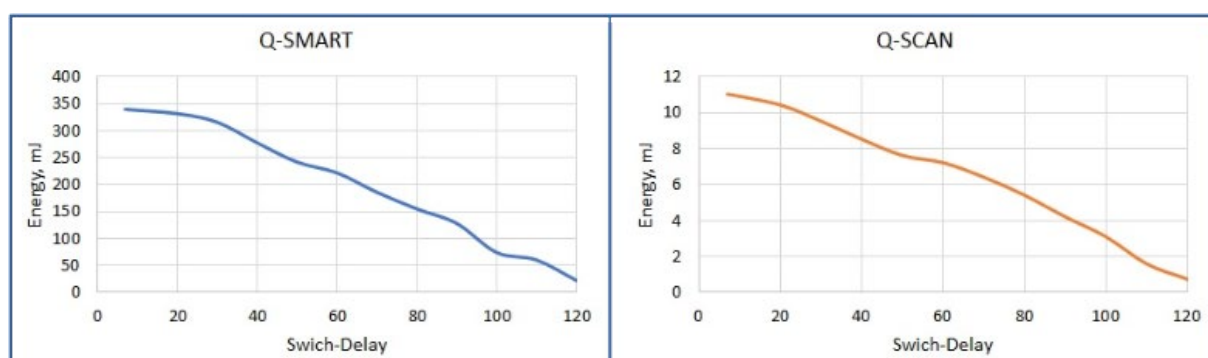


Fig. 2.21. Configurația parametrilor laserilor Q-SMART și Q-SCAN

Odată ce elementele de bază din ADN-ul agenților patogeni absorb foarte bine radiațiile ultraviolete în intervalul $220-280\text{ nm}$ [4], este interesant dacă în cazul fungilor de drojdie se va observa acest efect. De aceea se va încerca din punct de vedere experimental a se studia modificările spectrale în mod specific în intervalul dat ($220-280\text{ nm}$) la diferite timpuri de expunere la radiațiile UV-C. De aceea, la fiecare cinci minute, radiația ultravioletă urmează a fi

oprită pentru a efectua măsurători spectrale cu ajutorul spectrometrului Flame-S-UV-VIS, (200–850 nm) și în aceste intervale de timp se vor face imagini, cu ajutorul microscopului optic atât și cu cel electronic pentru analiza progresului inactivării coloniilor de drojdie în funcție de timpul iradierii.

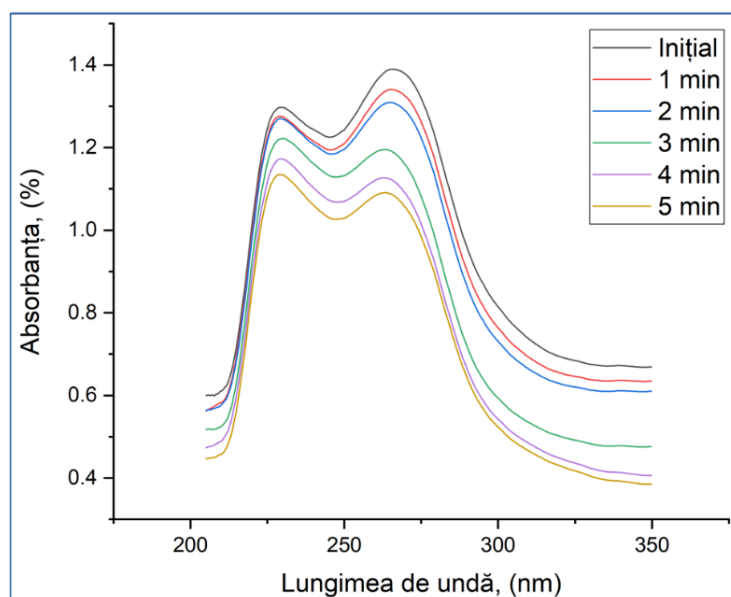


Fig. 2.22. Evoluția în timp a absorbantei soluției de drojdie.

Cercetarea s-a concentrat asupra analizei modificărilor spectrale în intervalul 220–280 nm, interval în care radiațiile ultraviolete sunt intens absorbite de acizii nucleici din ADN-ul agenților patogeni, împiedicându-i astfel să se mai poată replica sau să provoace infecții.

După cum se observă în figura de mai sus, absorbanta prezintă o tendință de scădere odată cu creșterea timpului de iradiere asupra fungilor de drojdie. În general, atunci când un fenomen fizic acționează asupra unei soluții și determină diminuarea absorbantei în funcție de timp (Fig. 2.22), aceasta indică existența unei transformări la nivel molecular. În cazul nostru, fungii de drojdie absorb radiația UV-C din ce în ce mai puțin pe măsură ce timpul de expunere crește, ceea ce determină creșterea transparenței soluției. Acest fenomen se datorează reducerii progresive a concentrației fungilor, proces care conduce implicit la depoluarea soluției.

2.6.4. Analiza creșterii și reproducerii fungilor de drojdie în plăci Petri

Din imaginile obținute prin microscopie electronică de baleiaj (SEM) se poate determina cu ușurință forma și dimensiunea celulelor de drojdie, acestea prezentând, în mod obișnuit, morfologie sferică, ovală sau cilindrică, cu dimensiuni medii cuprinse între 4 și 14 μm. După cum

s-a demonstrat, radiațiile ultraviolete exercită un efect letal asupra microorganismelor, efect care depinde de timpul de expunere, fiind maxim la lungimea de undă de 254 nm. Aceste radiații pot produce modificări semnificative la nivelul ADN-ului, conducând la moartea fiziologică a celulelor expuse. Totuși, microorganismele pot, în anumite condiții, să își refacă structura afectată prin procesul de **fotoreactivare**. Astfel, în prezența luminii sunt activate enzime specifice care desfac dimerii de timină formați în urma iradierii, iar în condiții de întuneric celulele pot repara ADN-ul prin eliminarea și înlocuirea porțiunilor denaturate.

Pentru a demonstra acest lucru se vor crea condiții favorabile pentru ca celulele de drojdie să se poată dezvolta în timp. În vase Petri umplute cu agar-agar vom pune la dezvoltat culturile din soluția noastră de drojdie după iradierea ei cu doze diferite de radiație. Rezultatele obținute ne vor oferi o informație corectă despre eficiența inactivării biomoleculelor cu ajutorul radiațiilor ultraviolete C.

Pentru a efectua un calcul simplu în acest context, considerăm un fascicul laser cu o energie de 30 mJ și un diametru de 10 mm, care iradiază un volum de drojdii situat într-o cuvă cu dimensiunile 10 × 10 × 10 mm. În acest caz, fluența (F), definită ca energia pe unitatea de suprafață, se calculează utilizând formula:

$$F = \frac{E}{A},$$

unde $E = 30 \text{ mJ} = 30 \times 10^{-3} \text{ J} = 0.03 \text{ J}$ este energia fasciculului, iar A este aria suprafeței iradiată.

$$A = \pi \cdot \left(\frac{d}{2}\right)^2 = \pi \cdot \left(\frac{0.01}{2}\right)^2 = \pi \cdot (0.005)^2 = \pi \cdot 0.000025 \approx 7.854 \times 10^{-5} \text{ m}^2.$$

$$\text{Astfel, fluența este: } F = \frac{0.03}{7.854 \times 10^{-5}} \approx 381.97 \text{ J/m}^2 \approx 382 \text{ J/m}^2.$$

Efectul radiațiilor UV-C asupra drojdiei urmează modelul de inactivare exponențială:

$$S = e^{-kD},$$

unde:

S - fracția de celule supraviețuitoare.

k - constanta de inactivare (specifică microorganismului și lungimii de undă; valoarea ipotetică din răspunsul anterior a fost $k = 0.01 \text{ m}^2/\text{J}$)

D - doza de radiație, care în acest caz este fluența $F \approx 382 \text{ J/m}^2$

Substituind:

$$S = e^{-0.01 \cdot 382} = e^{-3.82}.$$

Folosind $e^{-3.82} \approx 0.022$, rezultă că aproximativ 2.2% dintre celule supraviețuiesc iradierii cu această doză.

Doza de 382 J/m^2 este semnificativă și, conform modelului, reduce drastic viabilitatea celulelor de drojdie (doar ~2.2% supraviețuiesc). Aceasta confirmă efectul letal al radiațiilor UV-C.

Timpu de creștere și de înmulțire a celulelor de drojdie a fost de 72 de ore, iar rezultatele sunt prezentate în Fig. 2. 23. Diluția de 1:10 implică reducerea concentrației fungilor conform relației: $c_d = \frac{c_0}{D}$, unde: c_0 este concentrația inițială a fungilor, c_d este concentrația după diluție, D este factorul de diluție.

În Fig. 2.23 sunt prezentate culturile obținute din soluția inițială (rândul de sus) și, respectiv, din soluția diluată (rândul de jos). Diluția a fost realizată pentru a preveni suprapunerea fungilor și pentru a permite numărarea mai precisă a coloniilor.

În faza inițială, densitatea ridicată a fungilor din vasul Petri nu permite o estimare exactă a numărului acestora. În schimb, în cazul soluției diluate, distribuția coloniilor este suficient de clară pentru a obține rezultate cuantificabile.

De asemenea, pentru a observa evoluția, fungii din vasul Petri corespunzător soluției diluate au fost lăsați să se dezvolte în continuare, în scop comparativ și exploratoriu

Pentru curiozitate am lăsat fungii din vasul Petri al soluției diluate $t = 60s$ pentru a observa careva transformări la o perioada mai mare de timp.

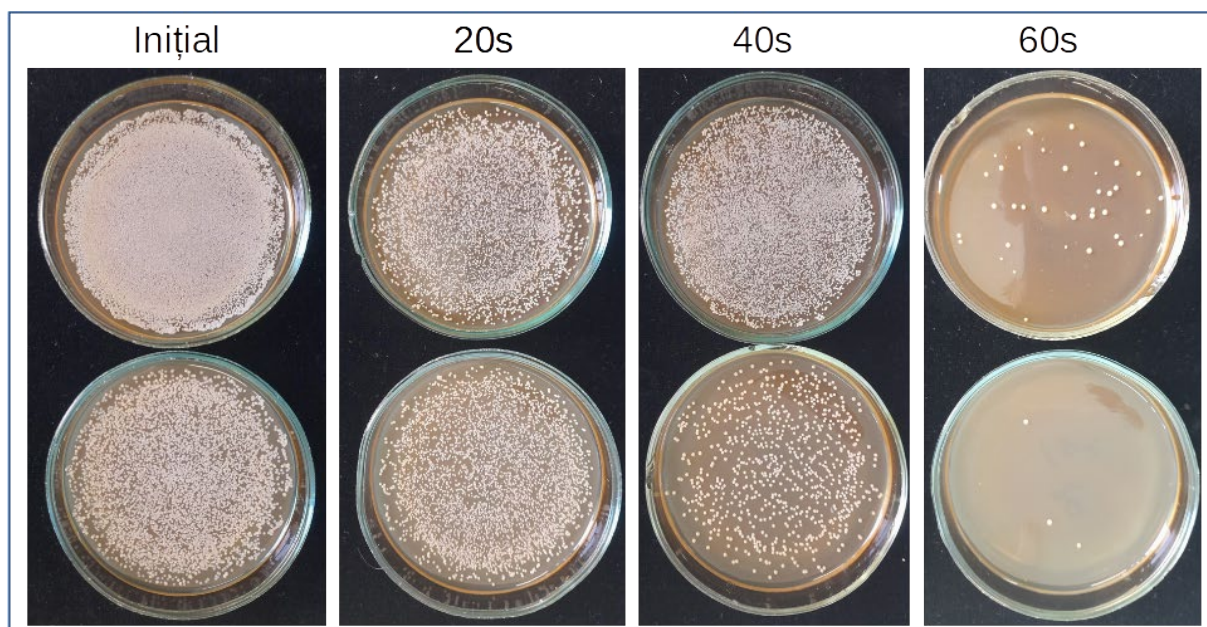


Fig. 2.23 Evoluția în timp a dezvoltării fungilor din soluția de drojdie.

După cum se vede în Fig. 2.24, peste o săptămână nu se vad schimbări esențiale, dar după 2 săptămâni a mai apărut o structură fungică marcată cu roșu. Aceasta spune despre proprietatea biomoleculelor de a se fotoreactiva în prezența luminii și condițiilor favorabile de dezvoltare.

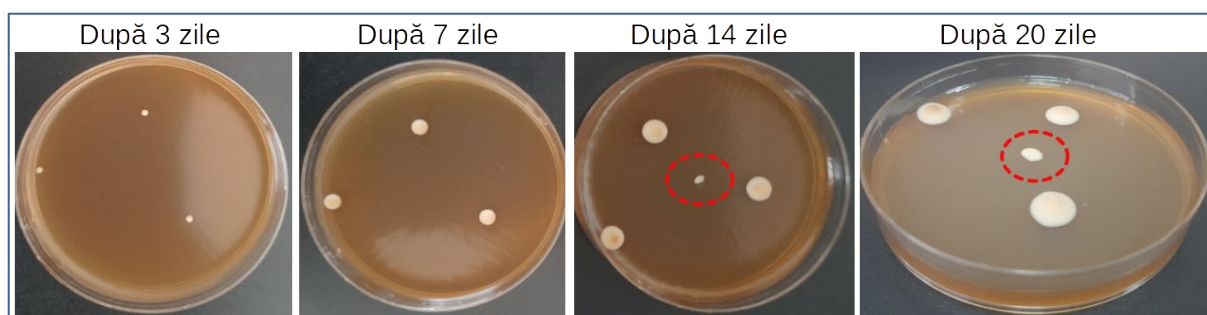


Figura 2.24 Evoluția în timp a dezvoltării fungilor din soluția de drojdie.

2.7. Concluzii la capitolul 2

Aspecte ale interacțiunii radiațiilor electromagnetice cu materia au fost cercetate. În baza acestor concepte au fost dezvoltate diferite mecanisme de interacțiune a radiațiilor UV-C pulsate cu biomoleculele.

Modelul neliniar de interacțiune a biomoleculelor cu radiații pulsate scurte a fost propus. Metoda de excitare al modelului neliniar propus depinde de condiția atribuită duratei pulsului aplicat în raport cu frecvența de vibrație a biomoleculelor

Modul de absorbantă a soluției de drojdie, în intervalul de lungimi de undă 200 – 400 nm la diferiți timpi de iradiere fost analizat, unde o scădere a absorbantei odată cu creșterea timpului de iradiere asupra fungilor de drojdie a fost observată. Odată ce lichidul devine mai translucid, concentrația de fungi din soluția de drojdie este în scădere în raport cu timpul expunerii. Cu cât mai mult crește timpul expunerii fungilor sub acțiunea radiațiilor UV-C cu atât mai mult absorbanta este în descreștere.

Pentru a verifica integritatea formei microorganismelor conținute în soluția de drojdie, au fost investigate filmele subțiri obținute prin dropcast cu ajutorul metodelor FTIR și microscopie electronica de baleiaj (SEM).

Calcululele demonstrează că iradierea UV-C pulsată reduce semnificativ populația de fungi din drojdie, iar această reducere a absorbantei reflectă scăderea concentrației fungilor viabili, măsurabilă cu un spectrofotometru.

Energia unui foton UV-C, la lungimea de undă $\lambda = 254\text{ nm}$, calculată ca $E \approx 4.89\text{ eV}$, este suficientă pentru a induce daune fotochimice în legăturile ADN-ului fungilor, contribuind la inactivarea lor.

Energia totală de 30 mJ per impuls, combinată cu o durată $\tau \sim 3.65\text{ ns}$, generează o putere medie de aproximativ 8.22 MW, ceea ce explică eficiența ridicată a iradierii UV-C asupra fungilor.

Creșterea numărului de impulsuri (de la 0 la 300) optimizează doza cumulată (până la 9 J/cm^2 pentru 300 impulsuri), ducând la o inactivare aproape totală a fungilor.

Fluența fasciculului laser: $\sim 382\text{ J/m}^2$, suficientă pentru a inactiva $\sim 97.8\%$ din celulele de drojdie, conform modelului exponențial.

3. INFLUENȚA INTENSITĂȚII RADIAȚIILOR UV ASUPRA RATEI DE DECONTAMINARE A AGENȚILOR PATOGENI

3.1. Aproximația Born Oppenheimer racordată la dimerizarea ADN sub acțiunea radiației

Legăturile chimice dintre atomii unei molecule depind în mare măsură de poziția relativă a acestora și pot fi influențate sau rupte sub acțiunea unui câmp electromagnetic. Descrierea lor se realizează în cadrul mecanicii cuantice, întrucât proprietățile fizice și chimice ale moleculelor sunt determinate de natura cuantică a interacțiunilor din interiorul acestora.

În chimia cuantică și fizica moleculară, cel mai utilizat model de aproximație matematică pentru studiul dinamicii moleculare este **aproximația Born–Oppenheimer (B–O)**. Aceasta presupune că funcțiile de undă ale nucleelor atomice și ale electronilor dintr-o moleculă pot fi tratate separat, pe baza diferenței mari dintre masele lor: nucleele, fiind mult mai grele decât electronii, se consideră practic fixe pe intervalele de timp în care subsistemul electronic evoluează către o stare cuantică determinată de interacțiunile dintre electroni [97].

Aplicarea aproximației B–O depinde de natura problemei fizice abordate. În chimia cuantică, aceasta permite simplificarea descrierii funcțiilor de undă moleculare și a proprietăților asociate moleculelor complexe. În schimb, în optica moleculară, accentul este pus pe transferul de energie din subsistemul electronic excitat către subsistemul nuclear, cu scopul de a controla procesele de formare sau rupere a legăturilor chimice sub acțiunea radiației. Pornind de la aproximația B-O mai jos considerăm energia moleculară H_t , ca o sumă de termeni ce conțin următoarele interacțiuni:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N_n} \left\{ \frac{\hat{P}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + V(r, R_{\alpha}) \right\} + \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m}, \quad (3.1)$$

unde, P_{α} , $\mathbf{R}_{\alpha}$, M_{α} , și $\mathbf{p}_k$, $\mathbf{r}_k$, m sunt impulsurile, pozițiile maselor a N_n nuclee și N_e electroni de valență, respectiv; $V(r, R)$ este energia columbiană a interacțiunii dintre electroni și nuclee descrise de expresie care poate fi reprezentată ca suma a 3 termeni :

$$V(r, R) = V_N(R) + V_E(r) + V_{N,E}(r - R), \quad \text{unde} \quad V_N(R) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \left\{ \sum_{j < k} U(|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{R}_{k\beta}|) \right\} \text{ conține}$$

interacțiunea electromagnetică și de schimb între nuclee; $V_E(r) = \sum_{j < k} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|}$ este

interacțiunea columbiană între electroni. Ultimul termen conține interacțiunea între subsistemul

rapid electronic și subsistemul de nuclee $V_{N,E}(r-R) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \sum_{j < k} \frac{e_j e_k}{|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{r}_{k\beta}|}$. $V(r, R)$ este

energia coulombiană a interacțiunii dintre electroni și nuclee descrise de expresie:

$$V(r, R) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \left\{ \sum_{j < k} U(|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{R}_{k\beta}|) + \sum_{j < k} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|} + \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \sum_{j < k} \frac{e_j e_k}{|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{r}_{k\beta}|} \right\}$$

Aici e_j și e sunt sarcinile electrice a nucleului j și a electronului respectiv; R_j și r_k sunt vectori de poziție a electronului k și a nucleului j . Să studiem mai întâi vibrația neliniară a rețelei.

În aproximarea adiabatică putem introduce deplasarea $\xi_{j\alpha} = R_{j\alpha} - R_{j\alpha}^0$. În acest caz putem

considera energia potențială $U(R) \approx \sum_{j < k} \frac{e_j e_k}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k|}$ din seria Taylor relativ la starea sa de

echilibru până în ordinul 4 după parametrul mic $\xi_{j\alpha} / R_{j\alpha}^0$

$$U(R) = U(R_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{l, j} \frac{\partial^2 U}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{j\alpha}} \xi_{j\alpha} \xi_{l\alpha} + \sum_{\alpha < \beta=1}^3 \sum_{l, j} \frac{\partial^2 U}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{j\beta}} \xi_{j\alpha} \xi_{l\beta} \\ + \frac{1}{4!} \sum_{l, j, m, n} \frac{\partial^4 U}{\partial R_l \partial R_j \partial R_m \partial R_n} \xi_j \xi_l \xi_m \xi_n.$$

Potrivit [134] într-o vibrație a laticelului neliniară într-o singură dimensiune, acest Hamiltonian este redus la cea mai simplă formă

$$\hat{H}'_v = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2M} + K \sum_j \frac{(\xi_j - \xi_{j-1})^2}{2} + A \sum_{j=1}^N (\xi_j - \xi_{j-1})^4$$

unde K și A sunt coeficientul armonic și anarmonic în direcție ξ_j .

Drept metodă de analiză a sistemelor moleculare în mecanica cuantică aproximarea BO este o variație a aproximării adiabatice a ecuației lui Schrödinger, care constă în identificarea și descrierea separată a nucleelor atomice și a electronilor din sistem, pentru care timpii caracteristici de schimbare a stării sunt foarte diferiți. În limbajul mecanicii cuantice, aproximarea BO este

echivalentă cu ipoteza că funcția de undă totală Ψ_t a unei molecule poate fi exprimată ca produs al unei funcții de undă electronice Ψ_e și al unei funcții de undă nucleare Ψ_n (vibraționale, de rotație):

$$\Psi_t(r, R) = \Psi_e(r, R) \times \Psi_n(R), \quad (3.2)$$

unde r — sunt coordonatele electronilor, iar R — sunt coordonatele nucleelor.

Ecuția Schrödinger nestaționară pentru o moleculă cu n nuclee și n electroni și o funcție de undă de aproximare capătă forma:

$$\left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{[\hat{P}_\alpha + \frac{e}{c} A(R_\alpha, t)]^2}{2M_\alpha} + \sum_{i=1}^n \frac{[\hat{p}_i - \frac{e}{c} A(r_i, t)]^2}{2m_e} + V(r, R) + U(r, R) \right) \times \\ \times \Psi_e(r, R, t) \times \Psi_n(R, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_e(r, R, t) \times \Psi_n(R, t) \quad (3.3)$$

unde $A(R_\alpha, t)$ și $A(r_i, t)$ este potențialul vectorial al câmpului electromagnetic aplicat sistemului molecular, respectiv pentru nuclee și electroni. $U(r, R)$ descrie interacțiunea sistemului molecular cu componenta scalară a câmpului electromagnetic aplicat sistemului de electroni și nuclee. Din etalonarea câmpului electromagnetic se poate de ales cazul când partea scalară devine neglijabilă în comparație cu partea vectorială a câmpului pentru undele electromagnetice transversale.

Interacțiunea sarcinilor cu undele electromagnetice poate fi calculată folosind teoria perturbației dependente de timp. În etalonarea radiației când $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, putem descompune în serie pătratul impulsurilor deplasate din ecuația Schrödinger (3.3). De exemplu pentru nuclee obținem următorul adaos la $P^2 / 2M$

$$V_{ph}^n = \frac{e}{Mc} \vec{A}(R, t) \cdot \vec{P} + \frac{e^2}{2Mc^2} A^2(R, t). \\ V_{ph}^e = -\frac{e}{mc} \vec{A}(r, t) \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2(r, t).$$

Observăm că potențialul de interacțiune cu câmpul electromagnetic poate fi luat în aproximația nerelativistă neglijând ultimii termeni din ambele expresii de mai sus proporționale cu A^2 . De asemenea se mai observă că primul termen la partea electronică poate fi mai mare decât potențialul de interacțiune al nucleelor cu câmpul electromagnetic. Asta are loc din motivul că masa electronului, m , este cu mult mai mică decât masa nucleelor M . De asemenea considerăm că în direcția radială a tranzițiilor electronice față de nucleee are loc legea conservării impulsurilor electronilor și nucleelor în interacțiune P proporțional cu p . Această presupunere ne permite să neglijăm integral interacțiunea nucleelor cu câmpul electromagnetic luând în considerație doar potențialul pentru electroni în aproximația nerelativista $V_{ph}^e = -\frac{e}{mc} \vec{A}(r, t) \cdot \vec{p}$.

Pentru majoritatea dezintegrărilor atomice, termenul A^2 poate fi neglijat, deoarece este mult mai mic decât produsul $\vec{A} \cdot \vec{p}$. Este posibil să se calculeze atât dezintegrarea stărilor atomice excitate cu emisia de radiație, cât și excitația atomilor cu absorbția radiației. Un câmp electromagnetic arbitrar poate fi analizat cu ajutorul descompunerii Fourier pentru a da o sumă de componente cu frecvență definită. Dacă luăm în considerare potențialul vectorial pentru o astfel de componentă, $\vec{A}(\vec{r}, t) \equiv 2\vec{A}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$. Energia din câmp este $Energia = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} V |\vec{A}_0|^2$.

Dacă câmpul este cuantificat (cum voi arăta mai târziu) cu fotoni de energie $E = \hbar\omega$, putem scrie intensitatea câmpului în termeni de N fotoni.

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \left[\frac{2\pi\hbar c^2 N}{\omega V} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{\epsilon} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t). \quad (3.4)$$

Direcția câmpului este dată de vectorul de polarizare unitar $\hat{\epsilon}$. Termenul cosinus a fost împărțit în exponențiale pozitive și negative. În teoria perturbației dependente de timp, exponențialul pozitiv corespunde absorbției unui foton și excitației atomului, iar exponențialul negativ corespunde emisieii unui foton și dezintegrării atomului la o stare de energie mai mică.

3.2. Dimerizarea ADN/ARN ca funcție a intensității radiațiilor UVC prin procesul Raman

Pentru descrierea dependenței intensității radiației UV-C de modificările structurii ADN, în această secțiune propunem utilizarea **aproximației Born–Oppenheimer (B–O)** [99], ca model matematic aplicabil în dinamica moleculară, chimie și microbiologie.

Aproximația B–O se bazează pe ipoteza separării mișcării electronice de cea nucleară într-o moleculă, ceea ce permite exprimarea funcției de undă moleculare ca produs între funcțiile ce descriu pozițiile electronilor și, respectiv, pozițiile nucleelor. Spre deosebire de modelul tradițional, care urmărește obținerea funcțiilor de undă și a energiilor sistemului izolat, în prezenta lucrare se ia în considerare și interacțiunea moleculelor cu un câmp electromagnetic extern.

Ca urmare, hamiltonianul sistemului electronic și cel nuclear este modificat pentru a include termenii de cuplaj cu radiația incidentă. În această abordare, subsistemul nuclear este caracterizat prin vectorii de coordonate $R = \{R_1, R_2 \dots R_n\}$, în timp ce subsistemul electronic este descris prin coordonatele electronice $r = \{r_1, r_2 \dots r_n\}$, și este considerat un subsistem lent în comparație cu subsistemul electronic în moleculă,

Aici, $R_1, R_2 \dots R_n$ și $r_1, r_2 \dots r_n$ sunt coordonatele generalizate ale nucleelor și electronilor de legătură dintr-o moleculă. În această aproximare funcția de undă moleculară este reprezentată de produsul $|\Psi^{(e)}(\mathbf{r}, \mathbf{R})\rangle \otimes |\chi(\mathbf{R})\rangle$, unde $|\Psi^{(e)}(\mathbf{r}, \mathbf{R})\rangle$ și $|\chi(\mathbf{R})\rangle$ sunt funcțiile de undă ale subsistemelor electronice și, respectiv, ale nucleelor moleculei. Modificarea structurilor ADN și ARN are loc sub acțiunea radiației UV-C, așa cum este reprezentată schematic în fig. 3.1. Având în vedere pozițiile nucleelor fixate pentru subsistemul electronic, ecuația Schrödinger poate fi reprezentată sub forma

$$H^{(e)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_s) |\Psi_n^{(e)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_s)\rangle = E_n^{(e)}(\mathbf{R}_s) |\Psi_n^{(e)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_s)\rangle. \quad (3.5)$$

Evident, valoarea proprie a energiei electronice $E_n^{(e)}$ depinde de pozițiile alese ale nucleelor, $\mathbf{R}_s$. Variind aceste poziții în pași mici și rezolvând în mod repetat ecuația Schrödinger a subsistemului electronic, se obține $E_n^{(e)}$ în funcție de $\mathbf{R}_s$. Începem cu modificarea dimerului ADN-ului a legăturilor nucleotidice adiacente, $A=T$, sub acțiunea câmpului electromagnetic. Energia de interacțiune a multipolilor electrici moleculari poate fi aproximată cu activitatea

câmpului electric în timpul deplasărilor electronilor la distanță r_j , adică $H_{Int} = -\sum eV(r_j)$, cu

$$\text{potențialul electric } V(r_j) = \int_0^{r_j} E dr \text{ cu neglijarea câmpului magnetic [100].}$$

Pentru construirea stărilor moleculare probabile înainte și după acțiunea radiației UV-C se propune reprezentarea legăturilor covalente ale celor două nucleobaze adiacente în ADN [101]. De exemplu, notațiile $\{1=2\}$ și $\{3=4\}$ ale fig. 3.1.b reprezintă două legături covalente duble între două nucleotide de adenină și timină. La formarea legăturilor covalente, orbitalii de electroni se suprapun pentru a forma orbitali moleculari, care ne oferă cel mai simplu prototip de moleculă cu legături covalente observate în moleculă din perechea arhetipală Lewis

$$|\Psi_{H_2}(\zeta, R)\rangle = [2(1 + S_{ab})]^{-\frac{1}{2}}(|\phi_a(1)\rangle \otimes |\phi_b(2)\rangle + |\phi_b(1)\rangle \otimes |\phi_a(2)\rangle), \quad (3.6)$$

unde integrala de suprapunere definită ca $S_{ab} = \int \phi_a(r)\phi_b(r)dr$ fiind dependentă de exponentul orbital de ζ , și separarea inter-nucleară R . Se consideră că o legătură covalentă se realizează între doi atomi asemănătoare hidrogenului cu doi electroni nedistinși, iar fiecare dintre ei poate fi localizat într-una dintre stări $|\phi_a(i)\rangle$ sau $|\phi_b(i)\rangle$ în apropierea nucleului a sau b , cu $i=1,2$.

Dacă e să discutăm despre simpla dimerizare a ADN-ului sau ARN-ului, în care timină este înlocuită cu uracil, atunci catena de ADN se descompune până la starea de dimerizare reprezentată în Fig. 3.1(b) prin deteriorarea a două nucleobaze adiacente $T=A$ și $T=A$, care trec în noi legături între nucleotidele de timină, $T=T$ de-a lungul direcției x catenei de ADN. Acest proces poate fi reprezentat în formalismul sistemului pe trei niveluri al stărilor electronice colective. De exemplu, în ADN-ul prezentat în Fig. 3.1(b) dublu catenar, unde dimerul implică două baze pirimidinice alăturate pe aceeași catenă de ADN, pot fi generați numai *syn* izomerii, în timp ce izomerul *cis* este preferat izomerului *trans* în mare măsură [102,103]. Să definim starea fundamentală nedeteriorată a catenei de ADN prin funcția de undă a două legături covalente în direcția x - (vezi Fig. 3.1(a) după cum urmează

$$\begin{aligned} |G_u\rangle &= |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{jy})\rangle \otimes |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{jy})\rangle, \\ \text{unde } |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{jy})\rangle &= [2(1 + S_{ab})]^{-1/2} (|\phi_a(1)\rangle \otimes |\phi_b(2)\rangle + |\phi_b(1)\rangle \otimes |\phi_a(2)\rangle), \\ |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{jy})\rangle &= [2(1 + S_{cd})]^{-1/2} (|\phi_c(3)\rangle \otimes |\phi_d(4)\rangle + |\phi_d(3)\rangle \otimes |\phi_c(4)\rangle), \end{aligned} \quad (3.7)$$

sunt cele două stări de legături suprapuse ale nucleotidelor adiacente ale catenelor de ADN. $\mathbf{R}_{Iy}$ și $\mathbf{R}_{Jy}$, respectiv, care sunt reprezentate prin $A : T(1,2)$ și $A : T(3,4)$ în direcția y (Vezi Fig. 3.1b). Pentru simplitate, am reprezentat în Ec.(3.7) o singură legătură covalentă între fiecare pereche de nucleotide, dar natura acestei stări fundamentale trebuie să fie astfel încât recunoașterea precisă între C și G prin tripla legătură H, și între $T(U)$ și A printr-o dublă legătură H, poate garanta păstrarea informației genetice codificate în molecula de ADN (ARN) [104,105].

După acțiunea radiației UV-C, lanțul de trepte ADN trece în noi stări, unde, conform Fig. 3.1b, "pașii" deteriorați au trecut în noua stare de legătură covalentă de-a lungul direcției - x după cum urmează

$$|G_d\rangle = |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{I_x})\rangle \otimes |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{J_x})\rangle,$$

$$\text{unde } |\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{I_x})\rangle = [2(1 + S_{ac})]^{-1/2} (|\phi_a(1)\rangle \otimes |\phi_c(3)\rangle + |\phi_c(3)\rangle \otimes |\phi_a(1)\rangle),$$

$$|\Psi(\zeta, \mathbf{R}_{J_x})\rangle = 2^{-1/2} (|\phi_b(2)\rangle \otimes |\phi_d(4)\rangle + |\phi_d(4)\rangle \otimes |\phi_b(2)\rangle),$$
(3.8)

sunt dimerul de pirimidină și nucleobazele decuplate purinice formate după modificări ale legăturilor în trepte între catenele de ADN. Menționăm aici că purinele (adenină și guanină) pot rămâne necuplate în legături covalente (Fig. 3.1.b). Aceste două stări sunt construite în procesul de absorbție și emisie a celor doi fotoni UV din fluxul aplicat de radiație UVC.

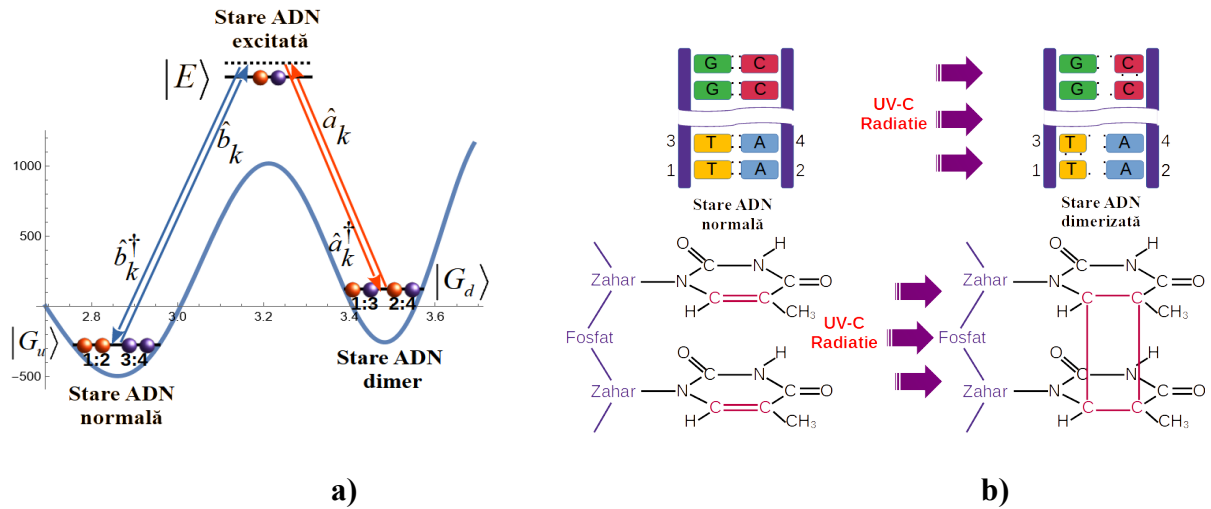


Fig. 3.1. a) O descriere pe trei niveluri a generării legăturii dimer prin radiația UVC în ADN conform literaturii. b) Posibila dimerizare a timinei și citozină în ADN sub radiația UVC. Conform literaturii [33], raportul dintre dimerii T=T și C=C este de 10:1 sau mai mare.

Starea excitată conține funcția de undă de tip - p în care unul dintre cei patru electroni covalenți din legături a, b, c și d poate fi excitat la

$$|E\rangle = |\Psi^{ex}(\zeta, \mathbf{R}_{Ix}, \mathbf{R}_{Jy})\rangle, \quad (3.9)$$

care se află într-o stare de electroni excitați $|\phi_a^{ex}(i)\rangle$ și poate fi în stări $|2p\rangle$ sau $|2s\rangle$ asemănătoare hidrogenului, așa cum este descris în transferul de energie fotosintetică [106,107,108]. Spectrul electronic este protonat, astfel mai jos vom arăta posibila excitație într-o astfel de stare:

$$|\Psi^{ex}(\zeta, \mathbf{R}_{Ix}, \mathbf{R}_{Jy})\rangle = [2(2 + S_{ac}^e + S_{ab}^e)]^{-1/2} \sum_{i \neq l \neq n \neq m = 1}^4 \times |\phi_a^{ex}(i)\rangle \otimes |\phi_b(l)\rangle \otimes |\phi_c(n)\rangle \otimes |\phi_d(m)\rangle. \quad (3.10)$$

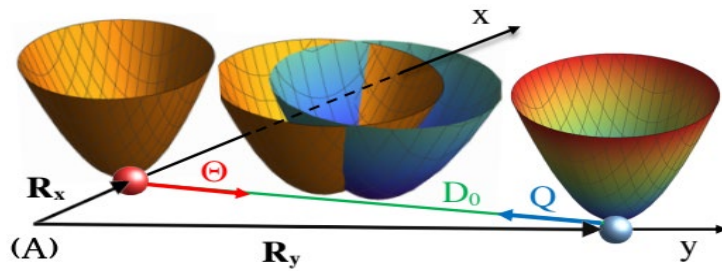


Fig. 3.2 Schiță ilustrativă a celor două minime ale aceluiași potențial, una situată pe axele x corespunzătoare stării pirimidinice, $T = T$, iar al doilea minim este situat pe axele y corespunzătoare stării normale a ADN/ARN, $C = T$.

Excitarea periodică a electronilor de legătură de către radiația din starea normală prin procesul indus de Raman mută pozițiile nucleelor dimerului de pirimidină și stările normale în direcții opuse de-a lungul distanței de separare D_0 , astfel încât aceste două minime se pot suprapune. Aceasta corespunde situației în care electronii excitați pot forma dimerul (vezi suprapunerea celor doi paraboloizi). Când radiația este oprită, aceste două minime ale energiei potențiale revin la stările lor inițiale pe direcțiile x și y , dar numărul mare de nucleotide rămâne în starea dimer.

În mod obișnuit, energia stării este mai mică decât energia stării și este considerată una sau alta stare excitată în funcție de procesul care are loc. Tranziția optică între aceleași stări atomice de legături asemănătoare hidrogenului cu paritate opusă, $|E_{2s}\rangle = |\phi_a^{1s}(i)\rangle$ și $|E_{2p}\rangle = |\phi_a^{2p}(i)\rangle$ cu energiile, E_{2s} și E_{2p} respectiv, poate fi mai mare decât elementul matricei de tranziție optică

între localizarea electronilor pe diferite nuclee. Într-adevăr, având în vedere că în moleculă, suprapunerea între stările diferitelor nuclee, $|\phi_a^{1s}(i)\rangle$ și $|\phi_b^{2p}(i)\rangle$, poate fi mai puțin probabilă decât tranzițiile intrinseci dintre cele două stări fundamentale, $|E_{2s}\rangle$ și două stări excitate, $|E_{2p}\rangle$, ale aceluiași atom datorită valorii mici a raportului dintre raza Bohr și distanța medie dintre doi atomi care participă la legătura covalentă [109]. Subliniem că din cauza delocalizării electronului excitat, starea interzisă a dipolului din apropierea nucleului poate fi excitată de deplasarea $|1s\rangle_1$ la $|2s\rangle_2$ a nucleelor situate în apropiere, etichetate de 1 și 2. O scurtă trecere în revistă a unor astfel de tipuri de hibridizare a stării excitate, cum ar fi $\pi - \pi$ stivuirea, poate fi găsită în [110,111] și un aspect revizuit al acestui concept este propus în [112].

Pentru simplitate, neglijăm acest tip de tranziție $|G_d\rangle \rightarrow |E_{2s}\rangle$, deci obținând un sistem pe trei nivele cu Hamiltonianul electronic, $\hat{H}^{(e)} = \hat{H}_0^{(e)} + \hat{H}_{Int}^{(e)}$, unde

$$\hat{H}_0^{(e)} = -\hbar\omega_u |G_u\rangle\langle G_u| - \hbar\omega_d |G_d\rangle\langle G_d| + \hbar\omega_u^k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \hbar\omega_d^k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (3.11)$$

$$\hat{H}_{Int}^{(e)} = -P_u^k g_k |E\rangle\langle G_u| \hat{b}_k - P_d^k g_k |E\rangle\langle G_d| \hat{a}_k + H.c., \quad (3.12)$$

sunt părțile libere și de interacțiune ale hamiltonianului, care descriu procesul de oscilație dintre cele trei stări ale formațiunilor bimoleculare ca normal, dimer și excitat. Aici $P_u^k = |\langle G_u | \sum_j e_j(\mathbf{r}_j, \boldsymbol{\epsilon}_k) | E \rangle|$ este polarizarea electronică în raport cu tranziția moleculară $|G_u\rangle \rightarrow |E\rangle$, P_d^k este o polarizare similară față de tranziția dimerului, $|G_d\rangle \rightarrow |E\rangle$, și $\boldsymbol{\epsilon}_k$ este polarizarea radiației UVC aplicate. În cele ce urmează se definește $\mathbf{E}_u(R_s) \equiv \hbar\omega_u$ și $\mathbf{E}_d(R_s) \equiv \hbar\omega_d$ ca energiile dintre $|E\rangle$ stare și cele două stări fundamentale, $|G_u\rangle$ și $|G_d\rangle$, respectiv. Aceste energii sunt în apropierea energiilor cuante de excitație ale câmpului aplicat, $\delta_u = \omega_u - \omega_u^k$ și $\delta_s = \omega_s - \omega_s^k$. Operatorii de creare (anihilare), $\hat{b}_k^\dagger$, $\hat{a}_k^\dagger$, $(\hat{b}_k, \hat{a}_k)$, sunt responsabili pentru procesele de excitație și dezexcitare relativ la cele două stări fundamentale descrise de tranziții $|G_u\rangle \leftrightarrow |E\rangle$ și $|G_d\rangle \leftrightarrow |E\rangle$, respectiv. La fel de obișnuit, pentru indicele k repetat de două ori, se ia în considerare sumarea vectorilor de unde fotonice ai câmpurilor pompă și Stokes. Se consideră funcțiile de undă ale electronilor în starea normală și dimer puternic

delocalizate, astfel ca produsul acestor 2 funcții, $|G_u\rangle \equiv \Psi_u(r, R_s)$ și $|G_d\rangle \equiv \Psi_d(r, R_s)$, practic este egală cu zero: $\Psi_d^*(r, R_s)\Psi_u(r, R_s) = 0$, sau $\langle G_d | \dots | G_u \rangle = 0$.

În cele ce urmează, să luăm în considerare situația în care starea excitată, $|E\rangle$, nu are rezonanță cu câmpul UVC extern, prin urmare tranziția între două stări fundamentale, $|G_u\rangle$ și $|G_d\rangle$, are loc virtual prin polarizarea relativă la starea excitată. Procedura de eliminare a subsistemului electronic și acțiunea acestuia asupra renormalizării energetice a poziției potențialului atomic și a limitelor dintre ele.

Conform ilustrațiilor din Fig. 3.1 și Fig. 3.2, putem introduce noile coordonate generalizate de oscilație în raport cu energia minimă a stărilor normale și dimer ale secțiunii ADN în absența câmpului extern. Subliniem că în Fig. 3.2, potențialul drept corespunde stării normale a timinei, iar cel stâng corespunde stării dimer. În absența radiației UVC aceste stări sunt separate, adică $D_0 > |Q|$, și conform acestei situații, inelele nucleelor de timină sunt într-una dintre stările Fock, $|n\rangle_u$ sau $|n\rangle_d$. Primul vector propriu corespunde soluției ecuației oscilatorului $(-\hbar^2 \Delta_Q / (2M_u) + M_u \Omega_u^2 Q^2 / 2) |n\rangle_u = \hbar \Omega_u (n + 0.5) |n\rangle_u$, iar al doilea corespunde unei posibile dimerizări pirimidinice a ADN/ARN după acțiunea câmpului electromagnetic $(-\hbar^2 \Delta_\Theta / (2M_d) + M_d \Omega_d^2 \Theta^2 / 2) |n\rangle_d = \hbar \Omega_d (n + 0.5) |n\rangle_d$. Unde Δ_Q și Δ_Θ sunt operatorii Laplace relativ la $\mathbf{Q} = \mathbf{R}_y - \mathbf{R}_{y0}$ și Q_0 deplasări ale pozițiilor de echilibru ale stărilor normale, $T = A$, și dimer $T = T$.

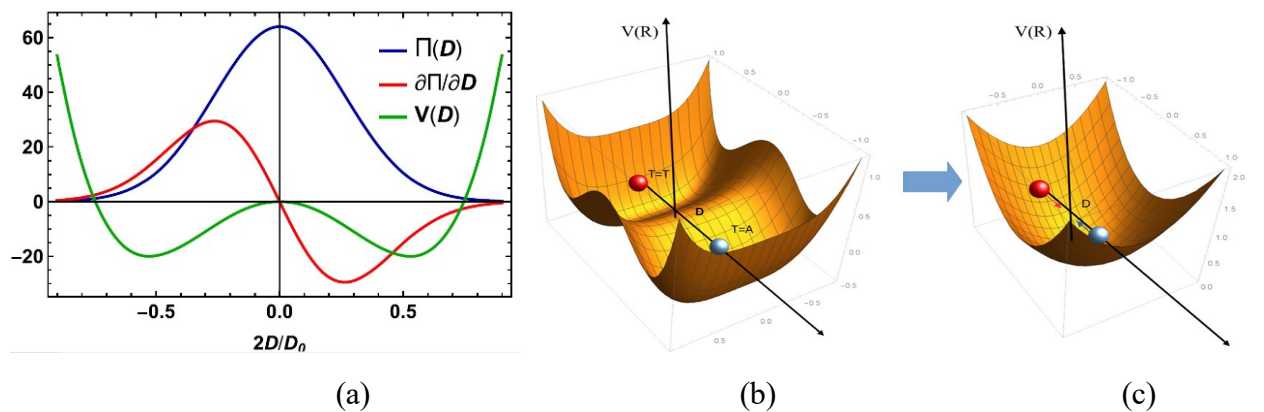


Fig. 3.3 a) Comportarea funcției de polarizare. b) Tranziția de la potențialul dublu godeu la potențialul cu un singur godeu, (c) atunci când câmpul UV-C este intensitatea crescută până la o valoare critică I_c .

În Fig. 3.3 (a), este reprezentat comportarea funcției de polarizare $\Pi(D)$ și a derivatei sale, $\partial\Pi(D)/(\partial D)$, în minime ale potențialului dublu godeu relativ la centru de masă comun pentru starea $M_d = M_u = M_n$. După cum rezultă din această reprezentare, deplasările oscilatorului, Θ_0 și Q_0 , sunt proporționale la funcția derivată, $\partial\Pi(D)/(\partial D)$ și au semnele opuse. Mărimile acestor deplasări, Θ_0 și Q_0 , corespunde maximului și valoarea minimă a derivatei de polarizare în aceste minime. Acum, ar putea apărea o întrebare de genul: Pentru ce intensitate a câmpului aplicat, aceste două stări se pot suprapune? Privind ecuația (3.23), observăm că în aproximarea armonică, două puncte de oscilație pot coincide atunci când $Q_i - Q_{0i} - D_0 = \Theta_i - \Theta_{0i}$. Dacă nucleele din ambele stări au aceeași masă, adică $M_d = M_u = M_n$ și oscilează în direcții opuse de-a lungul D_0 , proiecția expresiei de mai sus pe această direcție devine $Q - \Theta = D_0 - \Theta_0 + Q_0$. Dacă câmpul UVC atinge o valoare critică, $I_c = D_0 / 2k_d$, putem trece la descrierea moleculară a celor două stări localizate conectate, $Q = \Theta$. În această situație, procesul de împrăștiere indus de Raman poate corela dimerul și stările normale ale ADN-ului, descriind acest complex ca o nouă formațiune moleculară pentru care putem introduce coordonatele generalizate comune de-a lungul direcției D_0 așa cum este reprezentată în Fig. 3.2. Pentru a găsi dependența numărului de variatoare în funcție de intensitatea radiației aplicată, este mai bine să comutați de la coordonatele celor două nuclee Q și Θ la una comună pentru ambele potențiale dublu godeu, așa cum se propune în vibrațiile moleculare diatomice [135].

Poziția dimerului de-a lungul direcției D_0 este Θ și poziția stării normale este $Q = D + \Theta$, unde D este distanța dintre dimer și starea normală. Dacă inițial, ambele stări (normală și dimer) ale aceleiași mase, sunt situate la distanță D_0 , centrul de masă în vibrațiile simetrice este situat la distanță $D_0 / 2 = [\Theta M_n + M_n (D + \Theta)] / 2M_n = (2\Theta + D) / 2$ și astfel rezultă că $\Theta = (D_0 - D) / 2$. Poziția de echilibru a stării este reprezentată acum prin diferența dintre D_0 și noua stare localizată $\Theta = (D_0 - D) / 2$ (vezi Fig. 2), la fel $D_0 / 2$ este și poziția centrului de masă dintre două nucleotide de timină/uracil din ADN/ARN, respectiv, care poate fi mai puțin decât $10\text{\AA}$, iar lungimea legăturii de hidrogen în perechile de baze Watson-Crick este de aproximativ 1eV conform [113,114]. În acest caz, Hamiltonianul nucleelor are aspectul potențialului dublu godeu oscilând

în anti fază cu coordonatele vibrației $(D_0 - D)/2$ și $(D + D_0)/2$, vezi Fig. 3.3b. Dacă trecem la coordonatele centrului de masă, $D_0/2$, a sistemului cvasi molecular, se obține coordonatele comune de vibrație, $-\Theta = Q = D/2$ așa cum este reprezentată în Fig. 3.3 (c).

Acum este mai bine să descompunem spectrul cvasi energetic al celor două potențiale de foaie în raport cu centrul de masă $\Pi(0) + D\partial\Pi(0)/\partial D + (D^2/2)\partial^2\Pi(0)/(\partial D)^2 + \dots$. Deoarece $\Pi(D/2)$ este funcție pară, prima derivată din acest punct este egală cu zero, $\partial\Pi(0)/\partial D = 0$. A doua derivată este negativă în maxim, $\partial^2\Pi(0)/(\partial D)^2 < 0$, astfel încât avem renormalizarea frecvențele de vibrație ale potențialului de un singur godeu asupra acțiunii intensității ca $-I\delta_n(D/2)^2$, unde $\delta_n = |\partial^2\Pi(0)/(\partial D)^2|/2$. În jos cvasi energia, frecvența crește după renormalizare, iar în cea superioară frecvența modului comun de dimerul și starea normală scade, iar Hamiltonianul este

$$H^{(n)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_D + \frac{[\mu\Omega_n^2 - \sigma_z I\delta_n/2]D^2}{2} + 2\sigma_z \Pi(0)I + \delta V(D) + \mathbf{E}_0(D_0). \quad (3.13)$$

Aici, deplasările dimerului și stărilor normale depind de intensitatea câmpului aplicat cu $\Omega_n = \sqrt{(\Omega_u^2 + \Omega_d^2)/2}$ și $M_n/2 = \mu$ este masa redusă. Introducerea frecvenței de renormalizare

pentru fiecare foaie, $\Omega_{r_1} = \sqrt{\Omega_n^2 + I\delta_n/(2\mu)}$ pentru foaia inferioară și

$\Omega_{r_2} = \sqrt{\Omega_n^2 - I\delta_n/(2\mu)}$ pentru cea superioară. Dacă neglijăm temperatura de expansiune de

ordin superior în Hamiltonian (3.13), se obțin două soluții pentru oscilatorii armonici cu frecvențe

renormalizate, adică $\Phi_n^{r_i}(D) \otimes |i\rangle$, $i=1,2$. Observăm că acest model de oscilație moleculară

funcționează bine când $D_0/2 = \Theta_0(I_c)$. Dacă intensitatea aplicată câmpul este mai mic decât

valoarea critică, adică $I < I_c$, putem folosi teoria perturbației trecând de la un grad de libertate la

potențial dublu godeu folosind parametrul mic, $I_c - I$. Având în vedere că în acest caz are loc

decuplarea moleculară noi reprezentăm soluția ca o suprapunere descrisă de

$F_n^{r_i}(Q, \Theta) = \Phi_n^{r_i}(Q + |Q_0(I)|, \Theta - \Theta_0(I))$. Pentru $I = I_c$, această funcție coincide cu soluția

oscilatorului armonic, $\Phi_{n'}^{r,i}(D)$. În această situație, este mai bine de reprezentat argumentul noii funcții prin punctul critic,

$$F_{n'}^{r,i}(Q, \Theta) = \Phi_n^{r,i}(Q + |Q_0(I)|,$$

$$\Theta - \Theta_0(I) = F_{n'}^{r,i}(Q + \Theta_0(I_c) - \delta\Theta_0(I), \Theta - \Theta_0(I_c) + \delta\Theta_0(I)), \text{ unde } \delta\Theta_0(I) = \Theta_0(I_c) - \Theta_0(I).$$

Ținând cont de oscilațiile moleculare $Q = (D + D_0)/2$ și $\Theta = (D_0 - D)/2$, se poate observa că în

$$\text{punctul critic față de poziția centrului de masă avem } \delta F(D) = F_{n'}^{r,i}(Q, \Theta)|_I - F_{n'}^{r,i}(Q, \Theta)|_{I_c}$$

reprezentată prin coordonata moleculară D comună după cum urmează

$$\begin{aligned} \delta F(D) &= -\partial F_{n'}^{r,i}(Q, \Theta) / \partial D|_{I=I_c} \delta\Theta_0(I) - \partial F_{n'}^{r,i}(Q, \Theta) / \partial D|_{I=I_c} \delta\Theta_0(I) \\ &= -\partial \Phi_n^{r,i}(D) / \partial D|_{I=I_c} \delta\Theta_0(I). \end{aligned}$$

$$\text{Aici } F_{n'}^{r,i}(Q, \Theta)|_{I_c} = \Phi_n^{r,i}(D) \otimes |i\rangle, \text{ și } \delta\Theta_0(I) = (I_c - I)\beta / (\mu\Omega_n^2) \text{ astfel încât}$$

probabilitatea distorsionării complexului cvasi molecular cu scăderea intensității depinde de

elementul matricei $|\langle \Phi_n^{r,i} | \delta F_{n'}^{r,i} \rangle|^2$ așa cum se citește

$$W_{n,n_1} = \frac{4(I_c - I)^2 \beta^2}{\mu^2 \Omega_n^4} \int dD |\Phi_n^{r,i}(D) \partial \Phi_{n_1}^{r,i}(D) / \partial D|^2.$$

Ținând cont de faptul că operatorul derivatei $\partial / \partial D$ poate fi exprimat prin operatori de anihilare $\hat{v}$ și de creare $\hat{v}^\dagger$, adică $\partial / \partial D = \sqrt{\mu\Omega_n / (2\hbar)}(\hat{v} - \hat{v}^\dagger)$. Prin urmare, se poate calcula cu

$$\text{ușurință elementul matricei, } \langle \Phi_n^{r,i} | (\hat{v} - \hat{v}^\dagger) | \Phi_{n_1}^{r,i} \rangle = \sqrt{\mu\Omega_n / (2\hbar)} \{ \sqrt{n_1} \delta_{n,n_1-1} - n \delta_{n-1,n_1} \}, \text{ și}$$

astfel în cele din urmă probabilitatea devine

$$W_{n,n_1} = \frac{2(I_c - I)^2 \beta^2}{2\hbar\mu\Omega_n^3} (\sqrt{n_1} \delta_{n,n_1-1} - \sqrt{n} \delta_{n-1,n_1})^2. \quad (3.14)$$

Ca rezultat, obținem scăderea pătratică a ratei de dimerizare cu scăderea intensității UVC. Pentru a studia cu atenție acest efect, este plauzibil să se dezvolte abordarea ecuației principale pentru excitația Raman indusă a procesului de dimerizare descris prin interacțiunea hamiltoniană și luând în considerare baia termică a vibrațiilor locale ale nucleelor în limite normale și dimer. În această situație, combinația dintre generarea coerentă de dimeri în procesul Raman și procesul de defazare poate fi descrisă prin tranziția de fază așa cum este subliniată de modelul fenomenologic din Ref. [115]. În secțiunea următoare, estimăm experimental această dependență pătratică de intensitatea ratei de inactivare a coloniilor de ciuperci.

3.3. Eliminarea subsistemului electronic acoperit de câmp UVC împrăștiat

Deoarece suntem interesați de modificarea structurii ADN/ARN prin migrarea legăturilor covalente electronice în timpul Raman împrăștiere, în cele ce urmează eliminăm consecutiv stările virtuale ale subsistemului de electroni. De asemenea, diagonalizăm cel semi clasic Hamiltonian al subsistemelor atomice și electronice care trec la sistemul de coordonate care se rotesc cu frecvența $(E_{G_u} - E_{G_d})/\hbar$. În aproximarea Born-Markov, starea excitată poate fi reprezentată prin stările fundamentale după cum urmează

$$|E(t)\rangle = |E(t)\rangle_0 - \frac{P_u^k g_k}{\hbar(\omega_u - \omega_u^k)} \hat{b}_k^\dagger(t) |G_u(t)\rangle - \frac{P_d^k g_k}{\hbar(\omega_d - \omega_d^k)} \hat{a}_k^\dagger(t) |G_d(t)\rangle. \quad (3.15)$$

Aici $|E(t)\rangle_0$ vectorul propriu al Hamiltonianului liber. După eliminarea stării excitate din interacțiunea hamiltoniană (3.5), se obțin noi părți libere și de interacțiune ale Hamiltonianului complet datorită câmpului aplicat, după cum urmează

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{eff} = & -\hbar\omega_u |G_u\rangle\langle G_u| - \hbar\omega_d |G_d\rangle\langle G_d| + \hbar\omega_u^k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \hbar\omega_d^k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \\ & - \left\{ \frac{P_u^{k'} g_{k'} P_u^k g_k}{\hbar(\omega_u - \omega_u^{k'})} \hat{b}_{k'}^\dagger(t) \hat{b}_k(t) + H.c. \right\} |G_u(t)\rangle\langle G_u(t)| \\ & - \left\{ \frac{P_d^{k'} g_{k'} P_d^k g_k}{\hbar(\omega_d - \omega_d^{k'})} \hat{a}_{k'}^\dagger(t) \hat{a}_k(t) + H.c. \right\} |G_d(t)\rangle\langle G_d(t)|. \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Int}^{eff} = & -\frac{P_u^{k'} g_{k'} P_d^k g_k}{\hbar(\omega_u - \omega_u^{k'})} \hat{b}_{k'}^\dagger(t) \hat{a}_k(t) |G_u(t)\rangle \langle G_d(t)| \\ & -\frac{P_d^{k'} g_{k'} P_u^k g_k}{\hbar(\omega_d - \omega_d^{k'})} \hat{b}_k(t) \hat{a}_{k'}^\dagger |G_d(t)\rangle \langle G_u(t)| + H.c. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Acum, să luăm în considerare în ecuațiile (3.16, 3.17) că câmpul aplicat este o radiație coerentă în bandă largă, atunci intensitățile câmpului pompei și ale câmpului dispersat indus au aceleași mărimi $\langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle \approx \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle$, și sunt centrate aproape de frecvența pompei ω_p . Tranzițiile Raman $\hat{M}^+ = |G_d(t)\rangle \langle G_u(t)|$ și $\hat{M}^- = |G_u(t)\rangle \langle G_d(t)|$ între noile stări sunt descrise de operatorii moleculari, și, care descriu crearea și anihilarea stării dimer, $|G_d\rangle$, în timpul absorbției cuantelor de energie superioară, $\hat{b}_k$, și generarea de Stokes ca unul $\hat{a}_k^\dagger$. Prin urmare, Hamiltonianul efectiv de electroni poate fi scris după cum urmează:

$$\hat{H}^{(e)}(\mathbf{R}, t) = \hbar \tilde{\Omega}_0 \hat{M}_z - \Pi I \left\{ \exp[i\Omega_0 t] \hat{M}^- + \exp[-i\Omega_0 t] \hat{M}^+ \right\}, \quad (3.18)$$

unde $\hbar \tilde{\Omega}_0 = [\mathbf{E}_d(R_s) - \mathbf{E}_u(R_s)]/2$ este diferența de energie dintre energia renormalizată a dimerului și stările fundamentale ale nucleobazelor legate covalent. Operatorii, $\hat{M}_z$, $\hat{M}^+$ și $\hat{M}^-$ satisfac relațiile de comutație, $[\hat{M}^+, \hat{M}^-] = \hat{M}_z$ și $[\hat{M}_z, \hat{M}^\pm] = \pm \hat{M}^\pm$ iar susceptibilitatea de ordinul doi, $\Pi(\mathbf{R}) = P_0^2 / [\hbar(\omega_d - \omega_0)] + P_0^2 / [\hbar(\omega_u - \omega_0)]$ depinde de distanța dintre dimer, $T = T$, și normal, $T = A$, distanța dintre stările $\mathbf{D} = \mathbf{R}_x - \mathbf{R}_y$ (Fig.3.2). După înlocuirea ecuației (3.15) în interacțiunea Hamiltoniană (3.5), se obțin și energiile renormalizate, $\mathbf{E}_d(\mathbf{R}) = -\hbar\omega_d - \Pi_0^d I$ și $\mathbf{E}_u(\mathbf{R}) = -\hbar\omega_u - \Pi_0^u I$. Energia este măsurată din punctul de mijloc, $\mathbf{E}_0(\mathbf{R}) = -\hbar(\omega_d + \omega_u)/2$ între stări $|G_u(t)\rangle$ și $|G_d(t)\rangle$. Polarizările de ordinul doi, $\Pi_0^d = 2P_0^2 / [\hbar(\omega_d - \omega_0)]$ și $\Pi_0^u = 2P_0^2 / [\hbar(\omega_u - \omega_0)]$ și intensitatea câmpului UV-C aplicat, $I = \sum_k g_k^2 \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle$, rezultă din partea hamiltoniană (3.16) prin înlocuirea

coeficienților și frecvențelor câmpului cu valorile lor medii, $P_u^k \approx P_d^k \approx P_0$; $\omega_u^k \approx \omega_d^k \approx \omega_0$. Expresii similare au fost folosite și în partea de interacțiune a Hamiltonianului (3.17). Aici s-a considerat că fotonii împrăștiați și absorbiți din câmpul bimodal al radiației UV-C acționează ca excitație Raman a dimerilor de pirimidină cu frecvența indusă $\omega_d^k - \omega_u^{k'} \approx \Omega_0$, unde $\Omega_0 = \omega_d - \omega_u$ este frecvența de excitare a dimerului fără renormalizare. Intensitatea $I = E_0(\omega_u)E_0(\omega_d)$ poate fi considerată de aceeași mărime ca și intensitatea pentru radiația coerentă în bandă largă. Revenind la subsistemul nuclear, considerăm că în aceste două tipuri de legături covalente participă un conglomerat de atomi care pot forma pirimidină sau alt fel de dimer. Conform aproximării BO, putem reveni la coordonatele subsistemului nuclear, având în vedere că în sistemul inițial nucleele pot avea două godeuri de oscilații: unul corespunde stării normale ADN/ARN și altul localizării dimerului. Prin urmare, Hamiltonianul subsistemului de nuclee citește

$$\hat{H}^{(n)}(\mathbf{R}) = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2M_j} + \mathbf{E}_0(\mathbf{R}). \quad (3.19)$$

Stările normale localizate, $|G_u\rangle$, și dimer, $|G_d\rangle$, trebuie găsite de la minimum poziției acestui sistem cu două niveluri caracterizată prin energia de legătură, $\mathbf{E}_0(\mathbf{R})$, al cărei minim conform abordării B-O în estimarea unei astfel de energii poate fi considerat $\mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0)$, unde conform Fig. 3.2, potențialul conține două minime $\mathbf{R}_0 \equiv \mathbf{R}_{y0}; \mathbf{R}_{x0}$. Conform în această reprezentare, putem introduce noile coordonate de oscilație generalizate relativ la energia minimă a normalului și stări dimer ale secțiunii ADN, $\mathbf{Q} = \mathbf{R}_y - \mathbf{R}_{y0}$ și $\Theta = \mathbf{R}_x - \mathbf{R}_{x0}$ și estima energia de oscilație în raport cu acestea minime situate la distanța $D_0 = |\mathbf{R}_{y0} - \mathbf{R}_{x0}|$. În literatură, se constată că $|\mathbf{R}_{y0}| \sim 10 \text{ \AA}$, reprezentând poziția lui $T = A$ poziția legăturii față de unul din fiecare fir și $|\mathbf{R}_{0x}|$ este mai mică decât distanța dintre două baze consecutive, adică $3.4 \text{ \AA}^\circ$ (vezi Fig. 1B). Distanța, D_0 , conform literaturii [114] poate fi mai mică de $10^\circ \text{ \AA}$. În Ec. (3.19), se poate introduce potențialul funcția, $\hat{V}(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s0}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{R}) - \hat{\mathbf{E}}_0(\mathbf{R}_0)$,

$s = x, y$ care se descompune în final în seria Taylor ca $\hat{V}(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s0}) = [\hat{Q}_j^2 \partial^2 V(0) / (\partial Q_j^2) + \hat{\Theta}_l^2 \partial^2 V(0) / (\partial \Theta_l^2)] / 2$. Aici au fost neglijăți termenii de ordinul întâi, având în vedere că în lipsa celui câmp extern se folosește proprietatea simetriei, $V(-x) = V(x)$, iar termenii de ordin superior sunt incluși în $\delta\hat{V}(Q, \Theta)$, studiată în special în Ref. [115]. Ca rezultat al acestor transformări, se obține Hamiltonianul pentru nuclee într-o nouă formă

$$\hat{H}^{(n)}(\mathbf{R}) = \frac{\hat{P}_u^2}{2M_u} + \frac{M_u \Omega_u^2 \hat{Q}^2}{2} + \frac{\hat{P}_d^2}{2M_d} + \frac{M_d \Omega_d^2 \hat{\Theta}^2}{2} + \delta\hat{V}(Q, \Theta) + \mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0), \quad (3.20)$$

unde $M_u \Omega_u^2 = \partial^2 V(0) / (\partial Q_j^2)$ și $M_d \Omega_d^2 = \partial^2 V(0) / (\partial \Theta_l^2)$, aici $M_u (M_d)$ și $\Omega_u (\Omega_d)$ sunt masa efectivă a nucleului și frecvența de oscilație, respectiv, în localizarea normală (dimer). Influența câmpului UV-C aplicat asupra vibrațiilor excitația nucleară ne permite să descriem funcția de undă a nucleelor ca stare spinor

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |\chi(\mathbf{R})\rangle = \left(\hat{H}^{(n)}(\mathbf{R}) + \hat{H}^{(e)}(\mathbf{R}, t) \right) |\chi(\mathbf{R})\rangle, \quad (3.21)$$

unde vectorul „ket”, $|\chi(\mathbf{R})\rangle$, este un conjugat hermitian al celui „bra”, care este definit ca un vector linie cu două componente ale stărilor electronice, adică $\langle \chi(\mathbf{R}) | = (\chi_1(\mathbf{R}), \chi_2(\mathbf{R}))$.

În Ec. (3.21), $\hat{H}^{(e)}$ este Hamiltonianul efectiv de electroni (3.18), care poate fi redus la stările staționare ale cvasi energiilor în sistemul de coordonate care se rotește cu frecvența Ω_0 prin

divizarea a două stări corespunzătoare dimerului și ADN/ARN normal, adică $H^{(e)} = \hbar \bar{\Omega} U_z$.

Aici, frecvența dinamică de împărțire Stark este definită ca $\bar{\Omega} = \sqrt{(\tilde{\Omega}_0 - \Omega_0)^2 + 4(\Pi / \hbar)^2}$.

Prin urmare, se observă că câmpul extern îmbunătățește 'tunelarea' din starea normală, $|G_u\rangle$ la cea dimer de pirimidină, $|G_d\rangle$, datorită faptului că Frecvența Rabi crește proporțional cu intensitatea câmpului UVC aplicat. Acest efect va fi notabil dacă se consideră că energiile $\hbar\omega_u$ și $\hbar\omega_d$ sunt mici în comparație cu energiile normalizate, astfel încât polarizările de ordinul doi pot fi approximate după cum urmează:

$$\Pi_0^d = 2P_0^2 / [\mathbf{E}_0 + \hbar\Omega_0 / 2 - \hbar\omega_0] \approx 2P_0^2 / [\tilde{\mathbf{E}}_0 - \hbar\omega_0] - \hbar\Omega_0 / (\mathbf{E}_0 - \hbar\omega_0)^2 \text{ și}$$

$$\Pi_0^u = 2P_0^2 / [\mathbf{E}_0(\mathbf{R}) - \hbar\Omega_0 / 2 - \hbar\omega_0] \approx 2P_0^2 / [\mathbf{E}_0(\mathbf{R}) - \hbar\omega_0] + \hbar\Omega_0 / (\mathbf{E}_0(\mathbf{R}) - \hbar\omega_0)^2.$$

În această situație, energia de divizare reprezentată de primul termen al hamiltonianului (3.18) este proporțională cu schimbarea Stark, $\hbar\Omega_0 P_0^2 I / (\mathbf{E}_0(\mathbf{R}) - \hbar\omega_0)^2$. Ca element de matrice de polarizare, $P_0(D)$, descrie tranziția între starea normală deplasată, $T = A$ și dimer, $T = T$, și cea excitată, ultima expresie arată că creșterea intensitatea, I , a radiației aplicate, va amplifica energia de divizare între stările normale și dimer, deci deplasându-le. Ultima dependenta demonstrează modificarea barierei de potențial în procesul adiabatic sub acțiunea radiațiilor UV-C, deci îmbunătățirea tunelului de electroni de la starea normală la una dimer.

Având în vedere că energia de scindare legată de tranziția Raman este mai mare decât energia locală a fiecărui oscilator normal sau dimer, adică $\Omega_0 \gg \{\Omega_u, \Omega_d\}$, deci putem merge la sistemul de coordonate care se rotește cu Ω_0 Hamiltonianul din ecuația (3.21), adică, $\exp[i\Omega_0 \hat{M}_z t](\hat{H}^{(n)}(\mathbf{R}) + \hat{H}^{(e)}(\mathbf{R}, t)) \exp[-i\Omega_0 \hat{M}_z t]$. În această situație, partea de interacțiune a electronilor independentă de timp a Hamiltonianului, $-\Pi I_0(\hat{M}^- + \hat{M}^+)$, se obține aplicând aproximarea BO, care concluzionează că în timpul rotației cu frecvență rapidă, Ω_0 , partea nucleară a Hamiltonianului, $\hat{H}^{(n)}(\mathbf{R})$, nu este afectată. Pentru simplitate, putem considera că frecvențele și masa nucleară a ambelor oscilatoare au aceleași mărimi, adică folosind aproximarea $\Omega_u \approx \Omega_d$ și $M_u \approx M_d$ în reprezentarea lui ecuația staționară Schrödinger (3.21), care se reduce la

$$0 = \begin{bmatrix} \hat{H}_0(\mathbf{R}) + \hbar(\tilde{\Omega}_0 - \Omega_0) / 2 - \mathbf{E} & \Pi I \\ \Pi I & \hat{H}_0(\mathbf{R}) - \hbar(\tilde{\Omega}_0 - \Omega_0) / 2 - \mathbf{E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi_1(\mathbf{R}) \\ \chi_2(\mathbf{R}) \end{bmatrix},$$

și din care urmează energia celor două stări de scindare

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{1,2}(I) = & \frac{\hat{P}_u^2}{2M_u} + \frac{M_u \Omega_u^2 \hat{Q}^2}{2} + \frac{\hat{P}_d^2}{2M_d} + \frac{M_d \Omega_d^2 \hat{\Theta}^2}{2} \\ & + \mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0) \mp \frac{\hbar}{2} \sqrt{(\tilde{\Omega}_0 - \Omega_0)^2 + 4(\Pi(\mathbf{R})I / \hbar)^2}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Pentru simplitate, considerăm că $M_n = M_u = M_d$, și $\Omega_n = \Omega_d$. Ca rezultat, având în vedere abordarea $\tilde{\Omega}_0 - \Omega_0 \approx \Omega_0 P_0^2 I / (\mathbf{E}_0 - \hbar \omega_0)^2$, și pentru deracordarea mică, $\tilde{\Omega}_0 - \Omega_0 \ll 2\Pi I_0$, energia oscilatorului cu două godeuri se reduce la expresia, $\mathbf{E}_{1,2}(I) \approx \hat{H}_0(\mathbf{R}) \mp \Pi(\mathbf{Q})I$. Aici s-a considerat că energia de tranziție satisface condiția: $\hbar \Omega_0 < (\mathbf{E}_0 - \hbar \omega_0)$. În această situație, susceptibilitatea depinde de coordonatele oscilatorului $\Pi(\mathbf{Q})$, și poate fi descompusă în seria Taylor, $\Pi(\mathbf{Q}, \Theta) \approx \Pi(\mathbf{R}_{y0}, \mathbf{R}_{x0}) + (\mathbf{Q}, \partial \Pi(\mathbf{R}_{x0}, \mathbf{R}_{y0}) / \partial \mathbf{R}_{y0}) + (\Theta, \partial \Pi(\mathbf{R}_{x0}, \mathbf{R}_{y0}) / \partial \mathbf{R}_{x0}) + \dots$ Ținând cont că în modelul nostru simplificat, polarizarea, $\Pi(\mathbf{R}_{y0}, \mathbf{R}_{x0}) = \Pi(\mathbf{D}_0)$, conține modurile oscilatorii în două godeuri cuantice cu moduri normale, $\mathbf{Q}$, pentru stare normală și Θ , pentru dimerul ADN sau ARN, separate prin distanță, $\mathbf{D}_0 = \mathbf{R}_{y0} - \mathbf{R}_{x0}$, putem observa că $\partial \Pi(\mathbf{D}_0) / \partial \mathbf{R}_{y0} = -\partial \Pi(\mathbf{D}_0) / \partial \mathbf{R}_{x0}$, în cazul aceleiași mase de atomi în dimer și vibrații în stare normală. În această situație obținem că câmpul extern deplasează punctul de oscilație al fiecărei cvasi-energii de stare covalentă:

$$V_1 = [M_u \Omega_u^2 Q^2 + M_d \Omega_d^2 \Theta^2] / 2 - 2I\alpha_i Q_i - 2I\beta_i \Theta_i - 2\Pi(D_0)I + \mathbf{E}_0(\mathbf{Q}),$$

$$V_2 = [M_u \Omega_u^2 Q^2 + M_d \Omega_d^2 \Theta^2] / 2 + 2I\alpha_i Q_i + 2I\beta_i \Theta_i + 2\Pi(D_0)I + \mathbf{E}_0(\mathbf{Q}).$$

Aici are loc suma i pe coordonatele carteziane, x , y și z . Parametrii sunt componentele gradientului din descompunerea de mai sus $\alpha_i = \partial \Pi(D_0) / \partial R_{y0i}$ și $\beta_i = \partial \Pi(D_0) / \partial R_{y0i}$. Acum, transformând energia puțului de potențial într-o formă pătratică, se obține

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{\hat{P}_u^2}{2M_u} \hat{1} + \frac{\hat{P}_d^2}{2M_d} \hat{1} + M_u \Omega_u^2 (\mathbf{Q} \hat{1} + \sigma_z \mathbf{Q}_0)^2 - M_d \Omega_d^2 (\Theta \hat{1} + \sigma_z \Theta_0)^2 / 2 \\ = & -2I^2 \left[\frac{\alpha^2}{M_u \Omega_u^2} + \frac{\beta^2}{M_d \Omega_d^2} \right] \hat{1} + \sigma_z 2I\Pi(D_0) + \delta \hat{V}(Q, \Theta) \hat{1} + \mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0) \hat{1}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

unde $\mathbf{Q}_0 = 2I\alpha / (M_u \Omega_u^2)$ și $\mathbf{\Theta}_0 = 2I\beta / (M_d \Omega_d^2)$ și $\sigma_z = |2\rangle\langle 2| - |1\rangle\langle 1|$ și $\hat{1} = |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 1|$ sunt matrici tradiționale sigma -_z Pauli și identitate care iau în considerare deplasarea opusă a modurilor oscilatorului în două foi numerotate de cea inferioară "1" și de cea superioară "2". Pentru foaia inferioară, neglijând descompunerea potențialului de ordin superior, $\delta\hat{V} = 0$, obținem soluțiile pentru oscilatorii deplasați, $|\chi_1(\mathbf{R})\rangle \sim \Phi_n^u(\mathbf{Q} - \mathbf{Q}_0)\Phi_{n'}^d(\mathbf{\Theta} - \mathbf{\Theta}_0) \otimes |1\rangle$ iar pentru foaia superioară de potențial cu dublu godeu soluția este $|\chi_2(\mathbf{R})\rangle \sim \Phi_n^u(\mathbf{Q} + \mathbf{Q}_0)\Phi_{n'}^d(\mathbf{\Theta} + \mathbf{\Theta}_0) \otimes |2\rangle$, unde $\Phi_n(Z_i - Z_{0i})$ funcțiile proprii ale oscilatoarelor armonice tradiționale sunt deplasate de câmp, Z_{0i} relativ la poziția de echilibru în absența radiației, $Z_i \equiv Q_i$ sau Θ_i , $i = x, y, z$. Având în vedere că inițial sistemul este pregătit într-o stare normală, $|\chi_1(\mathbf{R})\rangle = |1\rangle$, trecerea de la stările normale la stările dimer este descrisă prin element de matrice, $\sigma^+ = |2\rangle\langle 1|$.

3.4. Concluzii la capitolul 3

Aproximația Born-Oppenheimer este un principiu fundamental în mecanica cuantică moleculară, utilizat pentru separarea mișcării nucleelor și electronilor într-un sistem molecular. Aceasta este esențială în studiul interacțiunii dintre radiația UV-C și ADN, în special în procesul de dimerizare a bazelor pirimidinice (timina și citozina). Observăm că intensitatea câmpului UV-C aplicat schimbă poziția nucleelor în timpul procesului de împrăștiere stimulând tunelarea unui electron de la un puț de potențial la altul. Acest efect corespunde excitării coerente a vibrațiilor nucleelor în raport cu stările localizate staționare, rezultând astfel transformarea și modificarea ADN-ului sub radiația UV-C. Pentru explicarea inactivării patogenilor prin radiație UV-C împrăștiată, unde se elimină coerent subsistemul electronic, s-a introdus aproximarea aproximația Born-Markov. Astfel, aproximația Born-Markov descrie felul cum are loc inactivarea patogenilor prin eliminarea coerentă a subsistemului electronic prin care radiația UV-C împrăștiată inactivează eficient microorganismele.

4. APLICAREA CANALELOR DE ROTAȚIE PENTRU DECONTAMINAREA AGENȚILOR PATOGENI ÎN METAMATERIALE PENETRATE DE RADIAȚII UVC

4.1. Aspecte ale interacțiunii agenților patogeni cu metamateriale penetrate UVC.

O direcție de cercetare din domeniul interacțiunii agenților patogeni cu metamateriale penetrate UVC este atribuită similitudinilor dintre câmpul evanescent ce apare la propagarea unei electromagnetice prin fibra optică și biomolecule. Unda evanescentă sau câmpul evanescent, este un câmp electric și/sau magnetic oscilant care nu se propagă în spațiu asemenea unei unde electromagnetice, energia căreia este concentrată spațial în vecinătatea sursei (sarcini și curenți oscilatori). În optică, undele evanescente se apar în urma propagării undelor electromagnetice într-un mediu precum fibră optică, cavități etc., care suferă o reflexie internă totală la limita acestuia. În Fig. 4.1 este ilustrată unda evanescentă ce apare în jurul unei fibre optice, la propagarea unei electromagnetice printr-o fibră optică. Toate razele care sunt incidente la un capăt al fibrei sub un unghi mai mic decât (unghi de acceptanță), cărui îi corespunde un unghi de refracție, se propagă de-a lungul miezului fibrei în urma unor reflexii totale interne repetate pe interfața miez-înveliș. Amplitudinea câmpurilor evanescente scade exponențial cu distanța de la interfață și în mod normal acestea nu se pot propaga în mediul cu indice de refracție mai mic. Ca urmare, o parte din puterea undelor se pierde determinând o atenuare mai mare. Deoarece undele electromagnetice lovesc la un unghi mai mare decât unghiul critic, unde energia câmpului evanescent este concentrată în vecinătatea imediat următor de la suprafața de separație miez-înveliș.

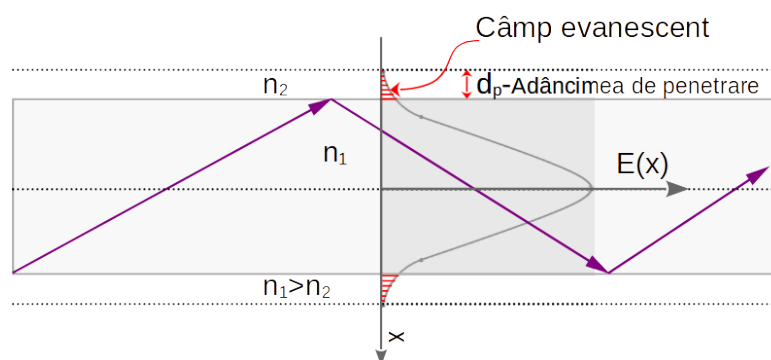


Fig. 4.1 Zona de evanescență formată la interfața miezului unei fibre optice din cuarț la propagarea unei electromagnetice prin ea.

Reieșind din definiția noțiunii termenului de evanescență, ceea înseamnă "dispariție lentă", se poate de spus ca aceasta zonă de evanescență este de dimensiuni foarte mici de ordinul $\lambda/2$ în comparație cu lungimea de undă incidentă. Explicația Mecanicii cuantice în privința câmpului

evanescent este dată de condiția continuității la limite. Astfel, câmpul evanescent asigură efectul de „tunelare a undei”, care este similar efectului de tunelare a unei particule prin bariera de potențial.

4.2. Captarea și manipularea biomoleculelor sub acțiunea câmpului optic evanescent.

Folosirea luminii pentru manipularea mediului înconjurător a devenit, în ultimele decenii, esențială în știință și medicină. În acest domeniu se acordă o atenție deosebită fenomenului de captare a biomoleculelor. Detectarea împrăștierei optice și a forțelor de gradient asupra particulelor de dimensiuni micronice a fost raportată pentru prima dată, în 1970, de Arthur Ashkin [118]; ulterior, împreună cu colegii săi, el a raportat prima observație a ceea ce numim astăzi pensetă optică.

În microbiologie și biofizică, penseta optică a devenit un instrument esențial pentru studiul și manipularea particulelor (bio) într-un mediu apos. Captarea particulelor în medii lichide, utilizând câmpul evanescent al unui ghid de undă cu diametru de scară micronică, a fost demonstrată ulterior [119]; atât particulele dielectrice, cât și cele metalice pot fi prinse și deplasate de câmpul evanescent de-a lungul canalului ghidului de undă. Această tehnică permite controlul fluxurilor de lumină și de fluid într-un mediu biocompatibil, fiind capabilă să manipuleze particule dielectrice de dimensiuni nano- și micro-metriche, și chiar atomi individuali, prin aplicarea unor forțe extrem de mici generate de un fascicul laser foarte bine focalizat [120].

Captarea optică depinde de dimensiunea particulei prinse în raport cu lungimea de undă a luminii utilizată pentru a o capta. Dacă lungimea de undă a luminii depășește cu mult dimensiunile particulelor, particulele pot fi tratate ca dipoli electrici într-un câmp electric, unde condițiile pentru împrăștierea Rayleigh sunt îndeplinite și particula poate fi tratată ca un dipol punctual într-un câmp electromagnetic neomogen. Forța aplicată unei singure sarcini într-un câmp electromagnetic este cunoscută sub denumirea de forță Lorentz care este :

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E}(\mathbf{x}) + \frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} \right).$$

Odată ce polarizarea unui dipol este $\mathbf{p} = q\mathbf{d}$, unde d este distanța dintre două sarcini.

Pentru un dipol punctual, distanța $x_1 - x_2$. Forța asupra dipolului poate fi calculată înlocuind doi

termeni pentru câmpul electric din ecuația de mai sus, câte unul pentru fiecare sarcină. Ținând cont de faptul că cele două sarcini au semne opuse, forța ia forma:

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= q \left(\mathbf{E}(\mathbf{x}_1) - \mathbf{E}(\mathbf{x}_2) + \frac{d(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{dt} \times \mathbf{B} \right) = \\ &= q \left(\mathbf{E}(\mathbf{x}_1) + ((\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \cdot \nabla) \mathbf{E} - \mathbf{E}(\mathbf{x}_1) + \frac{d(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{dt} \times \mathbf{B} \right).\end{aligned}$$

Înmulțind cu sarcina q și transformând poziția $\mathbf{x}$, în polarizare $\mathbf{p}$ se obține

$$\mathbf{F} = (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{E} + \frac{d\mathbf{p}}{dt} \times \mathbf{B} = \alpha \left[(\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} + \frac{d\mathbf{E}}{dt} \times \mathbf{B} \right],$$

unde în a doua egalitate, s-a presupus că particula dielectrică este liniară, unde polarizarea $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}$. În cele din urmă, se vor folosi două egalități: (1) o egalitate de analiză vectorială, și (2) legea inducției lui Faraday.

$$1. (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} = \nabla \left(\frac{1}{2} E^2 \right) - \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E})$$

$$2. \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

În primul rând, egalitatea vectorială va fi inserată pentru primul termen în ecuația forței de mai sus. Ecuația lui Maxwell va fi înlocuită cu al doilea termen în egalitatea vectorială. Apoi cei doi termeni care conțin derivate în timp pot fi combinați într-un singur termen [121].

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \alpha \left[\frac{1}{2} \nabla E^2 - \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \times \mathbf{B} \right] \\ &= \alpha \left[\frac{1}{2} \nabla E^2 - \mathbf{E} \times \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \times \mathbf{B} \right] \\ &= \alpha \left[\frac{1}{2} \nabla E^2 - \frac{d}{dt} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \right].\end{aligned}$$

Al doilea termen din ultima egalitate este derivata în timp a unei mărimi care este legată printr-o constantă multiplicativă de vectorul Poynting, care descrie puterea pe unitate de suprafață care trece printr-o suprafață. Deoarece puterea laserului este constantă la eșantionarea pe frecvențe mult mai lungi decât frecvența luminii laserului $\sim 10^{14} \text{ Hz}$, derivata acestui termen este în medie la zero și forța conform autorilor [122] poate fi scrisă ca:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \alpha \nabla E^2 = \frac{2\pi n_1 a^3}{c} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) \nabla I(\mathbf{r}),$$

unde în a doua parte a expresiei de mai sus am inclus momentul dipol indus (în unități MKS) al unei particule dielectrice sferice: $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 4\pi n_1^2 \epsilon_0 a^3 (m^2 - 1) / (m^2 + 2) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, unde α este raza particulei, n_0 este indicele de refracție al particulei și $m = n_0 / n_1$ este indicele de refracție relativ dintre particulă și mediu. Pătratul mărimii câmpului electric este egal cu intensitatea fasciculului în funcție de poziție. Prin urmare, rezultatul indică faptul că forța asupra particulei dielectrice, atunci când este tratată ca un dipol punctual, este proporțională cu gradientul de-a lungul intensității fasciculului. Cu alte cuvinte, forța gradientului descrisă aici tinde să atragă particula în regiunea de cea mai mare intensitate. În realitate, forța de împrăștiere a luminii lucrează împotriva forței de gradient în direcția axială a capcanei, rezultând o poziție de echilibru care este deplasată ușor în aval de intensitatea maximă. Sub aproximarea Rayleigh, putem scrie și forța de împrăștiere ca:

$$\mathbf{F}_{imp}(\mathbf{r}) = \frac{k^4 \alpha^2}{6\pi c n_0^3 \epsilon_0^2} I(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}} = \frac{8\pi n_0 k^4 a^6}{3c} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right)^2 I(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}.$$

Deoarece împrăștierea este izotropă, impulsul net este transferat în direcția înainte. La nivel cuantic, ne imaginăm forța gradientului ca o împrăștiere Rayleigh înainte în care fotoni identici sunt creați și anihilați concomitent, în timp ce în forța de împrăștiere (radiație), fotonii incidenti călătoresc în aceeași direcție și se „împrăștie” izotrop. Prin conservarea impulsului, particula trebuie să acumuleze impulsul inițial al fotonilor, provocând o forță înainte în acesta din urmă. [123]

4.3. Creșterea ratei de decontaminare a soluțiilor infectate cu ajutorul metamaterialelor compozite de forme geometrice diferite.

Eficiența inactivării agentului patogen a fost investigată în Ref. [124] în ceea ce privește doza UVC, distanța de separare și poziția unghiulară pe suprafață. Analizele făcute se concentrează pe fabricarea unei noi clase de echipamente bazate pe structuri metamateriale compozite, de la nivel micro până la nano, prin exploatarea zonei de contact optic dintre elementele metamateriale proiectate cu diferite dimensiuni structurale. Această combinație de elemente subțiri și groase ale metamaterialelor compozite poate îmbunătăți drastic suprafața de contact cu fluidele/suprafețele solide ale obiectelor contaminate. Pentru a îmbunătăți suprafața de contact

dintre agenți patogeni și radiațiile UVC, am folosit o combinație de elemente metamateriale, cum ar fi sfere și fibre întregi sau zdrobite, în aranjamentele de ambalare. În așa fel elementele mari permit radiației UVC să traverseze o distanță mare în interiorul lichidelor contaminate, în timp ce cele mici care ocupă spațiul liber dintre ele sunt capabile să asigure dispersia optimă a radiațiilor în volume mari, așa cum se confirmă atunci când se utilizează elemente de cuarț zdrobite (Fig.4.1).

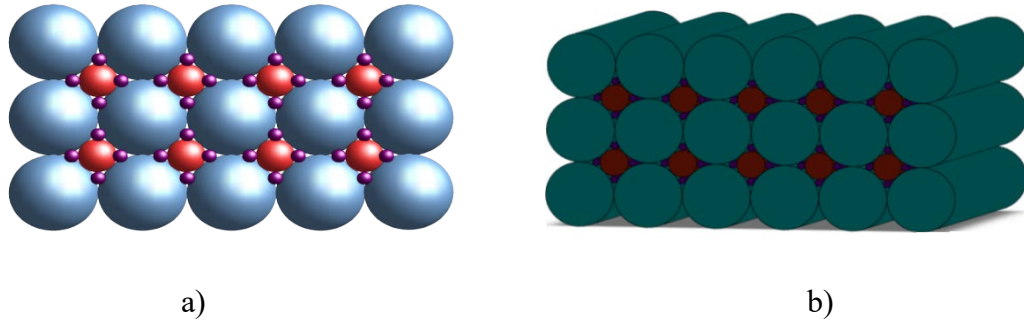
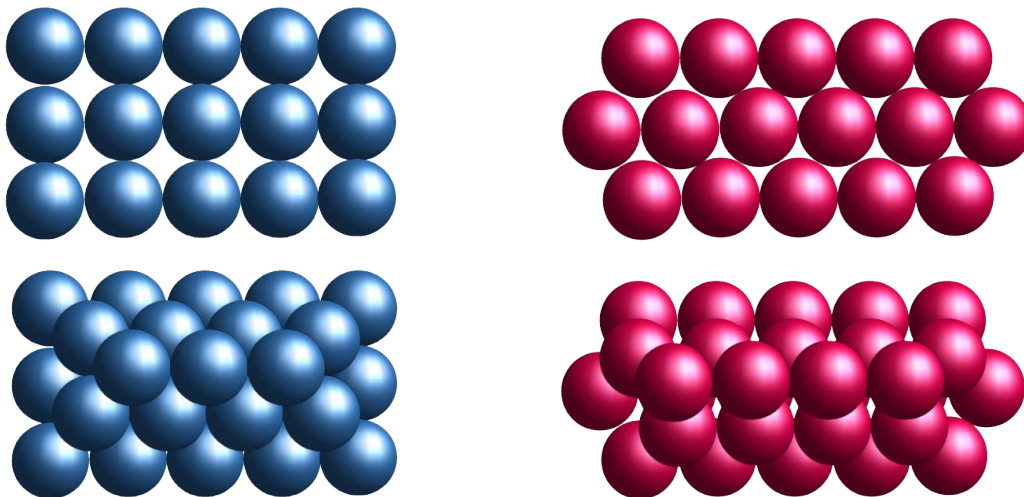


Fig.4.2 a) Împachetare bile mici/mari (a), respectiv fibre(b)

4.3.1. Împachetări de elemente cu geometrii sferice

Spațiul liber dintre sferele mari de cuarț poate fi descris printr-un factor de umplere, care este o funcție a structurii de ambalare a metamaterialelor, $V_f = V(1 - \rho)$, unde V_f este volumul liber dintre sfere, V este volumul total și ρ densitatea celulei, care depinde de structura de împachetare a metamaterialului. În cazul bilelor din cuarț aranjate hexagonal Fig. 4.2(b) densitatea este $\rho = \pi / (3\sqrt{3}) = 0,6086$, care este superioară împachetării rețelei tetraedrice Fig. 4.2(a), pentru care $\rho = (\pi\sqrt{3}) / 16 = 0,3401$. Aceasta înseamnă că volumul liber în cazul ambalajului tetragonal este mai mare decât în acel hexagonal.



a)

b)

Fig. 4.3. a) Mod de aranjare bile tetraedric b) aranjare bile hexagonal

Conform datelor din Ref. [125], în ceea ce privește eficiența de decontaminare a suprafeței de contact dintre metamateriale ca cristale fotonice sau fibre, opțiunea noastră a fost să folosim o combinație de elemente metamateriale, cum ar fi sfere și fibre întregi sau zdrobite, într-un aranjament de împachetare strâns. Se dorește fabricarea unui material adecvat, atât pentru a asigura o bună penetrare a radiației UV-C în elementele metamaterialului, cât și o propagare ușoară prin fluidele contaminate. Apoi se calculează, pe această bază, volumul efectiv de decontaminare care este proporțional cu suprafața de contact dintre fluidul contaminat și metamateriale (sfere întregi sau fragmente de sfere) în aranjamentul respectiv (ambalaj).

Este în general acceptat că adâncimea de penetrare, k în interiorul spațiului liber dintre sfere este direct proporțională cu lungimea de undă a radiației și invers proporțională cu diferența dintre indicii de refracție ai metamaterialului, n_m și fluidul contaminat n_f . În așa caz k poate fi scris ca: $k = \lambda / \left[2\pi \sqrt{(n_m^2 - n_f^2)} \right]$. Rezultă că volumul efectiv este $V_u = kS$ unde S reprezintă suprafața de contact a metamaterialului cu fluidul contaminat. Acest volum se menține inferior volumului liber dintre sfere, V_f . Relația dintre diametrul sferei D , iar suprafața totală a sferelor poate fi scrisa astfel: $S = pD^2N$, unde N reprezintă numărul total de sfere. Dacă se consideră L_i , unde $i = (x, y, z)$ o direcție în spațiu, volumul $V = L_x L_y L_z$ este completat cu, $N_i = L_i/D$ care este numărul de sfere în fiecare direcție, cumulând un total de sfere din celula lui unde numărul $N = N_x N_y N_z$. Acest număr este proporțional cu volumul: $N \sim V/D^3$. Volumul efectiv de decontaminare din jurul sferelor împachetate este proporțional cu adâncimea de penetrare, $\kappa \sim \lambda$ și invers proporțional cu diametrul sferei, $V_u \sim V\lambda/D$. în cazul sferelor cu diametru mai mic $V_{fi} = V(1 - \rho)^{(i-1)}$, în cazul sferelor cu diametru mai mic D_{i-1} . Opțiunea de a recurge la sfere mici nu este totuși adecvată pentru decontaminarea fluidelor. Pe de o parte, frecarea și rezistența lichidului între boabe cresc odată cu reducerea dimensiunilor. Pe de altă parte, radiația UVC suferă reflexii multiple pe suprafețele de contact dintre sferele mici. Prin urmare, propunem o procedură de ambalare cu structuri care combină sfere mari și mici. În acest sens, trebuie mai întâi identificate rezonanțe dintre modurile de galerie ale undelor în cazul celor două sfere de diametre diferite, în Fig. 4.4a respectiv 4.4b. În cazul sferelor cu diametrul de ordine al $D_3 = D_1(2 - \sqrt{3})$, rezonanța

este atinsă practic pentru orice dimensiune a sferelor (Fig. 4.3.4 c). Schema sferelor mari cu diametrul D_1 cu un spațiu între ele umplute cu sfere de diametru $D_2 = K$, iar sfere mai mici cu un diametru $D_3 = K^2$ care umple spațiul dintre sferile cu diametrul D_2 . Umplerea spațiului liber poate fi continuată până când împachetarea sferelor mai mici atinge diametrul $D_n = K^{n-1}$

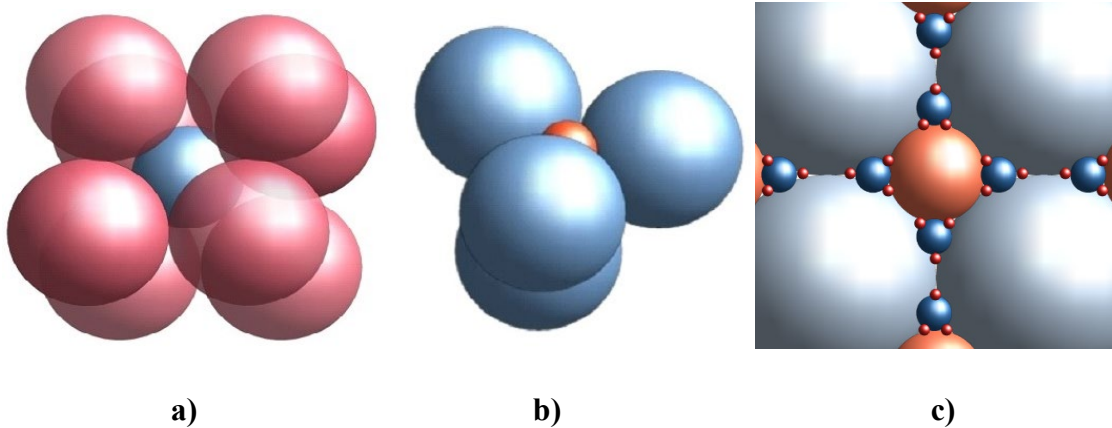


Fig. 4.4. (a) Împachetarea sferelor mici între cele mari într-un aranjament cubic; (b) Ambalarea sferelor mici în celule cu rețea tetragonală; c) rețea tetragonală parte din aranjament cubic

Rezonanța dintre sistemele micro de diferite dimensiuni devine posibilă ori de câte ori unda luminoasă este considerată în picioare (în interiorul propriilor stări cuantice). Pentru a extinde și mai mult suprafața de contact, se poate umple spațiul liber dintre sferile mai mici. Suprafața totală a rețelei cubice de ordin i^{D_i} se considera numărul de aranjamente ale bilelor de diferite diametre obținut la suplinirea spațiului liber dintre bile mari cu bile mici în volumul liber ce rămâne. Drept urmare suprafața totală rețelei capătă forma: $S_i = 4\pi V_{fi} / D_i$. În aceasta relație, $V_{fi} = V(1 - \rho)^{(i-1)}$ reprezintă volumul liber rămas după introducerea sferelor cu un diametru D_i . Diametrul sferelor de tip D_i este legat de una dintre sferile " $i-1$ " prin relația $D_i = K^{-1}D_{i-1}$. Aici, K^{-1} este un parametru de ordine mai mic decât unitatea. Dacă se introduce un al doilea tip de sfere în spațiul liber al unei rețele cubice, expresia pentru suprafața totală este: $S = S_1 + S_2$. În aceasta expresie, termenii $S_1 = \pi D_1^2 N$ și $S_2 = \pi(\sqrt{3} - 1)^2 D_1^2$ sunt suprafața totală a sferelor mari și mici plasate în cele două rețele cu același număr de noduri, N , în contact optic. Se observă că sferile mici cu diametrul $D_2 = (\sqrt{3} - 1)D_1$ sunt plasate în centrul cuburilor celei mari, dar fără contact direct, iar

în acest caz, $K = 1/(\sqrt{3}-1)$. Suprafața totală în contact cu fluidul contaminat $S = \pi D_1^2 N(5-2\sqrt{3})$ crește cu $0.56S_1$ în raport cu metamaterialul format din sfere împachetate de același diametru.

Se poate continua să se plaseze sfere din ce în ce mai mici în interiorul structurii cubice. Sferele sunt introduse pe fiecare față a cubului, în timp ce împachetarea începe din centrul cubului. Distanța dintre sferele mici (cu un diametru D_3) și sferele mari cu un diametru D_1 a fost estimată a fi $D_3^* = D_1(\sqrt{2}-1)$. Acesta distanța D_3 ușor se calculează, nu este altceva decât $D_3^* = D_1(2-\sqrt{3}) \sim 0.28D_1$ ceea ce este în consecință inferioară diametrului lui $D_3 \sim 0.4D_1$. Prin urmare, se pot introduce sfere mai mici pe fața cubului cu doar două contacte optice cu sferele cu diametrul $D_3 = D_1 - D_2$ și distanța dintre patru sfere mari D_3^* . Este ușor de observat că sferele mici se mențin instabile în această configurație de ambalare și se pot relaxa în patru puncte ale volumului liber în contact cu sferele mari. Este totuși posibil să se ajungă la o construcție periodică stabilă dacă se implementează în configurația de ambalare un elipsoid de rotație cu axele mari și mici, după cum urmează $(D_3^*, D_3) = (D_1(2-\sqrt{3}), D_1(2-\sqrt{3}))$ respectiv. Suprafața totală de contact cu fluidele crește substanțial la $S = S_1 + S_2 + S_3$ cu trei sfere mici în orice celulă elementară, devine $S_3 = 3\pi ND_3^2 = 3\pi ND_1(7-4\sqrt{3})$. Pentru a spori rata de decontaminare, este dorit să se utilizeze sfere cu un diametru de 5-10 ori mai mic decât distanța dintre cele cu sferele mari și să se evalueze suprafața totală de contact cu fluidele contaminate. Dacă ulterior s-a împachetat " n " specii de ordin mai mic în spațiul liber dintre sferele mari, o zonă totală de contact extinsă S_m , este asigurată cu fluidul contaminat după cum urmează:

$$S_m = S_1 + S_2 + \dots + S_n \quad (4.1)$$

Luând în considerare expresia analitică pentru fiecare ordin de rețea a sferelor de împachetare, ecuația (4.1) se reduce la o dependență de diametrul și volumul suprafeței totale a fiecărui tip de sferă. Aici, $S_1 = \pi D_1^2 N$ și $S_2 = \pi(\sqrt{3}-1)2D_1^2$ sunt suprafața sferelor mari și mici din cele două rețele cu același număr de noduri, N , în contact optic.

Numărul de sfere cu diametrul D_i a fost considerat proporțional cu $N_i = V_f t / (D_i^3)$ care după N^i împachetări este identic cu cel al volumului liber rămas: $V_{fi} = V(1 - \rho)^{(i-1)}$. Este posibilă continuarea umplerii spațiului dintre D_2 cu elemente de diametru K mai mic decât D_2 ($D_3 \sim (0,2 - 0,3mm)$). Un exemplu relevant este ilustrat în Fig. 4.4(c), unde spațiul dintre sferele mari (cu un diametru $D_1 \sim 2 - 3mm$) este umplut cu sfere cu un diametru de 10 ori mai mic ($K = 10$; $D_2 \sim 0,2 - 0,3mm$). O nouă zonă de contact este atinsă după fiecare pas de umplere i de ordinul $S_i = 4\pi V_{fi} / D_i$.

În consecință, spațiul liber devine tot mai mic cu fiecă etapă de împachetare decât la etapa precedentă ($i + 1$). După etapele ulterioare de împachetare cu bile, suprafața de contact devine:

$$S_i = 4\pi V (1 - \rho^{(i-1)}) 10^{(n-1)} / D_i. \quad (4.2)$$

Ecuția (4.2) definește suma seriilor geometrice corespunzătoare sferei în contact cu fluidul contaminat și anume: $V(1 - \rho)^i$. Suprafața totală corespunzătoare poate fi exprimată astfel:

$$S_i n = 4\pi V (1 - q^n) / (D_1 (1 - q)), \quad (4.3)$$

unde $q = (1 - \rho)K$. Numărul de sfere cu diametrul D_i este proporțional cu $N_i = V_{fi} / (D_i^3)$. Ec. (4.2) cuantifică contribuția majoră a metamaterialului la suprafața totală (4.3). Aceasta se obține ori de câte ori raportul de progresie geometrică este superior unității $q \gg 1$. Contribuția principală la suprafața totală provine așadar din sferele cu diametrul cel mai mic, $D_n = 10^{(-n+1)} D_1$. În consecință, aria totală a metamaterialului compozit crește drastic atunci când scade diametrul celei mai mici fracțiuni de umplutură. Analizele au fost extinse la cazul în care $K > 1$ și $(1 - \rho) < 1$ pentru a obține o valoare unitară a raportului de progresie geometrică, $q = (1 - \rho)K \sim 1$. Sferele de cuarț cu un diametru $D_i = D_{(i-1)} / K$ aduc deci o contribuție substanțială la suprafața totală a metamaterialului compozit în contact cu fluidul contaminat.

4.3.2. Împachetări de elemente cu geometrie cilindrică

În această secțiune se va propune un alt model de împachetare a metamaterialelor și anume combinarea tijelor din cuarț de diferite diametre. Calcule similare ca în cazul sferelor au fost efectuate în cazul procedurii de împachetare a fibrelor optice de lungimi identice (L) dar cu diametre diferite (d_i). S-a arătat că împachetarea pătrată a fibrelor cu diametrul d_1 permite umplerea spațiului liber rămas între fibre cu un diametru mai mic, $d_2 = d_1(\sqrt{2} - 1)$, vezi Fig. 4.5.

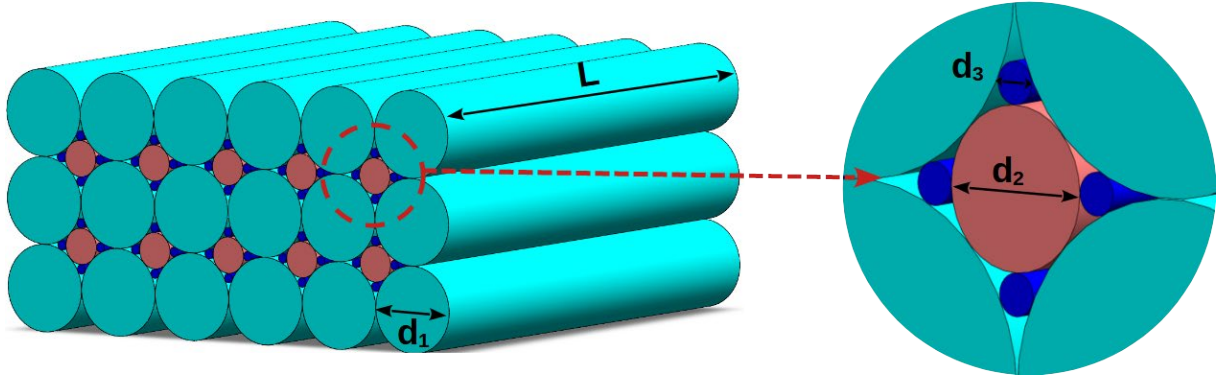


Fig. 4.5 Schema de împachetare cu fibre

Întreaga suprafață a fibrelor crește odată cu suma fibrelor groase și subțiri $S_t = S_1 + S_2$. Pentru orice tip de fibre, suprafața totală este egală cu produsul perimetrului circular înmulțit cu numărul de fragmente și lungimile corespunzătoare: $S_i = \pi d_i L N_i$. Relația dintre diametrele d_1 și d_2 ale fibrelor groase/subțiri și lungimea cutiei pătrate de ambalare, L_{pb} , este: $L_{pb} = N_x d_1$. Se poate presupune că $N_x = \sqrt{N_1}$, iar $N_x = N_y$ deoarece caseta pătrată conține același număr de fibre de-a lungul direcțiilor x sau y, $N_1 = N_x N_y$, rezultă că suprafața totală a fibrelor împachetate de același diametru este $S_1 = \pi L_{pb} L \sqrt{N_1}$. Potrivit Refs. [9,10, 12], suprafața totală a cilindrilor împachetați corespunzătoare spațiului neutilizat, în timpul decontaminării fluidului este $S_i \sim L_{pb} L \sqrt{N_1}$. Suprafața de contact corespunzătoare este $S_2 = \pi L_{pb} L \sqrt{N_2} (\sqrt{2} - 1) = S_1 (\sqrt{2} - 1)$. În consecință, în cazul ambalării închise a fibrelor, se obține o creștere a suprafeței totale de contact de ordinul a 44 %.

Procedura de împachetare pătrată poate fi extinsă la aranjamente hexagonale de fibre groase/subțiri în interiorul miezului de decontaminare (Fig. 4.32). Raza fibrelor ($r = d / 2$) sunt în acest caz, $r_2 = r_1 (1 - \sqrt{3}/2)$, fiind inferioară celei din ambalarea pătrată. Suprafața totală devine

$S_t = S_1 + S_2 = 2\pi r_1(1 - \sqrt{3}/2)LN$. Volumul de decontaminare este proporțional cu această suprafață înmulțită cu adâncimea de penetrare a radiației UVC. Volumul de decontaminare este inferior volumului liber dintre fibre din cauza distanței mari dintre fibre cu diametrul de (1-2) mm în raport cu lungimea de undă UVC. Acest volum, V_u , este definit de suprafața tuturor fibrelor și de suprafața tubului de cuarț, s , înmulțită cu adâncimea de penetrare a radiației k . Astfel, $V_u = (A + s)L_{pb}$. Volumul liber dintre trei fibre cu lungimea de 100 cm și diametrul de 0,1 cm poate fi estimat din $V_f = L(\sqrt{3} - \pi/2)r^2 = 0.16r^2L$. Prin urmare, poate fi estimată eficiența ratei de decontaminare a volumului dintre fibrele din interiorul cilindrului. Această abordare recurge la calculul volumului efectiv între cele trei fibre. Volumul este egal cu lungimea celor trei fibre înmulțită cu adâncimea de penetrare a radiațiilor, $\kappa \sim \lambda/2$, în fluid $V_u = \pi r k L$. Așadar, eficiența contactului $E_f = V_u/V_f \sim \lambda/r$ se menține mic pentru o lungime de undă în interval $\lambda \sim 250\text{ nm} - 280\text{ nm}$. Volumul liber $V_f = V - V_m = \pi(R^2 - Nr^2)L$, este diferența dintre volumul total al cilindrului mare $V = \pi R^2L$, cu $R = 2.5\text{ cm}$ și $L = 100\text{ cm}$, și volumul de fibre ambalate $V_m = \pi Nr^2L$.

În figura 4.6 este prezentat un model de împachetare a bilelor combinate cu tije/fibre din cuarț în care suprafața totală a acestor metamateriale în contact cu fluidele contaminate este în acest caz semnificativ crescută, cu efecte benefice asupra decontaminării datorita faptului ca radiația este dispersată prin unde evanescente într-un volum extins de fluide circulante.

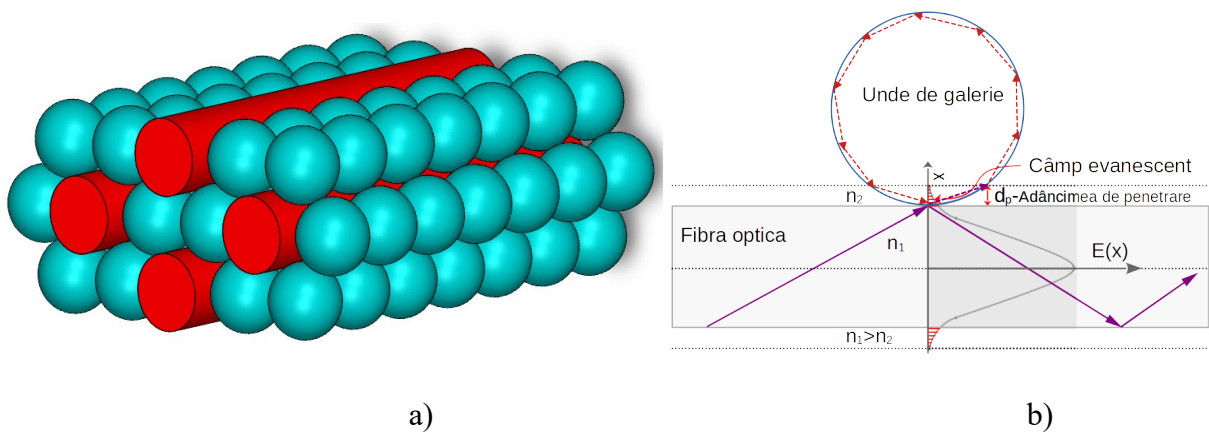


Fig. 4.6. a) Mod de aranjare bile combinat cu tije din cuarț; b) Unde de galerie ce apar la contactul dintre fibra-bila

Acest tip de împachetare a tijelor, în combinație cu fibrele, face posibilă menținerea dispersiei radiației atât pe direcția longitudinală, cât și pe cea transversală, permițând pătrunderea acesteia și în zonele libere dintre sfere și fibre. Datorită faptului că în jurul fibrelor se formează o zonă de evanescență pe întreaga lor suprafață, la contactul cu sfera această zonă pătrunde în interiorul acesteia, generând așa-numitele **unde de galerie** (Fig. 4.6(b)), care joacă un rol important în procesul de decontaminare a agenților patogeni.

Mai mult, zona de evanescență acoperă o porțiune considerabilă din suprafața sferei. Dacă raportăm această sferă la patogenii biologici, ale căror diametre sunt de peste zece ori mai mari decât adâncimea de penetrare a undei evanescente, rezultă că undele de galerie pot induce efecte distructive asupra celulelor, făcându-le incapabile de a se mai reproduce.

4.4. Evaluarea volumului ocupat de bilele de cuarț și zonele lor evanescente într-un volum limitat. Simulare numerică a adâncimii zonei evanescente în funcție de unghiul de incidență

La interacțiunea luminii cu o sferă din cuarț imersată într-o soluție de drojdie, la o lungime de undă de 256nm , se formează o zonă evanescentă la interfața dintre cele două medii. Adâncimea acestei zone depinde de unghiul de incidență al luminii și de indicii de refracție a materialelor implicate. Pentru calculul adâncimii zonei de evanescență pentru o sferă din cuarț în soluție de drojdie, cu o lungime de undă de 256nm și un unghi de incidență de 70° , astfel încât condiția pentru reflexie totală internă să fie îndeplinită, se va utiliza formula standard pentru adâncimea de penetrare A_p a câmpului evanescent:

$$A_p = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta - n_2^2}}, \quad (4.4)$$

unde:

$\lambda = 2.54 \times 10^{-7} \text{ m}$ - lungimea de undă

$n_1 = 1.54$ - indicele de refracție al cuarțului

$n_2 = 1.36$ - indicele de refracție al soluției de drojdie

$\theta = 65,89^\circ$ - unghi de incidență de între cuarț și soluția de drojdie l-am ales aleatoriu reieșind din graficul următor:

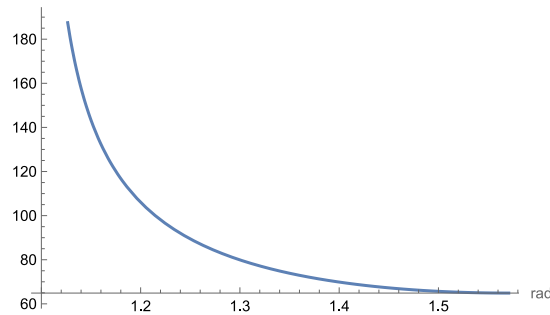


Fig. 4.7. Dependența adâncimii de penetrare a radiației electromagnetice în mediul n2 (soluție de drojdie) din mediul n1 (bilă de cuarț) de unghiul de incidență. Simulare efectuată cu ajutorul softului Wolfram Mathematica

Pentru a obține o zonă evanescentă, unghiul de incidență trebuie să fie mai mare decât unghiul critic θ_c determinat de relația:

$$\sin\theta_c = \frac{n_1}{n_2}; \quad \theta_c = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right) = \arcsin\left(\frac{1.36}{1.54}\right) = 61.98^\circ \approx 1.15 \text{ rad}$$

Deoarece $65,89^\circ > 61,98^\circ$, reflexia internă totală are loc, iar câmpul evanescent există în mediul drojdiei. Prin urmare, pentru a obține o zonă evanescentă la interfața dintre cuarț și soluția de drojdie, unghiul de incidență trebuie să fie mai mare de aproximativ 61.98° .

$$A_p = \frac{2.54 \times 10^{-7} \text{ m}}{2 \times 3.14} \cdot \frac{1}{\sqrt{[(1.54)^2 \times (0.9117)^2] - (1.36)^2}} \approx 115.83 \text{ nm}$$

Astfel, grosimea zonei de evanescență este $\delta = A_p \approx 115.83 \text{ nm}$.

Determinarea volumului de soluție de drojdie pătruns de câmpul evanescent generat de bilele de cuarț de rază R

Aici, am propus ca scop de calculat volumul rămas într-un cub de latură 1 cm , în care se află $N = 1000$ de bile din cuarț, fiecare având 1 mm diametru, inclusiv stratul evanescent. Vom exclude apoi volumul total ocupat de aceste bile împreună cu zonele lor evanescente pentru a vedea volumul rămas care nu este altceva decât volumul soluției de drojdie.

Calculăm suprafața totală a zonei evanescente generate în jurul unei sfere de cuarț cu diametrul de 1 mm , respectiv raza $R = \frac{1\text{ mm}}{2} = 0.5\text{ mm} = 5 \times 10^{-4}\text{ m}$, plasată într-un mediu cu indice de refracție inferior (ex: soluție de drojdie), la o lungime de undă de 256 nm , unde adâncimea evanescentă am calculat-o anterior ca fiind aprox. 115.83 nm , rezultă:

$$S_{\text{evanescent}}(R) = 4\pi R^2 = 4\pi(5 \times 10^{-4})^2 = 4\pi \cdot 2.5 \times 10^{-7} = 1 \times 10^{-6} \cdot \pi \text{ m}^2 \approx \\ \approx 3.14 \times 10^{-6} \text{ m}^2 = 3.14 \text{ mm}^2 \quad (4.5)$$

Aplicăm formula volumului pentru un strat sferic subțire care nu este altceva decât diferența dintre două sfere:

$$V = \frac{4}{3}\pi[(R + A_p)^3 - R^3] \quad (4.6)$$

Pentru $A_p \ll R$, putem aproxima cu $V_{\text{evanescent}} \approx 4\pi R^2 \cdot A_p$, care este o aproximație de ordinul întâi, potrivită pentru zone foarte subțiri primește valoarea:

$$V_{\text{evanescent}} \approx 4\pi(5 \times 10^{-4})^2 \cdot 115.83 \times 10^{-9} = 4\pi \cdot 2.5 \times 10^{-7} \cdot 115.83 \times 10^{-9} = 0.0003638 \text{ mm}^3$$

Volumul unei bile de raza R v-a fi egal cu:

$$V_B = \frac{3}{4}\pi R^3 = \frac{3}{4}\pi(5 \times 10^{-4})^3 = \frac{3}{4}\pi \cdot 1.25 \times 10^{-10} \approx 5.24 \times 10^{-10} \text{ m}^3$$

Volum total ocupat de bile, plus volumul zonelor evanescente este:

$$V_{\text{total}} = 1000 \cdot (V_B + V_{\text{evanescent}}) = 1000 \cdot (5.24 \times 10^{-10} + 2.76 \times 10^{-13}) \approx 5.24 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \quad (4.7)$$

Volumul rămas din cub nu este altceva decât volumul ocupat de drojdie, deci:

$$V_{\text{drojdie}} = V_{\text{cub}} - V_{\text{total}} = 1 \times 10^{-6} - 5.24 \times 10^{-7} = 4.76 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \approx 0.476 \text{ mm}^3 \quad (4.8)$$

Până aici am analizat cazul în care 1000 de bile din cuarț, fiecare cu diametrul de 1 mm , sunt plasate într-un cub cu latura de 1 cm , după care am evaluat volumul ocupat de acestea și de zonele lor evanescente, precum și volumul liber rămas.

Acum ar fi bine să calculăm volumul zonei de evanescență și volumul rămas liber într-un cub cu latura de 10 mm , în care sunt plasate bile de diametru 1 mm , iar în spațiile libere dintre

acestea sunt introduse bile mai mici cu diametru $d = \sqrt{2} - 1 \text{ mm}$. Să abordăm problema pas cu pas.

Numărul de **cuburi unitare interioare** (fără marginile exterioare) este $(10-1)^3 = 9^3 = 729$ **goluri interstițiale** în această ambalare cubică perfectă în care pot fi introduse bile. **Aria suprafeței unei bile de raza** $r = \frac{d}{2} = \frac{\sqrt{2}-1}{2} \approx 0.207 \text{ mm}$ **este:**

$$S_{\text{evanescent}}(r) = 4\pi r^2 = 4\pi(0.207)^2 \approx 0.5372 \text{ mm}^2.$$

Volumul zonei de evanescență pentru 729 de bile de raza r v-a fi egal cu:

$$V_{\text{evanescent}}(r) = N \times S_{\text{evanescent}}(r) \times A_p \approx 729 \times 0.5372 \text{ mm}^2 \times 115.83 \text{ nm} \approx 0.0000622 \text{ mm}^3.$$

Volumul total al zonei de evanescență creat în jurul bilelor de raza $R+r$ este:

$$V_{\text{evanescenta}}(R+r) \approx 0.3638 + 0.0453 = 0.4091 \text{ mm}^3.$$

4.5. Determinarea adâncimii de penetrare în cioburi de cuarț

Un alt aspect al interacțiunii radiației UVC cu materia este studiat folosind granule de cuarț zdrobite. Odată pătrunsă radiația în granule de cuarț zdrobite se observă o dispersie a luminii pe un volum destul de mare. În opinia autorilor [126] adâncimea de pătrundere a radiației UV-C coerente prin granule de cuarț zdrobite în comparație cu bile sau fibre din cuarț ar fi mai mare. Adâncimea de penetrare a radiației laser UV-C într-o soluție care conține metamateriale poate fi influențată de diverși factori, inclusiv lungimea de undă a radiației și lățimea fasciculului laser. Adâncimea de penetrare se referă la distanța la care intensitatea radiației scade până la un anumit procent din valoarea inițială. Odată cu creșterea lățimii fasciculului, există o reducere a împrăștierei laterale, rezultând o penetrare mai mare pentru dimensiuni mai mari ale spotului. Cu toate acestea, există un punct în care lățimea fasciculului nu mai are niciun efect asupra adâncimii de penetrare. La acesta etapa s-a efectuat un calcul al adâncimii de penetrare în granule de cuarț zdrobite. Astfel, au fost aplicate diferite grade de umplere a cuvelor cu granule de cuarț zdrobite (1 mm, 2 mm, 3 mm, respectiv 4 mm), Fig. 4.7(b).

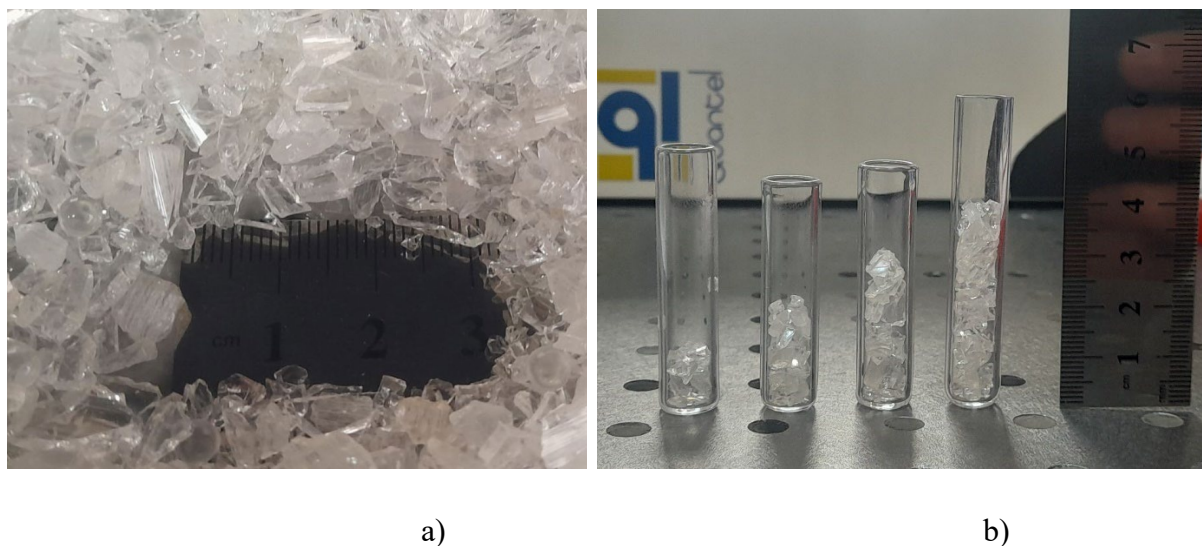


Fig. 4.7. a) Granule de cuarț zdrobite. b) Cuve cu diferit grad de umplere.

În același timp, au fost studiate 3 intensități de penetrare (50, 60 și 70 mJ) precum și 3 rate de repetiție (1, 2 și 5 Hz). Scopul acestui studiu a fost de a determina energia minimă de aplicare pentru o decontaminare eficientă în condiții clinice, iar rezultatele au fost incluse în tabelul 2.

Tabel 2. Date experimentale ale energiei pulsului penetrat de cel incident

Proba	Energie puls incident (mJ)	Frecvența puls (Hz)	Energie puls penetrat
			(mJ)
Proba 0 cm cioburi	50	1	4.5
		2	4.65
		5	4.7
	60	1	5.9
		2	6.11
		5	6.25
	70	1	6.65
		2	6.8
		5	6.85
Proba 1 cm cioburi	50	1	1.2
		2	0.93
		5	0.86
	60	1	0.99

	70	2	1.01
		5	1
		1	1.4
		2	1.39
		5	1.38
Proba 2 cm cioburi	50	1	0.45
		2	0.46
		5	0.52
	60	1	0.48
		2	0.51
		5	0.52
	70	1	0.49
		2	0.48
		5	0.46
Proba 3 cm cioburi	50	1	0.34
		2	0.39
		5	0.48
	60	1	0.47
		2	0.5
		5	0.48
	70	1	0.48
		2	0.51
		5	0.50
Proba 4 cm cioburi	50	1	0.34
		2	0.40
		5	0.32
	60	1	0.31
		2	0.34
		5	0.32
	70	1	0.42
		2	0.45
		5	0.43

Se poate observa că, odată cu creșterea grosimii stratului de umplere a cuvei cu metamateriale, energia radiației transmise scade. Astfel, pentru o grosime de 1 cm, energia măsurată după pătrundere este de aproximativ **1 mJ**, în timp ce pentru o grosime de 4 cm aceasta scade la circa **0,45 mJ**.

Pe baza datelor obținute se poate concluziona că variația frecvenței nu influențează adâncimea de penetrare a pulsului în metamaterial. Prin urmare, pentru construirea dependenței dintre adâncimea de penetrare și energia pulsului (Fig. 4.8), s-a utilizat media aritmetică a ratei de repetiție.

Diametrul fasciculului a fost ales astfel încât să corespundă diametrului cuvetei, respectiv **14 mm**. Rezultatele experimentale arată că aproximativ **10% din energia incidentă a pulsului** este transmisă și iese din cuvă.

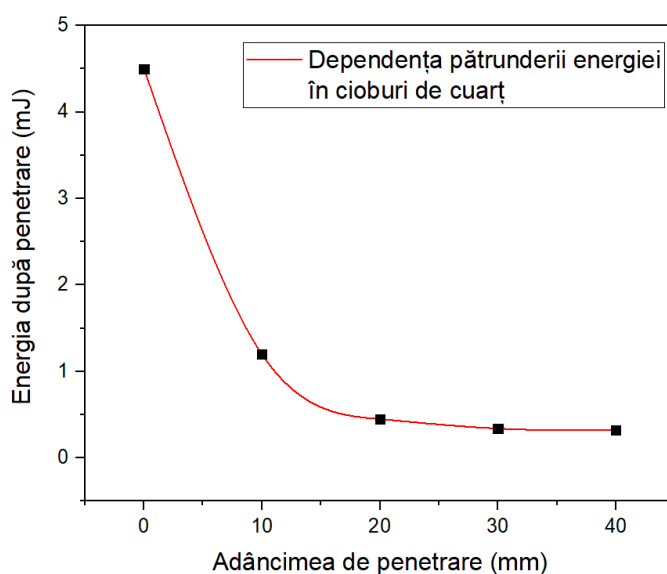


Figura 4.8. Dependența energiei radiației față de adâncimea de penetrare

În etapa următoare, intensitățile de penetrare au fost scăzute și s-a calculat adâncimea de penetrare a soluțiilor cu agenți patogeni și cu diferite grade de umplere a cuvelor cu metamateriale (1 mm, 2 mm, 3 mm, respectiv 4 mm). În același timp, s-a ales ca fiind optimă rata de repetiție de 2 Hz. Setul de energie laser a fost de 400 mJ. S-a folosit un atenuator pentru a atinge intensități de penetrare de ordinul (40,30,20 mJ). Soluția de drojdie care umple spațiul/volumul liber dintre metamaterialele din cuva de analizat (cu dimensiuni standard de 10/10 mm și 4 cm înălțime) a fost determinată a avea o valoare de 1 mL. În consecință, pentru celelalte grade de umplere cu metamateriale, s-au măsurat 0,25 mL pentru o cadă cu 1 cm de metamateriale; 05 mL pentru un rezervor cu 2 cm de metamateriale; 0,75 ml pentru un rezervor cu 3 cm de metamateriale. Scopul

acestui studiu a fost de a determina limita maximă a adâncimii de penetrare la o energie stabilită. Condițiile experimentale testate pot fi găsite în Tabelul 3.

În continuare, pentru caracterizarea biologică, s-a preparat o soluție de drojdie neiradiată (ca martor pozitiv), o soluție iradiată simplă (fără metamateriale); și o soluție cu metamateriale iradiate, după cum urmează:

- soluție de drojdie neiradiată

-5 măsurători simple în soluție la diferite intervale de timp (5 impulsuri, 10 impulsuri, 15 impulsuri; 20 impulsuri; 25 impulsuri la o frecvență de 2 Hz; 100 mJ) = 10 sec; 20 sec; 30 de secunde și

- 5 măsurători de soluție cu metamaterial, grad de umplere 3 cm aprox. 0,75 mL soluție de drojdie (pentru a igieniza fasciculul); la diferite intervale de timp (5 impulsuri, 10 impulsuri, 15 impulsuri; 20 impulsuri; 25 impulsuri la o frecvență de 2 Hz) =10 sec; 20 sec; s-au efectuat 30 sec.

Tabelul 3. Condiții experimentale ale cuvei cu soluție de drojdie și metamateriale

Proba	Energie Laser (mJ)	Frecvența puls (Hz)	Energie puls la ieșire din cioburi (mJ)	Energie puls la ieșire din soluție cu cioburi (mJ)
Proba 0 cm cioburi	40	2	16,4	-
	30	2	12,2	-
	20	2	8,1	-
Proba 1 cm cioburi	40	2	1,86	0,65
	30	2	1,62	0,47
	20	2	0,98	0,32
Proba 2 cm cioburi	40	2	0,67	0,48
	30	2	0,38	0,33
	20	2	0,32	0,24
Proba 3 cm cioburi	40	2	0,20	0,085
	30	2	0,14	0,07
	20	2	0,092	0
Proba 4 cm cioburi	40	2	0,135	0,078
	30	2	0,09	0
	20	2	0,068	0

La energii de penetrare sub 20mJ (pentru un grad de umplere 3cm) și sub 30mJ (pentru un grad de umplere 4cm), se observă o limită maximă de penetrare a metamaterialului studiat. Se poate observa că odată cu creșterea grosimii de umplere a cuvei cu metamateriale, limita maximă de pătrundere a materialului studiat crește odată cu reducerea intensității de pătrundere, astfel încât pentru o grosime de umplere de maxim 4 cm se poate aprofunda în metamaterialul prin aplicarea energiei după penetrarea de numai ~35 mJ și pentru o grosime maximă de umplere de 3 cm metamateriale putem pătrunde în metamaterial prin aplicarea energiei după penetrarea de ~20 mJ, vezi Fig. 4.9.

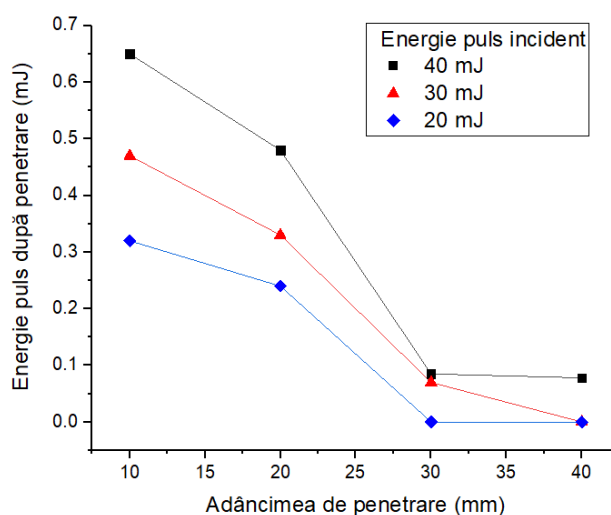


Fig. 4.9. Dependenta pătrunderii energiei în cioburi de cuarț umplute cu soluție de drojdiile

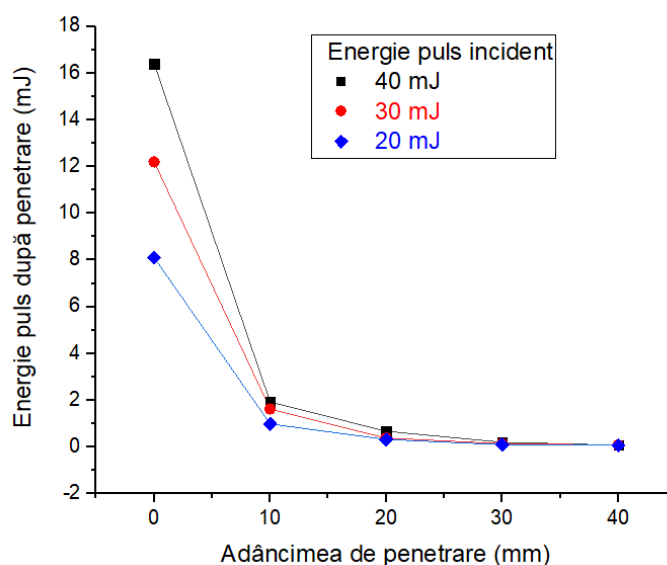


Fig. 4.10. Dependenta pătrunderii energiei și determinarea energiei după penetrarea metamaterialelor versus gradul de umplere cu metamateriale

Din Fig. 4.10, reiese că pentru un grad de umplere de 40 mm, limita maximă a energiei aplicate este de 20 mJ, unde energia care iese are o valoare apropiată de 0 ($\sim 0,068$), fapt care confirmă că cu acești parametri avem o limită maximă de adâncime de penetrare.

Pentru a calcula adâncimea de penetrare a radiației laser UV-C într-o soluție, pot fi efectuate simulări. Aceste simulări folosesc modele matematice pentru a simula interacțiunile fotonilor cu soluția și oferă informații despre adâncimea de penetrare pe baza proprietăților radiației și soluției. Rezultatele acestor simulări pot fi apoi analizate pentru a determina adâncimea de penetrare pentru diferite perioade de iradiere, cum ar fi 10 secunde, 20 de secunde, 30 de secunde, 40 de secunde și 60 de secunde, așa cum sa menționat în întrebarea inițială.

4.6. Manipularea biomoleculelor cu ajutorul canalelor de rotație prin metamaterialele pătrunse de radiații UVC

În acesta secțiune este propusa o metodă de canalizare cu radiații UVC care se concentrează pe aplicarea diferitelor geometrii ale elementelor de ambalare care creează canale cu șuruburi pentru accelerarea patogenului prin elementele acestui metamaterial pe bază de cioburi/bile de cuarț. Ideea principală este legată de rotația lichidelor și gazelor contaminate prin canale cu șuruburi ale meta-materialelor, preparate din fibre optice UVC, în configurația de torsiune reprezentată în Fig. 4.11, astfel lichidele contaminate sunt rotite de-a lungul direcției de curgere.

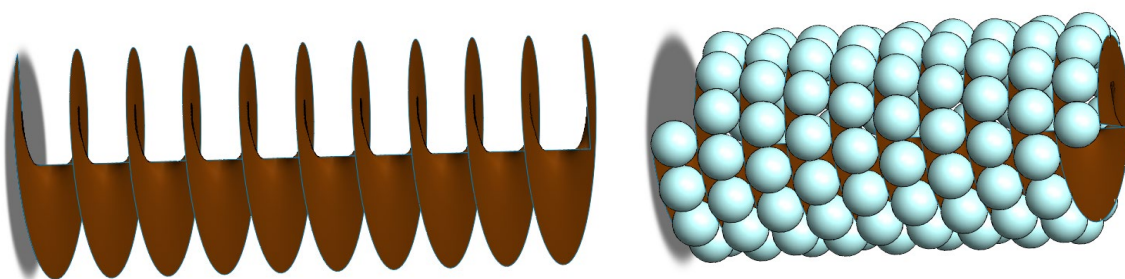


Fig. 4.11. Accelerația agenților patogeni în jurul elementelor meta-materialului și posibilul flux turbulent cu accelerarea agenților patogeni în canalele cercului sau șuruburilor în cazul tridimensional.

Dacă densitatea agenților patogeni este mai mare decât densitatea fluidelor, virușii sau bacteriile se pot lipi de suprafața sferelor de elemente metamateriale pătrunse de radiațiile ultraviolete C. Având în vedere că densitatea picăturilor de virus și bacterii ρ_p este mai mare decât densitatea lichidelor ρ_f , aderența agenților patogeni la (suprafața exterioară) a canalelor de

rotație crește în funcție de gradul de torsiune al canalelor [127,128]. Deoarece numărul de astfel de canale de rotație din meta-materialul propus este mare, suprafața totală constă din suma suprafețelor fiecărui canal de curgere dintre fibre. Acest efect de decontaminare UVC depinde de forța centrifugă inerțială $F = (\rho_p - \rho_f)\omega^2 A = \pi r^2 r$, care apare pe picăturile infectate de agenți patogeni în timpul rotației sale. Densitatea mare a agenților patogeni ne oferă posibilitatea de a găsi legătura dintre viteza curgerii acestuia și raza de rotație a canalului de rotație. Forța centrifugă trebuie să tragă picăturile de agent patogen către suprafața fibrelor/sferei pătrunse de radiația UVC evanescentă în canalul de curgere în timpul efectului de filare. Acest efect de decontaminare UVC depinde de forța centrifugă inerțială, care se aplică agenților patogeni în timpul curgerii lor rotative prin canalul cu rază de rotație, r , cu frecvența ω . Luând în considerare acest lucru, proiecția celei de-a doua legi a lui Newton asupra direcției razei poate fi aproximată prin expresia $(\rho_p - \rho_f)\omega^2 r - \beta dr / dt = 0$. Sau în această descriere raza crește în funcție de timp ca: $r_0 \exp[(\rho_p - \rho_f)\omega^2 r / \beta]$.

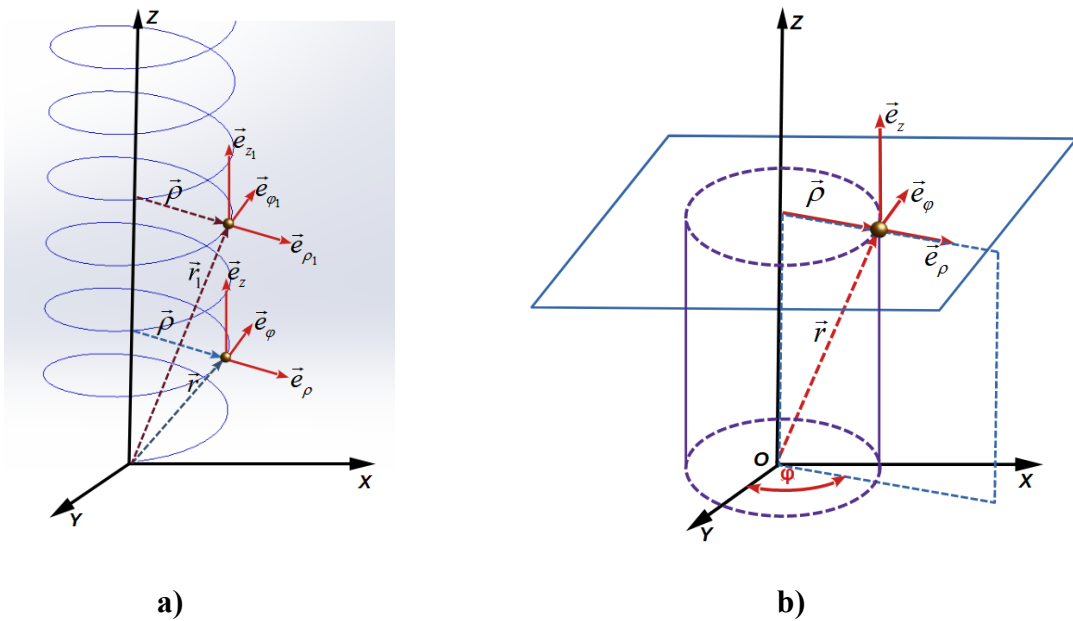


Fig. 4.12. a) Accelerarea agenților patogeni în canalele cercului sau șuruburilor în cazul tridimensional; b) Poziția biomoleculei în coordonate cilindrice

Pentru descrierea mișcării particulei în sistemul de coordonate cilindric, reieșind din Fig. 4.12. (b) distanța $\vec{r}$ poate fi scrisa ca:

$$\vec{r} = z\vec{e}_z + \rho\vec{e}_\rho \text{ sau } d\vec{r} = dz\vec{e}_z + d\rho\vec{e}_\rho + \rho d\Delta\vec{e}_\rho.$$

Odată ce componenta după ρ depinde de timp atunci $\Delta \vec{e}_\rho = \vec{e}_\rho(t + \Delta t) - \vec{e}_\rho(t) = \Delta \varphi \times \vec{e}_\varphi$, iar relația de mai sus poate fi scrisa ca :

$$d\vec{r} = dz\vec{e}_z + d\rho\vec{e}_\rho + \rho d\varphi\vec{e}_\varphi.$$

Din această relație prin derivare ușor se obțin valorile pentru viteza și accelerație în coordonate cilindrice, unde viteza $\vec{v}$ este:

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = v_z\vec{e}_z + v_\rho\vec{e}_\rho + \rho \frac{d\varphi}{dt}\vec{e}_\varphi = v_z\vec{e}_z + v_\rho\vec{e}_\rho + \rho\omega\vec{e}_\varphi,$$

$$v_z = \frac{dz}{dt}; \quad v_\rho = \frac{d\rho}{dt}; \quad v_\varphi = \rho\omega = \rho \frac{d\varphi}{dt},$$

$$\overrightarrow{dv} = dv_z\vec{e}_z + \{d(v_\rho)\vec{e}_\rho + v_\rho d\vec{e}_\rho\} + dv_\varphi\vec{e}_\varphi + v_\varphi d\vec{e}_\varphi\},$$

$$d\vec{e}_\rho = d\varphi\vec{e}_\varphi,$$

$$d\vec{e}_\varphi = -d\varphi\vec{e}_\rho,$$

$$\overrightarrow{dv} = dv_z\vec{e}_z + d(v_\rho)\vec{e}_\rho + v_\rho d\varphi\vec{e}_\varphi + dv_\varphi\vec{e}_\varphi - v_\varphi d\varphi\vec{e}_\rho.$$

Accelerația în acest caz nu este altceva decât derivata vitezei după timp

$$\vec{w} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{dv_z}{dt}\vec{e}_z + \frac{dv_\rho}{dt}\vec{e}_\rho + v_\rho\omega\vec{e}_\varphi + \frac{dv_\varphi}{dt}\vec{e}_\varphi - v_\varphi \frac{d\varphi}{dt}\vec{e}_\rho,$$

$$\vec{w} = w_z\vec{e}_z + w_\rho\vec{e}_\rho + v_\rho\omega\vec{e}_\varphi + \frac{dv_\varphi}{dt}\vec{e}_\varphi - v_\varphi\omega\vec{e}_\rho.$$

Dacă exprimăm aceleași relații utilizând formalismul vectorial, atunci componentele vitezei și accelerației pot fi scrise sub forma vectorilor corespunzători. Astfel, viteza se exprimă ca: $\vec{v} = \vec{v}_z + \vec{v}_\rho + \rho\omega\vec{e}_\varphi$,

$$\text{unde componentele vitezei sunt: } \vec{v}_z = \frac{dz}{dt}\vec{e}_z; \quad \vec{v}_\rho = \frac{d\rho}{dt}\vec{e}_\rho; \quad \vec{\omega} = \frac{d\varphi}{dt}\vec{e}_z; \quad \vec{\rho} = \rho\vec{e}_\rho,$$

$$v_\varphi\omega\vec{e}_\rho = [\vec{\omega}, \vec{\rho}] = -[\vec{\rho}, \vec{\omega}].$$

$$\vec{v} = \vec{v}_z + \vec{v}_\rho + [\vec{\omega}, \vec{\rho}],$$

unde $\vec{\rho} = \vec{r} - ze_z$,

atunci $\vec{v} = \vec{v}_z + \vec{v}_\rho + [\vec{\omega}, \vec{r} - ze_z]$.

Odată ce $[\vec{\omega}, z\vec{e}_z] = 0 = \omega z[\vec{e}_z, \vec{e}_z] = \omega z \sin 0 = 0$.

Mai departe $\vec{v} = \vec{v}_z + \vec{v}_\rho + [\vec{\omega}, \vec{r}] = \vec{v}_z + \vec{v}_\rho + \vec{v}_\varphi$,

$$\begin{aligned}\vec{w} &= w_z\vec{e}_z + w_\rho\vec{e}_\rho + v_\rho\omega\vec{e}_\varphi + \frac{dv_\varphi}{dt}\vec{e}_\varphi - v_\varphi\omega\vec{e}_\rho = \\ &= \vec{w}_z + \vec{w}_\rho + v_\rho\omega\vec{e}_\varphi + \omega\frac{d\rho}{dt} + \rho\frac{d\omega}{dt},\end{aligned}$$

$$v_\rho\omega\vec{e}_\varphi = [\vec{v}_\rho, \vec{\omega}],$$

$$v_\varphi\omega\vec{e}_\rho = [\vec{v}_\varphi, \vec{\omega}] = [[\vec{\omega}, \vec{r}], \vec{\omega}] = -[\vec{\omega}, \vec{v}_\varphi] = -[\vec{\omega}, [\vec{\omega}, \vec{r}]].$$

Utilizând transformarea: $[\vec{a}, [\vec{b}, \vec{c}]] = \vec{b}(\vec{a}, \vec{c}) - \vec{c}(\vec{a}, \vec{b})$, se obține

$$v_\varphi\omega\vec{e}_\rho = -\{\vec{\omega}(\vec{\omega}, \vec{r}) - \omega^2\vec{r}\}.$$

$$\begin{aligned}\vec{w} &= \vec{w}_z + \vec{w}_\rho + [\vec{v}_\rho, \vec{\omega}] + \frac{dv_\varphi}{dt}\vec{e}_\varphi + \vec{\omega}(\vec{\omega}, \vec{r}) - \omega^2\vec{r} = \\ &= \vec{w}_z + \vec{w}_\rho + [\vec{v}_\rho, \vec{\omega}] + \vec{w}_\varphi + \vec{\omega}(\vec{\omega}, \vec{\rho}) - \omega^2\vec{\rho} = \\ &= \{w_z + \omega(\vec{\omega}, \vec{\rho})\}\vec{e}_z + (w_\rho - \rho\omega^2)\vec{e}_\rho + w_\varphi\vec{e}_\varphi.\end{aligned}$$

4.7. Descriere dispozitiv pentru decontaminarea lichidelor

Decontaminarea eficientă sub iradiere UVC deschide noi posibilități în fabricarea de echipamente inovatoare cu productivitate ridicată și reglabilitate pentru detectarea și eliminarea contaminanților biochimici. În acest scop a fost investigată posibilitatea utilizării fibrelor tubulare fabricate din materiale transparente în intervalul UVC prin care curg fluidele [129,130]

Pentru decontaminarea rapidă a volumelor mari, a fost propusă o nouă arhitectură a canalelor de fluid între elementele metamateriale [131] obținută prin inserarea unor elemente mai

mici de metamaterial între cele mari. Această abordare deschide suprafețele de contact suplimentare pentru radiația UVC cu fluidele. Canalele 3D pentru fluidele de contaminare generate în interiorul metamaterialelor împachetate elimină drastic frecarea dintre caracteristicile lichidului și metamaterialului [132,133].

Invenția propusă vizează dezvoltarea unui dispozitiv inovator pentru decontaminarea fluidelor contaminate (cum ar fi apa, plasma sanguină, aerul sau alte gaze) prin inactivarea agenților patogeni sub acțiunea radiațiilor ultraviolete de tip C (UV-C), cu lungimea de undă optimă de 254 nm. Acest dispozitiv se distinge prin eficiența sporită a procesului de dezinfectare, fiind aplicabil în domenii precum medicina, industria alimentară și agricultura. Problema tehnică abordată constă în optimizarea ratei de inactivare a microorganismelor patogene, prin expunerea uniformă și intensificată a acestora la radiațiile UV-C.

Dispozitivul integrează un tub decontaminator (14) prevăzut cu o spirală de cuarț (15), al cărei diametru al spirei (d_s) este egal cu distanța dintre cilindrii concentrici de cuarț (16 și 17), iar pasul spiralei este $2d_s$. Această configurație induce o mișcare rotativă a fluidului contaminat în interiorul tubului, asigurând o expunere omnidirecțională a patogenilor la radiațiile UV-C. În plus, spirala generează o zonă de evanescență în proximitatea suprafeței sale, amplificând intensitatea radiației în regiunile adiacente. Învelișul exterior al tubului (18) este realizat dintr-un material reflectorizant subțire (grosime de ordinul zecilor de micrometri), care previne pierderea radiațiilor UV-C și maximizează eficiența iradierii.

Mișcarea rotativă a fluidului, indusă de spirala de cuarț, prelungește traiectoria particulelor patogene în tub, comparativ cu un parcurs rectiliniu, ceea ce crește timpul de expunere la radiații. Mai mult, datorită diferenței de masă dintre particulele patogene și fluidul purtător, patogenii sunt direcționați centrifugal către zonele de intensitate maximă a radiației, similar efectului unei centrifuge. Spirala de cuarț acționează și ca un element optic de dispersie a radiațiilor UV-C, amplificând inactivarea patogenilor în vecinătatea sa.

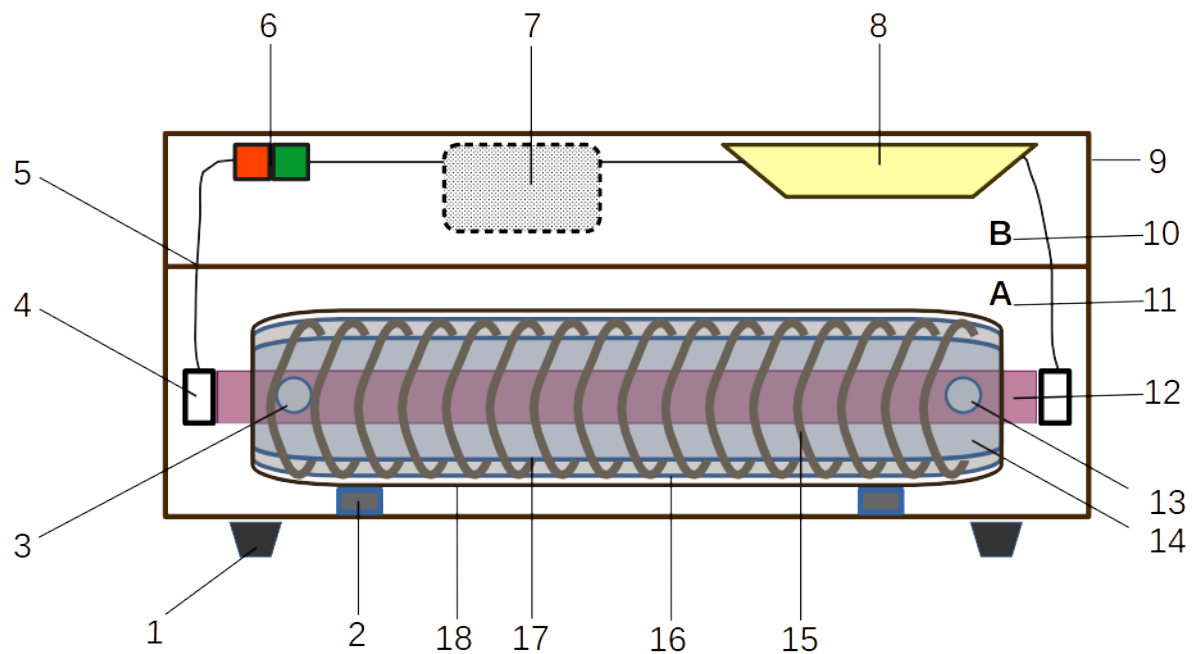


Fig. 4.13. Dispozitivul de decontaminare de lichide

Mișcarea rotativă a fluidului în tub poate fi descrisă folosind ecuațiile dinamicii fluidelor. Viteza unghiulară ω a fluidului indusă de spirala de cuarț depinde de pasul spiralei $p = 2d_s$ și de viteza axială a fluidului v_z :

$$\omega = \frac{v_z}{p} = \frac{v_z}{2d_s}.$$

Dacă v_z este viteza de curgere a fluidului (determinată de pompa externă sau de gradientul de presiune), traiectoria particulelor patogene devine elicoidală, cu o lungime efectivă a parcursului în tub dată de:

$$L_{\text{efectiv}} = \sqrt{(L_{\text{tub}})^2 + (2\pi RN)^2},$$

unde:

L_{tub} - lungimea tubului decontaminator.

R - raza spiralei ($R = \frac{d_s}{2}$).

N - numărul de spire, calculat ca raportul dintre lungimea tubului la pas, $N = \frac{L_{\text{tub}}}{p} = \frac{L_{\text{tub}}}{2d_s}$.

Această traiectorie prelungită crește timpul de expunere al patogenilor la radiații, sporind eficiența inactivării, iar inactivarea patogenilor urmează un model exponențial: $S = e^{-kD}$.

În acest dispozitiv, intensitatea I este amplificată în zona de evanescență din jurul spiralei. Dacă presupunem o intensitate nominală I_0 a sursei UV-C (12), intensitatea efectivă în zona de evanescență I_{eff} poate fi modelată ca:

$$I_{\text{eff}} = I_0 \cdot (1 + \alpha \cdot e^{-\beta r}),$$

unde:

α - coeficient de amplificare datorat efectului de evanescență.

β - coeficient de atenuare spațială.

r - distanța radială de la suprafața spiralei.

Timpul de expunere t este proporțional cu lungimea efectivă a traiectoriei:

$$t = \frac{L_{\text{efectiv}}}{v_z}.$$

Astfel, doza efectivă devine:

$$D = I_{\text{eff}} \cdot \frac{L_{\text{efectiv}}}{v_z}.$$

Datorită mișcării rotative, patogenii (cu masă m_p mai mare decât masa fluidului purtător) sunt supuși unei forțe centrifuge:

$$F_c = m_p \cdot \omega^2 \cdot R.$$

Această forță direcționează patogenii către pereții spiralei, unde intensitatea radiației este maximă datorită efectului de evanescență, crescând probabilitatea inactivării.

Învelișul reflectorizant (18) reduce pierderile de radiație UV-C. Dacă reflectivitatea suprafeței este R_f (aproximativ 0.9 pentru un strat subțire de ordinul zecilor de micrometri),

intensitatea efectivă în tub crește datorită reflexiilor multiple. Numărul mediu de reflexii N_r depinde de geometria tubului și poate fi estimat ca:

$$N_r \approx \frac{L_{\text{tub}}}{d_s}.$$

Intensitatea totală acumulată în tub devine:

$$I_{\text{total}} = I_0 \cdot \sum_{n=0}^{N_r} R_f^n \approx I_0 \cdot \frac{1}{1-R_f}, \quad \text{pentru } R_f < 1.$$

Pentru $R_f = 0.9$:

$$I_{\text{total}} \approx I_0 \cdot \frac{1}{1-0.9} = 10I_0.$$

Aceasta indică o amplificare de 10 ori a intensității radiației în interiorul tubului.

Acest dispozitiv propune o soluție inovatoare pentru decontaminarea fluidelor, integrând principii de mecanică a fluidelor, optică și microbiologie. Modelarea matematică a traiectoriei fluidului, a efectului centrifugal și a amplificării radiației UV-C evidențiază superioritatea acestuia față de alte sisteme. Configurația sa simplă, dar eficientă, îl face ideal pentru aplicații în medii cu cerințe stricte de sterilitate.

4.8. Concluzii la capitolul 4

Fluidele supuse iradierii prin metamateriale au fost soluții de drojdie. Aplicarea acestei metode poate fi exportată la o clasă mare de agenți patogeni. În ceea ce privește rezistența ciupercilor la bacteriile și virusurile procariote, aceasta este destul de mare conform datelor experimentale existente. Eficiența decontaminării crește substanțial cu agenții patogeni în mișcare împreună cu lichide (sau aerosoli infectați în gaze de curgere) între elementele metamaterialelor în comparație cu un regim de decontaminare cvasi-staționar. Această estimare demonstrează de ce efectele rapide de decontaminare pot fi obținute cu o eficiență mai mare în situația dinamică în comparație cu aplicarea UVC la un fluid static. Adâncimea de penetrare a radiației UV-C în cioburi de cuarț este importantă pentru eficiența transmiterii radiațiilor către agentul patogen prezent în fluid. Utilizarea canalelor de rotație în metamateriale deschide noi direcții pentru detecția, manipularea și

sterilizarea biomoleculelor, având aplicații critice în biomedicină, optică avansată și nanotehnologie.

Calcululele numerice au demonstrat că împachetarea combinată a bilelor de cuarț de diametre diferite (1 mm și 0.1 mm) într-un cub de 10 mm maximizează volumul zonei evanescente, reducând volumul liber al soluției de drojdie la aproximativ 30% din volumul total (Ec. 4.8). Din punct de vedere teoretic, acest rezultat confirmă ipoteza că adâncimea zonei evanescente, calculată conform Ec. 4.4, este direct influențată de unghiul de incidență și diferența indicilor de refracție, conform principiilor mecanicii cuantice privind tunelarea undelor. Contribuția teoretică constă în dezvoltarea unui model numeric care cuantifică contribuția zonei evanescente la decontaminare, oferind o bază pentru predicția comportamentului radiației UV-C în medii eterogene. Aceste rezultate au implicații teoretice majore pentru înțelegerea interacțiunii câmpurilor evanescente cu biomoleculele, contribuind la optimizarea viitoarelor modele de decontaminare bazate pe metamateriale.

Dispozitivul de decontaminare propus, vine cu o soluție inovatoare pentru decontaminarea fluidelor, integrând principii de mecanică a fluidelor, optică și microbiologie. Modelarea matematică a traiectoriei fluidului, a efectului centrifugal și a amplificării radiației UV-C evidențiază superioritatea acestuia față de alte sisteme. Configurația sa simplă, dar eficientă, îl face ideal pentru aplicații în medii cu cerințe stricte de sterilitate.

CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

Această cercetare combină abordări teoretice avansate cu abordări experimentale inovatoare pentru dezvoltarea unui mecanism eficient de inactivare a microorganismelor. Inactivarea patogenilor cu ajutorul radiației UV-C pulsate este o tehnologie ce îmbunătățește eficiența sistemelor convenționale UV prin utilizarea unor expuneri scurte cu doză mare de energie.

ADN-ul microorganismelor este afectat de fotoni din spectrul UV-C (200–280 nm), care produc dimeri de timină și alte modificări structurale ce duc la inactivarea lor. Modelul Born–Oppenheimer (B-O) aplicat la interacțiunea biomoleculelor cu radiația UV-C permite modelarea modificărilor structurale la nivel molecular cauzate de absorbția fonică și formarea dimerilor de timină în ADN-ul patogenilor. Aproximația (B-O) poate fi utilizată pentru a prezice probabilitatea de inactivare a microorganismelor în funcție de lungimea de undă, intensitatea și durata expunerii la radiația UV-C pulsată. Această metodă presupune separarea mișcării electronilor și nucleelor, ceea ce permite o modelare precisă a interacțiunilor dintre radiația UV-C pulsată și moleculele de ADN ale agenților patogeni. Deoarece interacțiunile dintre radiația ultravioletă și ADN implică atât tranziții electronice (excitația electronilor în moleculele de ADN), cât și procese nucleare lente (deformări structurale ale macromoleculei), aproximarea B-O permite tratarea acestor procese separat. Toate aceste teorii au fost dezvoltate la aplicarea modelului (B-O) la dimerizarea ADN-ului sub acțiunea radiației UV-C

Câmpul evanescent generat de radiația electromagnetică în metamateriale poate contribui la tranziții energetice rapide, făcând microorganismele mai sensibile la fotoinactivare. Pentru creșterea ratei de inactivare a patogenilor aflați în soluțiile infectate a fost propus utilizarea metamaterialelor translucide din cuarț care îmbunătățesc penetrarea luminii, ceea ce duce la o creștere a câmpului evanescent în jurul fiecărui element al metamaterialului, fapt ce reduce substanțial timpul de expunere.

S-a propus un mecanism inovator de inactivare eficientă a microorganismelor și dezvoltarea unei tehnici de decontaminare bazate pe interacțiunea dintre radiația UV-C pulsată și mișcarea de rotație accelerată a agenților patogeni printre elementele unui metamaterial. Emisia pulsată intensifică efectul germicid prin expunerea intermitentă la doze mari de energie, distrugând rapid structurile celulare. Accelerarea microorganismelor prin mișcare de rotație la unghiuri diferite față de sursa de radiație UV-C, crește substanțial absorbția energetică, astfel se obține o rată de inactivare destul de înaltă.

Recomandări

Radiația UV-C (200–280 nm) este utilizată în sterilizare și decontaminare datorită proprietăților germicide, dar prezintă și riscuri semnificative pentru sănătatea umană și mediu. Din acest motiv, utilizarea sa trebuie să fie reglementată prin norme internaționale și naționale pentru a evita impactul negativ și efectele adverse asupra sănătății populației și desigur asupra mediului.

Expunerea umană trebuie evitată deoarece radiația UV-C poate provoca leziuni oculare (fotokeratită), arsuri cutanate și afectarea ADN-ului celular, crescând riscul de cancer de piele.

Sistemele UV-C trebuie utilizate în medii controlate iar decontaminarea trebuie realizată în absența personalului sau prin utilizarea ecranelor de protecție și a senzorilor de siguranță care opresc emisia la detectarea mișcării umane.

Echipamentele UV-C trebuie să respecte standardele internaționale privind lungimea de undă, doza de radiație și siguranța utilizatorilor.

BIBLIOGRAFIE

1. DOWNES, A., BLUNT, T. The Influence of Light upon the Development of Bacteria. În: *Nature*. 1877, vol. 16, pp. 218. doi.org/10.1038/016218a0.
2. ANDRONIC, Ion, FRUNZA, Maria, DUȘCIAC, Viorel. Unele aspecte fizice ale fotosintezei. În: *Fizica și tehnologiile moderne*. 2007, vol. 5, nr. 1-2.
3. FRENCH, A.P., TAYLOR, E.F. An Introduction to Quantum Physics, În: *Van Nostrand Reinhold*, 1978, London, ISBN 0-442-30770-5.
4. KOWALSKI, W. UVGI disinfection Theory. În: *Ultraviolet germicidal irradiation handbook*, Springer, 2009, pp.17-50.
5. STEPHENS, B., AZIMI, P., THOEMMES, M.S., HEIDARINEJAD, M., ALLEN, J.G., GILBERT, J.A. Microbial exchange via fomites and implications for human health. În: *Curr Pollution Rep*. 2019, vol. 5, pp. 198–213. doi: 10.1007/s40726-019-00123-6.
6. KUTTER, J.S., SPRONKEN, M.I., FRAAIJ, P.L., FOUCHIER, R.A., HERFST, S. Transmission routes of respiratory viruses among humans. În: *Current Opinion in Virology*. 2018, vol. 28, pp. 142–151. doi: 10.1016/j.coviro.2018.01.001.
7. ZHANG, C., LI, Y., SHUAI, D., SHEN, Y., WANG, D. Progress and challenges in photocatalytic disinfection of waterborne viruses: a review to fill current knowledge gaps. În: *Chem. Eng. J*. 2019 vol. 355, pp. 399–415.
8. BUDOWSKY E., BRESLER S., FRIEDMAN E., ZHELEZNOVA N. Principles of selective inactivation of viral genome. În: *Archives of Virology*. 1981, vol. 68, pp. 239–247. doi: 10.1007/BF01314577.
9. CAILLET-FAUQUET, P., DI GIAMBATTISTA, M., DRAPS, M.-L., SANDRAS F., BRANCKAERT, T., DE LAUNOIT, Y., et al. Continuous-flow UVC irradiation: a new, effective, protein activity-preserving system for inactivating bacteria and viruses, including erythrovirus B19. În: *J. Virology Methods*. 2004, vol. 118, pp. 131–139. doi: 10.1016/j.jviromet.2004.02.002.
10. NARITA, K., ASANO, K., NAITO, K., OHASHI, H., SASAKI, M., MORIMOTO, Y., et al. 222-nm UVC inactivates a wide spectrum of microbial pathogens. În: *J. Hosp. Infect*. 2020, vol. 105(3), pp. 459–467. doi: 10.1016/j.jhin.2020.03.030.
11. SHARRER, Mark, J., SUMMERFELT, Steven, T., BULLOCK, Graham, L., GLEASON, Lauren, E., TAEUBER, Jessica. Inactivation of bacteria using ultraviolet irradiation in a recirculating salmonid culture system, În: *Aquacultural Engineering*. 2005, Vol. 33, Issue 2, pp. 135-149, ISSN 0144-8609, doi.org/10.1016/j.aquaeng.2004.12.001.

12. CHEVREFILS, GABRIEL., CARON, É., WRIGHT, HAROLD., SAKAMOTO, G., PAYMENT, P., BARBEAU, B., CAIRNS, B. UV dose required to achieve incremental Log inactivation of bacteria, protozoa and viruses. *În: IUVA News*. 2006, vol. 8, pp. 38-45.
13. Ruetalo N, Businger R, Schindler M. Rapid, dose-dependent and efficient inactivation of surface dried SARS-CoV-2 by 254 nm UV-C irradiation. *În: Euro Surveill*. 2021, vol. 26(42), 2001718. doi: 10.2807/1560-7917.ES.2021.26.42.2001718.
14. STORM, N., MCKAY, LGA., DOWNS, SN., JOHNSON, RI., BIRRU, D., DE SAMBER, M., et al. Rapid and complete inactivation of SARS-CoV-2 by ultraviolet-C irradiation. *În: Sci Rep*. 2020, vol. 10(1), 22421. doi:10.1038/s41598-020-79600-8.
15. HEILINGLOH, C., AUFDERHORST, U., SCHIPPER, L., DITTMER, U., WITZKE, O., YANG, D., et al. Susceptibility of SARS-CoV-2 to UV irradiation. *În: Am J Infect Control*. 2020, vol. 48(10), 1273-5. doi:10.1016/j.ajic.2020.07.031.
16. SABINO, C., SELLERA, F., SALES-MEDINA, D., MACHADO, R., DURIGON E., FREITAS-JUNIOR, L., et al. UV-C (254 nm) lethal doses for SARS-CoV-2. *În: Photodiagn Photodyn Ther*. 2020, vol. 32, 101995. doi:10.1016/j.pdpdt.2020.101995.
17. BEGGS, C., AVITAL, E. Upper-room ultraviolet air disinfection might help to reduce COVID-19 transmission in buildings: a feasibility study. *În: PeerJ*. 2020. PMID: 33083158; PMCID: PMC7566754. doi.org/10.7717/peerj.10196.
18. YI, YANG., HUIHUI, ZHANG, ALVIN, C. Lagrangian modeling of inactivation of airborne microorganisms by in-duct ultraviolet lamps. *În: Building and Environment*. 2021, vol. 188, ISSN 0360-1323, doi.org/10.1016/j.buildenv.2020.107465.
19. YANG, Y., ZHANG, H., NUNAYON, S.S., CHAN, V., LAI, A.C.K. Disinfection efficacy of ultraviolet germicidal irradiation on airborne bacteria in ventilation ducts. *În: Indoor Air*. 2018, vol. 28, pp. 806–817. doi.org/10.1111/ina.12504.
20. YANG, Y., LAI, C.K., CHUNLIANG, W. Study on the disinfection efficiency of multiple upper-room ultraviolet germicidal fixtures system on airborne microorganisms, *În: Building and Environment*. 2016, vol. 103, pp. 99-110, ISSN 0360-1323, doi.org/10.1016/j.buildenv.2016.04.004.
21. RITTER, J.W. *În: Phys.–Chem. Abh*. 1801, vol. 2, Leipzig.
22. BOLTON, J. R. Calculation of ultraviolet fluence rate distributions in an annular reactor: significance of refraction and reflection, *În: Water Research*. 2000, vol 34, Issue 13, pp. 3315-3324, ISSN 0043-1354, doi.org/10.1016/S0043-1354(00)00087-7.
23. BEGGS, C.B., KERR, K.G., DONNELLY, J.K., SLEIGH, P.A., MARA, D.D., CAIRNS, G. An engineering approach to the control of *Mycobacterium tuberculosis* and other

- airborne pathogens: a UK hospital based pilot study. *În: Transactions of the Royal Society of Tropical Medicine and Hygiene*, 2000, vol 94, Issue 2, pp. 141-146, ISSN 0035-9203, doi.org/10.1016/S0035-9203(00)90250-5
24. MODEST, M.F. Radiative Heat Transfer. *În: New York, McGraw-Hill*, 1993.
 25. HASSANPOUR, A., JALALI, A., RAISEE, M. *et al.* Development and modeling of a novel type of photoreactors with exterior ultraviolet (UV) reflector for water treatment applications. *În: Sci Rep.* 2023, vol. 13, pp. 76-96 doi.org/10.1038/s41598-023-34799-0.
 26. ROBERTSON, R. *et al.* Optical imaging of Cerenkov light generation from positron-emitting radiotracers. *În: Phys. Med. Biol.* 2009, vol. 54. 10.1088/0031-9155/54/16/N01
 27. BERMÚDEZ, A., GÓMEZ, D., SALGADO, P. Some solutions of Maxwell's equations in free space. *În: Mathematical Models and Numerical Simulation in Electromagnetism, Springer.* 2014, vol 74, doi.org/10.1007/978-3-319-02949-8_5
 28. MOON, P., SPENCER, D. E. Field Theory Handbook: Including Coordinate Systems, Differential Equations and Their Solutions. 1998, ISBN 13: 9783540184300
 29. KATHERINE, L., BIALKA, ALID., VIRENDRA M. PURI, Modeling the inactivation of Escherichia coli O157:H7 and Salmonella enterica on raspberries and strawberries resulting from exposure to ozone or pulsed UV-light. *În: Journal of Food Engineering.* 2008, vol. 85, Issue 3, pp. 444-449, ISSN 0260-8774, doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.08.007.
 30. KRISHNAMURTHY, K., DEMIRCI, A., IRUDAYARAJ, JOSEPH. Inactivation of Staphylococcus aureus by Pulsed UV-Light Sterilization. *În: Journal of food protection.* vol. 67. doi.10.4315/0362-028X-67.5.1027
 31. NERANDZIC, M., FISHER, C., DONSKEY, C. Sorting through the Wealth of Options: Comparative Evaluation of Two Ultraviolet Disinfection Systems. *În: PloS one.* 2014, vol 9, e107444. doi.10.1371/journal.pone.0107444.
 32. Nerandzic, M. *et all.* Evaluation of a Pulsed Xenon Ultraviolet Disinfection System for Reduction of Healthcare-Associated Pathogens in Hospital Rooms. *În: Infection Control and Hospital Epidemiology.* 2014, vol. 36, pp 192-197. DOI: 10.1017/ice.2014.36
 33. GLAAB, J., LOBO-PLOCH, N., CHO, H.K., FILLER, T., GUNDLACH, H., GUTTMANN, M., HAGEDORN, S., LOHAN, S.B., MEHNKE, F., SCHLEUSENER, J., *et all.* Skin tolerant inactivation of multiresistant pathogens using far-UVC LEDs. *În: Sci. Rep.* 2021, vol. 11, doi: 10.1038/s41598-021-94070-2.
 34. FLORES, G. E., ESCALANTE-GARCÍA, N., ALANIS-LUMBRERAS, D., IVANOV-TSONCHEV, R., LARA-HERRERA, A., OLVERA-GONZALEZ, E. Continuous and

- Pulsed Ultraviolet-C LED on Germicidal Effect and Energy Consumption in Fresh Products: Applications in Tomatoes as a Model. *În: Foods*. 2022 Nov 14, vol. 11(22), pp. 3636. doi: 10.3390/foods11223636. PMID: 36429226; PMCID: PMC9689454.
35. BARRETT, S. F., PACK, D. J. Timing subsystems. *Microcontrollers Fundamentals for Engineers and Scientists*. *În: Morgan and Claypool Publishers*. 2006, pp. 51–64, ISBN 1-598-29058-4.
 36. COX, J. F., CHARTRAND, LEO. Nonsinusoidal oscillators. *Fundamentals of Linear Electronics: Integrated and Discrete*. *În: Cengage Learning*. 2001, pp. 511–584. ISBN 0-766-83018-7.
 37. SQUIRES, G. L. *Practical Physics*. Cambridge University Press. June 26, 2001. ISBN 978-0-521-77940-1. doi:10.1017/cbo9781139164498.
 38. FRIIS, I., VERKHOVTSEV, A. V., SOLOV'YOV, I. A., SOLOV'YOV, A. V. Lethal DNA damage caused by ion-induced shock waves in cells. *În: Phys. Rev. E*. 2021, vol. 104, 054408 doi.org/10.1103/PhysRevE.104.054408
 39. OPREA, M., BOGDAN, A. S., MUHAMMAD, A. M., MIHAILESCU, M., SINZIANA, A., FILIP, A., MIHAILESCU, I., MIHAILESCU, C., RISTOSCU, C. Mathematical formalism of femtosecond laser-deoxyribonucleic acid interaction: thermal evolution. *În: Heliyon*. 2022, vol. 8, Issue 11, ISSN 2405-8440.
 40. OKALY, J. B., MVOGO, A., TABI, C. B., EKOBENA FOU DA, H. P., KOFANÉ, T. C. Base pair opening in a damped helicoidal Joyeux-Buyukdagli model of DNA in an external force field. *În: Physical Review E*. 2020, vol. 102(6). doi:10.1103/physreve.102.062402
 41. CHANG, J. C., OSSOFF, S. F., LOBE, D. C., DORFMAN, M. H., DUMAIS, C. M., QUALLS, R. G., AND JOHNSON, J. D. UV inactivation of pathogenic and indicator microorganisms. *În: Appl. Environ. Microbiol.* 1985, vol. 49, pp. 1361–1365.
 42. BANK, H. L., JOHN, J., SCHMEHL, M. K., and DRATCH, R. J. Bactericidal effectiveness of modulated UV light. *În: Appl. Environ. Microbiol.* 1990, vol. 56, pp. 3888–3889.
 43. ANDERSON, J. G., ROWAN, N. J., MACGREGOR, S. J., FOURACRE, R. A., and FARISH, O. Inactivation of food-borne enteropathogenic bacteria and spoilage fungi using pulsed-light. *În: IEEE Trans. Plasma. Sci.* 2000, vol. 28, pp. 83–88.
 44. PINAK, M. Enzymatic recognition of radiation-produced oxidative DNA lesion. Molecular dynamics approach. *Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry of* *În: Biopolymers*, 2006, pp. 191–210. doi:10.1016/b978-044452220-7/50074-5
 45. SCHREIER, W. J., SCHRADER, T. E., KOLLER, F. O., GILCH, P., CRESPO-HERNANDEZ, C. E., SWAMINATHAN, V. N., ... KOHLER, B. Thymine Dimerization

- in DNA is an Ultrafast Photoreaction. În: *Science*, 2007, pp. 625–629, 315(5812). doi:10.1126/science.1135428
46. SORG, OLIVIER & JANER, VICTOR & ANTILLE, CHRISTOPHE & CARRAUX, PIERRE & LEEMANS, EVELYNE & MASGRAU, ELIZABETH & SAURAT, JEAN-HILAIRE & SALOMON, DENIS. Effect of Intense Pulsed-Light Exposure on Lipid Peroxides and Thymine Dimers in Human Skin In Vivo. În: *Archives of dermatology*. 2007, vol. 143, pp. 363-369. doi.10.1001/archderm.143.3.363.
 47. ŠPONER, J., LESZCZYNSKI, J., and HOBZA, P. Hydrogen Bonding and Stacking of DNA Bases: A Review of Quantum-chemicalab initioStudies. În: *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*. 1996, vol. 14(1), pp. 117–135.
 48. Steitz, T.A. DNA polymerases: structural diversity and common mechanisms. În: *J. Biol. Chem.* 1999, vol. 274 (25). doi:10.1074/jbc.274.25.17395. PMID 10364165.
 49. GENTIL, A., LE PAGE, F., MARGOT, A., LAWRENCE, C.W., BORDEN, A., SARASIN, A. Mutagenicity of a Unique Thymine-Thymine Dimer or Thymine-Thymine Pyrimidine Pyrimidone (6–4) Photoproduct in Mammalian Cells, În: *Nucleic Acids Research*, 1996, vol 24(10), pp. 1837–1840, doi.org/10.1093/nar/24.10.1837
 50. FAUSTINO, R., FARIA, M., TEIXEIRA, M., PALAVRA, F., SARGENTO, P., DO CEU COSTA, M. Systematic Review and Meta-analysis of the Prevalence of Coronavirus: One Health Approach for a Global Strategy. În: *One Health*. 2022, vol. 14, 100383. doi: 10.1016/j.onehlt.2022.100383.
 51. ILYAS, S., SRIVASTAVA, R., KIM, H. Disinfection technology and strategies for COVID-19 hospital and bio-medical waste management. În: *Sci Total Environ*. 2020 Dec 20, vol. 749, 141652. doi: 10.1016/j.scitotenv.2020.141652.
 52. SAKUDO, A. Disinfection, Sterilization, and Decontamination of Pathogens in Medicine. În: *Microorganisms*. 2023, vol. 11(4) p. 990. doi:10.3390/microorganisms11040990.
 53. BARCELO, D. An environmental and health perspective for COVID-19 outbreak: meteorology and air quality influence, sewage epidemiology indicator, hospitals disinfection, drug therapies and recommendations. În: *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2020, vol. 8. doi: 10.1016/j.jece.2020.104006.
 54. STRETT, DZH.V. (Lord Rayleigh), *Teoriya zvuka* (Theory of Sound). În: *Gostekhizdat*. Moscow, 1955, vol. 2.
 55. DEBYE, P. În: *Ann. Physik*, 1909, vol. 30, p. 57.
 56. MIE, G. În: *Ann. Physik*, 1908, vol. 25, p. 377.
 57. DIXIT, S. K. Filtering Resonators. În: *Nova Science Publishers*. 2001.

58. RABUS, D. G. Integrated Ring Resonators. *În: The Compendium (Springer). Springer Series in Optical Sciences.* 2007. doi:10.1007/978-3-540-68788-7
59. YARIV, A. Critical coupling and its control in optical waveguide-ring resonator systems. *În: IEEE Photon. Technol. Lett.* vol. 14, pp. 483–485
60. YARIV, A.: Universal relations for coupling of optical power between microresonators and dielectric waveguides. *În: Electron. Lett.* vol. 36, pp. 321–322
61. GORODETSKY, M. L., and ILCHENKO, V. S. Optical microsphere resonators: optimal coupling to high-Q whispering-gallery modes. *În: Journal of the Optical Society of America B.* 1999, vol. 16(1), p. 147. doi:10.1364/josab.16.000147
62. TSEN, S.W., WU, T.C., KIANG, J.G., TSEN, K.T. Prospects for a novel ultrashort pulsed laser technology for pathogen inactivation. *În: J Biomed Sci.* 2012 Jul 6, vol. 19(1), p. 62. Doi: 10.1186/1423-0127-19-62.
63. YONG, E. Yeast suggests speedy start for multicellular life. *În: Nature.* 2012, doi:10.1038/NATURE.2012.9810.
64. TUIENG, R.J., CARTMELL, SH., KIRWAN, CC., SHERRATT, MJ. The Effects of Ionising and Non-Ionising Electromagnetic Radiation on Extracellular Matrix Proteins. *În: Cells.* 2021 Nov 5, vol. 10(11), p. 3041. doi: 10.3390/cells10113041. PMID: 34831262.
65. REED, N.G., The history of ultraviolet germicidal irradiation for air disinfection. *În: Public Health Report.* 2010 Jan-Feb, vol. 125(1), pp. 15-27. doi: 10.1177/003335491012500105. PMID: 20402193; PMCID: PMC2789813.
66. International Organization for Standardization ISO 21348 Definitions of Solar Irradiance Spectral Categories. 2007. [(accessed on 24 April 2021)]. Versiune online: https://web.archive.org/web/20131029233428/http://www.spacewx.com/pdf/SET_21348_2004.pdf
67. YAMANO, N., KUNISADA, M., KAIDZU, S., SUGIHARA, K., NISHIAKI-SAWADA, A., OHASHI, H., YOSHIOKA, A., IGARASHI, T., OHIRA, A., TANITO, M., NISHIGORI, C. Long-term Effects of 222-nm ultraviolet radiation C Sterilizing Lamps on Mice Susceptible to Ultraviolet Radiation. *În: Photochem Photobiol.* 2020 Jul, vol. 96(4), pp. 853-862. doi: 10.1111/php.13269.
68. DALIA, J., HOSAHALLI, S. R. Pulsed light technology to enhance food safety and quality: a mini-review, Current Opinion. *În: Food Science.* 2018, vol. 23, pp. 70-79, ISSN 2214-7993, doi.org/10.1016/j.cofs.2018.06.004
69. JI, C., YANG, B., YANG, Z., TU, Y., YANG, YL., HE, L., BI, ZG. Ultra-violet B (UVB)-induced skin cell death occurs through a cyclophilin D intrinsic signaling pathway. *În:*

- Biochem Biophys Res Commun.* 2012 Sep 7, vol. 425(4), pp. 825-834. doi: 10.1016/j.bbrc.2012.07.160.
70. TEDETTI, M., SEMPÉRÉ, R. Penetration of ultraviolet radiation in the marine environment. În: *Photochem Photobiol.* 2006, vol. 82(2). doi: 10.1562/2005-11-09-IR-733.
 71. MEINHARDT, M., KREBS, R., ANDERS, A., HEINRICH, U., TRONNIER, H. Wavelength-dependent penetration depths of ultraviolet radiation in human skin. În: *J Biomed Opt.* 2008 Jul-Aug, vol. 13(4), pp. 030-044. doi: 10.1117/1.2957970.
 72. BIASIN, M., BIANCO, A., PARESCHI, G. et al. UV-C irradiation is highly effective in inactivating SARS-CoV-2 replication. În: *Sci Rep.* 2021, vol. 11, pp. 60-62.
 73. MILLER, R.L., PLAGEMANN, P.G. Efectul luminii ultraviolete asupra mengovirusului: formarea de dimeri de uracil, instabilitatea și degradarea capsidei și legarea covalentă a proteinei la ARN viral. În: *J Virol.* 1974 Mar, vol. 13(3), pp. 729-739. doi.org/10.1128/jvi.13.3.729-739.1974
 74. DUNN, J., GRIDER, M.H. Physiology, Adenosine Triphosphate. În: *StatPearls Publishing.* 2024. PMID: 31985968.
 75. QUEVEDO, R., BASTÍAS, J., ESPINOZA TELLEZ, T., RONCEROS, B., BALIC, IVÁN, M., MUÑOZ, OCIEL. Inactivation of Coronaviruses in food industry: The use of inorganic and organic disinfectants, ozone, and UV radiation. În: *Scientia Agropecuaria.* 2020, vol. 11, pp. 257-266. doi.10.17268/sci.agropecu.2020.02.14.
 76. SCHUBERT, M., WILHELMI, B. Nonlinear Optics and Quantum Electronics. În: *Wiley.* 1986, 752 p., ISBN 0471088072, 9780471088073
 77. SHEN, Y.R., BLOEMBERGEN, N. Theory of simulated Brillouin and Raman scattering. În: *Phys Rev*, 1965, vol. 137.
 78. BLOMBERGEN, N. Nonlinear Optics (4th Edition), În: *Wold Scientific*, 1998
 79. MINCK, R.W., TERHUNE, R.W., and GADO, W.G. Laser-stimulated Raman effect and resonant four photon interactions in gases H₂, D₂ and CH₄. În: *Appl. Phys. Lett.* 1969, vol.3, pp. 181–184 doi.org/10.1063/1.1753840
 80. Begley, R.F., Harvey, A.B., and Byer, R.L. Coherent anti-Stokes Raman spectroscopy. În: *Appl. Phys. Lett.* 1974, vol. 25, pp. 387-390.
 81. Herzberg, G. Molecular Spectra and Molecular Structure II-Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules. În: *Van Nostrand, Princeton.* N.J, 1945, p. 265–266.
 82. YONG-XIN YAN, J., GAMBLE, E.B., JR., NELSON, A., and KEITH, A. Impulsive stimulated scattering: General importance in femtosecond laser pulse interactions with matter, and spectroscopic applications, În: *Chem. Phys.* 1985, vol. 83(11), pp. 5391-5399.

83. MANNIGE, R.V., BROOKS, C.L. Periodic Table of Virus Capsids: Implications for Natural Selection and Design. Periodic Table of Virus Capsids. În: *Implications for Natural Selection and Design. PLoS ONE* vol. 5(3): e9423.
84. YONG-XIN, Y., EDWARD, B., GAMBLE, JR., AND NELSON, K. A. Impulsive stimulated scattering: General importance in femtosecond laser pulse interactions with matter, and spectroscopic applications, În: *Chem. Phys.*, Vol. 83, No. 11, pp. 5391-53
85. GILMORE, R. Catastrophe Theory for Scientist and Engineering. În: *Wiley-Inter-science Publication*, NY, 1981, V 1 & V 2.
86. TSEN, KONG-THON, TSEN, SHAW-WEI, WU, T.C., KAREN, K., AND JACOBS, B. Selective destruction of viruses with ultrashort pulsed lasers, În: *SPIE*, vol. 630 10.1117/2.1200911.1845 1
87. GAMALY, E.G., RODE A.V. Physics of ultra-short laser interaction with matter: From phonon excitation to ultimate transformations, În: *Progress in Quantum Electronics*. 2013, vol. 37, Issue 5, pp. 215-323, ISSN 0079-6727.
88. SAHAYA, G.R., YADAV, J., RAJPOOT, J., JOSHI, N., NAGOTU, S. Contribution of yeast models to virus research. În: *Appl Microbiol Biotechnol*. 2021 Jun, vol. 105(12), pp. 4855-4878. doi: 10.1007/s00253-021-11331-w.
89. VENKATESHAIAH, A., PADIL, V.V.T., NAGALAKSHMAIAH, M., WACLAWEK, S., ČERNÍK M, VARMA RS. Microscopic Techniques for the Analysis of Micro and Nanostructures of Biopolymers and Their Derivatives. În: *Polymers (Basel)*. 2020 Feb 27, vol. 12(3), p. 512. doi: 10.3390/polym12030512.
90. FISCHER, E.R., HANSEN, B.T., NAIR, V., HOYT, FH., DORWARD, D.W. Scanning electron microscopy. În: *Curr Protoc Microbiol*. 2012 May;Chapter 2:Unit 2B.2.. doi: 10.1002/9780471729259.mc02b02s25.
91. LAHIJI, R.R., XU, X., REIFENBERGER, R., RAMAN, A., RUDIE, A., MOON, RJ. Atomic force microscopy characterization of cellulose nanocrystals. În: *Langmuir*. 2010 Mar 16, vol. 26(6), pp4480-8. doi: 10.1021/la903111j. PMID: 20055370.
92. WESTPHAL, V., HELL, S.W. Nanoscale resolution in the focal plane of an optical microscope. În: *Phys Rev Lett*. 2005, Apr 15, vol. 94(14), pp. 143903. doi: 10.1103/PhysRevLett.94.143903. Epub 2005 Apr 15. PMID: 15904066.
93. HAYES, B.S., GAMMON, L.M. Optical Microscopy of Fiber Reinforced Composites. În: *ASM International; Materials Park, OH, USA: 2010*
94. ENAKI, N.A., PASLARI, T., BAZGAN, S., STARODUB, E., MUNTEANU, I., TURCAN, M., EREMEEV, V., PROFIR, A., MIHAILESCU, I.N. Dependența de

- intensitatea radiației UVC a ratei de decontaminare a agenților patogeni: teorie și experiment semiclasic. În: *Euro Fiz. J. Plus.* 2022, vol. 137, p. 1047. <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03252-y>
95. TIM, SANDLE. 17 - Rapid microbiological methods. În: *Tim Sandle, Pharmaceutical Microbiology, Woodhead Publishing.* 2016, pp. 219-231, ISBN 9780081000229, doi.org/10.1016/B978-0-08-100022-9.00017-7.
 96. ROMANO, R.C., RESTUCCIA, C., RUTIGLIANO, C.A.C., SPARTÀ, S., PARAFATI, L., BARBAGALLO, R.N., MURATORE, G. Effect of UV-C Treatment on Shelf Life of Soft Wheat Bread (Bun). În: *Foods.* 2024 Mar 20, vol. 13(6), p. 949. doi: 10.3390/foods13060949.
 97. HANSON, DAVID. "The Born-Oppenheimer Approximation". Chemistry Libretexts. În: *Chemical Education Digital Library.* Retrieved 2 August 2022.
 98. BORN, M., OPPENHEIMER, J. R. Zur Quantentheorie der Molekeln [On the Quantum Theory of Molecules]. În: *Annalen der Physik (in German).* 1927 vol. 389(20), p. 457–461.
 99. THOMPSON, D.C., RODRÍGUEZ, J.I. An introduction to quantum chemistry, chapter 2. În: *Juan I. Rodríguez, Fernando Cortés-Guzmán, James S.M. Anderson, Advances in Quantum Chemical Topology Beyond QTAIM, Elsevier,* 2023, pp. 21-36, ISBN 9780323908917, <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-90891-7.00012>
 100. KUZMINOV, A. Pyrimidine dimers. În: *Brenner's Encyclopedia of Genetics.* 2013, vol. 5, p. 538, doi.org/10.1016/B978-0-12-374984-0.01244-4
 101. SCHREIER, W.J., SCHRADER, W.J., KOLLER, F.O., GILCH, P., CRESPO-HERNANDEZ, C.E., SWAMINATHAN, V.N., CARELL, T., ZINTH, W., KOHLER, B. Thymine dimerization in DNA is an ultrafast photoreaction. În: *Science* vol. 2017, vol. 315, p. 625. doi.org/10.1126/science.1135428.
 102. RASTOGI, R.P., RICHA, A., KUMAR, M.B., SINHA. R.P. Molecular mechanisms of ultraviolet radiation-induced DNA damage and repair. În: *J. Nucleic Acids* 2010, pp. 592980
 103. KUZMINOV, A. Pyrimidine dimers, Brenner's. În: *Encyclopedia of Genetic.* 2013, vol. 5, p. 538. doi.org/10.1016/B978-0-12-374984-0.01244-4.
 104. PILAR, F.L. Element. În: *Quant. Chem.* (McGraw-Hill, New York, 1968)
 105. JAISWAL, V.K., SEGARRA-MARTI, J., MARAZZI, M., ZVEREVA, E., ASSFELD, S., MONARI, A., GARAVELLI, M., RIVALTA, I. First-principles characterization of the singlet excited state manifold in DNA/RNA nucleobases. În: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020, vol. 22, p. 15496. <https://doi.org/10.1039/D0CP01823F>

106. SEGARRA-MARTI, J., MARAZZI, M., ZVEREVA, E., ASSFELD, S., BRAZARD, J., DUMONT, E., ASSFELD, X., HAACKE, S., GARAVELLI, M., MONARI, A., and LÉONARD, J. Ultrafast and Radiationless Electronic Excited State Decay of Uracil and Thymine Cations: Computing The Effects of Dynamic Electron Correlation. *În: Journal of Chemical Theory and Computation*. 2018, vol. 14, pp. 2570-2585
107. MARIAN, C., NOLTING, D., WEINKAUF, R. The electronic spectrum of protonated adenine: Theory and experiment. *În: Phys. Chem. Chem. Phys.* 2005, vol. 7, p. 3306
108. DUAN, H.G., PROKHORENKO, V.I., COGDELL, R.J., ASHRAF, K., STEVENS, A.L., THORWART, M., DWAYNE MILLER, R. J. Nature does not rely on long-lived electronic quantum coherence for photosynthetic energy transfer. *În: Proceedings of the National Academy of Sciences*. (2017), vol. 114, pp.84-93 doi.org/10.1073/pnas.1702261114
109. BAKER, N.R. Chlorophyll fluorescence: a probe of photosynthesis in vivo. *În: Annual Rev. Plant Biol.* vol. 59, p. 89. doi.org/10.1146/annurev.arplant.59.032607.092759
110. Wang, H., Chen, X. How Does Thymine DNA Survive Ultrafast Dimerization Damage? *În: Molecules*, (2017, vol. 22(1), p. 60. doi.org/10.3390/molecules22010060
111. PEPINO, A.J., SEGARRA-MARTÍ, J., NENOV, A., RIVALTA, I., IMPROTA R., GARAVELLI, M. UV-induced long-lived decays in solvated pyrimidine nucleosides resolved at the MS-CASPT2/MM level. *În: Phys. Chem. Chem. Phys.* 2018, vol. 20, pp. 68776890.
112. MARIAN, C., NOLTING, D., WEINKAUF, R. The electronic spectrum of protonated adenine: Theory and experiment. *În: Phys. Chem. Chem.* 2005, Phys. vol.7, pp. 3306. doi.org/10.1039/B507422C
113. MARTINEZ, C.R., IVERSON, B.L. Rethinking the term ‘pi-stacking’. *În: Chem. Sci.* 2012, vol. 3, pp. 2191. doi.org/10.1039/C2SC20045G
114. HURET J.L. et al. Atlas of genetics and cytogenetics in oncology and haematology. *În: Nucleic Acids Res.* 2013, vol. 41, pp. 19–24
115. GUERRA, C.F., BICKELHAUPT, F.M., SNIJDERS, J.G., BAERENDS, E.J. Hydrogen Bonding in DNA Base Pairs: Reconciliation of Theory and Experiment. *În: J. Am. Chem. Soc.* 2000, vol. 122(17), pp. 4117. doi.org/10.1021/ja993262d
116. ENAKI, N., BIZGAN, S., NISTREANU, A., TONU, V., TURCAN, M., PISLARI, T., STARODUB, E., PROFIR, A., POPESCU-PELIN, G.-F., BADICEANU, M., RISTOSCU C.-G., and MIHAILESCU, I.N. Efficient microbial decontamination of translucent liquids and gases using optical metamaterials. *În: Advanced Surface Engineering Research*.

(IntechOpen Book Series, 2018). doi.org/10.5772/intechopen.80639

117. ENAKI, N., STARODUB, E., PISLARI, T., TURCAN, M., BIZGAN, S Increasing of decontamination rate of infected fluid by rotation channels under the dispersion of ultraviolet C radiation by composite metamaterial. În: *Phys. Sci. Biophys. J.* 2021, vol. 5.
118. ASHKIN, A., DZIEDZIC, J.M., BJORKHOLM, J.E., CHU, S. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles. În: *Opt. Lett.* 1986, vol. 11(5), pp. 288–290
119. KAWATA, S., AND TANI, T. Optically driven Mie particles in an evanescent field along a channelled waveguide În: *Opt. Lett.* 1996, vol. 21, pp. 1768-1770.
120. SKELTON, S.E., SERGIDES, M., PATEL, R., KARCZEWSKA, E., MARAGÓ, O.M., JONES, P.H. Evanescent wave optical trapping and transport of micro- and nanoparticles on tapered optical fibers. În: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* 2012, vol. 113, issue 18, pp. 2512-2520.
121. GORDON, J. P. Radiation Forces and Momenta in Dielectric Media. În: *Physical Review A*, 1973 vol. 8, Issue 1, pp. 14-21, doi.org/10.1103/PhysRevA.8.14
122. HARADA, Y., ASAKURA, T. Radiation Forces on a dielectric sphere in the Rayleigh Scattering Regime. În: *Optics Communications.* 1996, vol. 124 (5–6), pp. 529–541.
123. BRADSHAW, D.S., ANDREWS, D.L. Manipulating particles with light: radiation and gradient forces. În: *Eur. J. Phys.* 2017, vol. 38, pp. 034008.
124. MANKAR, V., DHENGRE, A., AGASHE, N., RODGE, H., CHANDI, D.H., CHANDI, D.H. Ultraviolet irradiation doses for coronavirus inactivation. În: *Review and analysis of coronavirus photo inactivation studies. Int. J. Health Sci.* 2022, vol. 6, pp. 466–472. doi.org/10.53730/IJHS.V6NS2.5038.
125. ENAKI, N.A., **MUNTEANU, I.**, PASLARI, T., TURCAN, M., STARODUB, E., BAZGAN, S., PODOLEANU, D., RISTOSCU, C., ANGHEL, S., BADICEANU, M., Anghel, S., Badiceanu, M., Mihailescu, I.N. Topological Avenue for Efficient Decontamination of Large Volumes of Fluids via UVC Irradiation of Packed Metamaterials. În: *Materials.* 2023, vol. 16, pp. 45-59.
126. PASLARI, T., STARODUB, E., TURCAN, M., **MUNTEANU, I.**, BAZGAN, S., ENAKI, N.A. Improvement of ultraviolet C decontamination rate using composite quartz metamaterial. În: *GSC Bio Pharm Sciences.* 2022, vol. 20(3), pp. 187—191. doi.10.30574/gscbps.2022.20.3.0263.
127. **MUNTEANU, I.**, TURCAN, M., STARODUB, E., BAZGAN, S., NISTREANU, A., PASLARI, T., ENAKI, N.A. Ultraviolet C Radiation for Disinfection and Protection Using

- Periodical Optical Structure for Dental Implant. În: *IEEE Xplore, E-Health and Bioengineering Conference (EHB)*, 17-18 November 2022, Iasi, Romania p. 1—4 . Doi: 10.1109/EHB55594.2022.9991449
128. ENAKI, N.A., PROFIR, A., CIOBANU, N., BAZGAN, S., NISTREANU, A., TURCAN, M., STARODUB, E., PASLARI, T., RISTOSCU, C., BADICEANU, M., MIHAILESCU, I.N. Optical metamaterials for decon-tamination of translucent liquids and gases, În: *J Phys D*. 2018, vol. 51, pp.385101-11.
 129. PEREPECHKIN, L.P., PEREPECHKINA, N.P. Chemistry and technology of chemical fibres hollow fibres for medical applications. a review a few words on mass transfer processes in the body. În: *Fibre Chem*. 1999, vol. 31, pp. 411–420
 130. CADWELL, J. The hollow fiber infection model for antimicrobial pharmacodynamics and pharmacokinetics. În: *J. Drug Metab. Toxicol*. 2017, vol. 8. doi.org/10.4172/2157-7609-C1-008.
 131. MUNTEANU, I., STARODUB, E., BAZGAN, S., TURCAN, M., PASLARI, T., PODOLEANU, D., ENAKI, N.A. Ultraviolet C intensity dependence of decontamination efficiency for pathogens as function of repacked metamaterials with screw channels. În: *Eur Biophys J*. 2024, vol. **53(3)**, pp. 133—145. doi. 10.1007/s00249-024-01702-2
 132. SADOUKI, Z., et al. Application of the hollow fibre infection model (HFIM) in antimicrobial development: A systematic review and recommendations of reporting. În: *J. Antimicrob. Chemother*. 2021, vol. 76, pp. 2252–2259. doi.org/10.1093/JAC/DKAB160
 133. IMTIAZ, A.; OTHMAN, M.H.D.; JILANI, A.; KHAN, I.U.; KAMALUDIN, R.; AYUB, M.; SAMUEL, O.; KURNIAWAN, T.A.; HASHIM, N.A.; PUTEH, M.H. A Critical review in recent progress of hollow fiber membrane contactors for efficient CO2 separations. În: *Chemosphere*. 2023, vol. 325, pp. 138300.
 134. BORAAS, M.E.; SEALE, D.B.; BOXHORN, J.E. Phagotrophy by a flagellate selects for colonial prey: A possible origin of multicellularity. În: *Evol. Ecology* (1998). Vol 12, p. 153 <https://doi.org/10.1023/A:1006527528063>
 135. E. B. Wilson Jr. et al. În: *J. Electrochem. Soc*. 1955. vol. 102 (235) Ca, DOI 10.1149/1.2430134

DECLARAȚIA PRIVIND ASUMAREA RĂSPUNDERII

Subsemnatul, declar pe răspundere personală că materialele prezentate în teza de doctorat sunt rezultatul propriilor cercetări și realizări științifice. Conștientizez că, în caz contrar, urmează să suport consecințele în conformitate cu legislația în vigoare.

MUNTEANU Ion

Data 15.07.2025



MULȚUMIRI

Exprim sincere mulțumiri conducătorului de teză, domnului doctor în științe fizico-matematice, profesor universitar Nicolae ENACHI, precum și membrilor îndrumători: doamnei doctor în științe fizico-matematice, conferențiar universitar Aurelia PREPELIȚĂ, domnului doctor în științe fizico-matematice, conferențiar universitar Nellu CIOBANU și doamnei doctor în științe fizico-matematice, cercetător științific superior Marina ȚURCAN, pentru recomandările valoroase, îndrumarea dedicată și sprijinul constant, care au contribuit esențial la elaborarea tezei, structurarea conceptuală a acesteia și răspunsul prompt la rezultatele obținute.

Exprim profunda mea recunoștință întregii echipe a Laboratorului „Laser-Surface-Plasma Interactions”, Departamentul Lasere, Institutul Național pentru Fizica Laserelor, Plasmei și Radiațiilor (INFLPR), Măgurele, România, condusă de domnul doctor în fizică, profesor universitar Ion MIHĂILESCU, pentru contribuția esențială la realizarea măsurărilor, sprijinul oferit în identificarea surselor bibliografice și analiza literaturii de specialitate, precum și pentru susținerea morală acordată în momentele dificile.

Îmi exprim profunda gratitudine tuturor profesorilor din cadrul Facultății de Fizică și Inginerie a Universității de Stat din Moldova, precum și profesorilor de la Departamentul Bazele Proiectării Mașinilor, Facultatea Inginerie Mecanică, Industrială și Transporturi a Universității Tehnice a Moldovei, cât și tuturor dascălilor din cadrul Liceului Teoretic Lăpușna, satul Lăpușna, pentru cunoștințele valoroase împărtășite și dedicarea remarcabilă în activitatea didactică.

Adresez mulțumiri speciale regretatului domn doctor habilitat, profesor universitar Mihail CARAMAN, care a oferit sfaturi valoroase și sprijin semnificativ în dezvoltarea unor concepte de echipamente destinate inactivării agenților patogeni prin utilizarea radiațiilor UV-C.

În încheiere, aduc cele mai sincere și călduroase mulțumiri familiei mele. Îi mulțumesc soției mele dragi, Ana, pentru iubirea, încurajările și răbdarea sa, precum și fiicei mele, Felicia, care, pe măsură ce crește, demonstrează tot mai mult un talent remarcabil de inginer prin invențiile sale ingenioase și admirabile pentru o vârstă atât de fragedă. De-a lungul studiilor mele, deși am fost aproape de ele din punct de vedere fizic, am fost adesea distant, fiind absorbit de activități și acordându-le prea puțină atenție. Cu toate acestea, ele mi-au fost mereu alături, oferindu-mi susținere și încurajări pentru a-mi continua parcursul. Fără sprijinul lor necondiționat și dragostea constantă, nu aș fi reușit niciodată să finalizez ceea ce am început sau să depășesc momentele cele mai dificile.

Cu deosebită stimă și respect,

Ion MUNTEANU

CURRICULUM VITAE

ION MUNTEANU



Date personale

- ION MUNTEANU
- goretz19@yahoo.com
- +373-685-11-455
- 2/3 Hancesti street, ap 38
MD-2006 Chisinau
- 19 Mai 1982
- Hîncești, com. Lăpușna
- Masculin
- R.Moldova, Cetățenie Română

Limbi străine

Româna
Rusa
Engleza
Franceza

Educație

- Liceul Teoretic Lăpușna** 1988 - 2000
Liceul Teoretic Lăpușna
- Fizician** 2000 - 2004
Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Fizică, Specialitatea Electronica, str. Alexei Mateevici 60, Chișinău, Moldova
- Inginer IT** 2004 - 2010
Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Fizică, Specialitatea Tehnologii Informationale, str. Alexei Mateevici 60, Chișinău, Moldova
- Masterat** 2010 - 2012
Universitatea Tehnică a Moldovei, Facultatea Inginerie și management în construcția de mașini, Ingineria sistemelor de conversie a energiei regenerabile, bd. Ștefan cel Mare, 168, Chișinău, Moldova, MD-2004
- Masterat** 2012 - 2014
Universitatea de stat din Moldova, Facultatea Științe Economice, str. Alexei Mateevici 60, Chișinău, Moldova
- Doctorat** Nov. 2021 - Prezent
ȘCOALA DOCTORALĂ ȘTIINȚE ALE NATURII, USM, Universitatea de stat din Moldova, str. Alexei Mateevici 60, Chișinău, Moldova

Experiență profesională

- Inginer Coordonator gr.2, USM** 2004 - 2006
USM, str. Alexei Mateevici 60, Chișinău, Moldova
- Life Guard** Mai 2006 - Nov. 2006
Holiday IN, Statele Unite ale Americii
- Inginer** 2006 - 2007
S.R.L. ACOSSTUDIO
- Inginer proiectant** Iun. 2008 - Oct. 2008
SC Cupolele de Aur
- Administrator, contabil-auditor** 2012 - 2021
S.R.L. TEZAUR STAR
- Inginer Superior** Mart. 2021 - Dec. 2021
Institutul de Fizică Aplicată, str. Academiei, 5 Chișinău, MD-2028 MOLDOVA
- Cercetător științific** Ian. 2022 - Prezent
Institutul de Fizică Aplicată, str. Academiei, 5 Chișinău, MD-2028 MOLDOVA
- Asistent universitar** Nov. 2022 - Prezent
Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie „Nicolae Testemițanu”, Catedra de fiziologie a omului și biofizică, str. Nicolae Testemițanu, 27, mun. Chișinău, MD-2025, Republica Moldova