

UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZARE BIOFIZICĂ ȘI FIZICĂ MEDICALĂ

LUCRARE DE DISERTAȚIE

Coordonator științific:
Conf. Dr. Nicolae Leopold

Absolvent:
Bojodi Alex Robert

2025

UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZARE BIOFIZICĂ ȘI FIZICĂ MEDICALĂ

LUCRARE DE DISERTAȚIE

Metodă senzorială pentru detectarea durtății apei pe baza
agregării nanoparticulelor metalice.

Coordonator științific:
Conf. Dr. Nicolae Leopold

Absolvent:
Bojodi Alex Robert

2025

Cuprins

Abstract.....	4
Introducere.....	5
Cap. Interacțiunea materiei cu lumina.....	5
1.1 Interacțiunea materiei cu lumina.....	5
1.2 Absorbția.....	8
1.3. Rezonanța Plasmei.....	19
1.4 Nanoparticule de aur, argint și agregarea nanoparticulelor.....	26
1.5 Determinarea Durității apei ce concentrație de ioni ?	29
1.6 Dispozitiv experimental pentru determinarea durității apei.....	30
1.7. Concluzii.....	45
1.8. Bibliografie.....	46

Abstract

This work presents the development of a device designed to detect water hardness using plasmonic nanoparticles integrated with an Arduino Nano-based system. The project combines both experimental nanomaterial synthesis and applied electronics to create a portable and cost-effective diagnostic tool. Silver and gold nanoparticles were synthesized in the laboratory following standard chemical protocols, and their optical properties-strongly dependent on their interaction with the surrounding medium-were exploited as sensitive indicators for the presence of mineral ions responsible for water hardness. This work present the concept of an Arduino based optic sens platform, with response to varyng ion concentrations system. Experimental UV-Vis measurements demonstrated a cler correlation between the plasmonic signal variation and the concentration of dissolved calcium.This approach opens a promising avenue for low-cost, and portable water quality monitoring using nanotechnology and embedded systems.

INTRODUCERE

Interacțiunea radiației electromagnetice cu materia este un subiect fundamental în fizică, cu aplicații extinse în biofizică și fizica medicală. Înțelegerea acestui fenomen este esențială pentru dezvoltarea tehnologiilor moderne de imagistică medicală, terapii fotodinamice, senzori optici și diagnosticare non-invazivă. În această lucrare sunt analizate modelele teoretice principale care descriu comportamentul undei electromagnetice în interacțiune cu materiale dielectrice și metalice, cu accent pe funcțiile dielectrice ale materialelor. O atenție deosebită este acordată nanoparticulelor de aur și argint, utilizate în această lucrare pentru determinarea durității apei.

NANOPARTICULE DE AUR ȘI ARGINT – PROPRIETĂȚI OPTICE ȘI APLICAȚII

Nanoparticulele metalice, în special cele de aur și argint, prezintă un fenomen cunoscut sub numele de rezonanță plasmonică de suprafață localizată (LSPR). Acesta apare datorită oscilației colective a electronilor de conducție în prezența unui câmp electromagnetic, determinând împrăștierea intensă la anumite lungimi de undă. Forma, dimensiunea și mediul dielectric înconjurător influențează puternic poziția și intensitatea acestui maxim de absorbție. Nanoparticulele de aur sunt valoroase și în aplicații biomedicale datorită biocompatibilității și stabilității lor. Agregarea nanoparticulelor duce la cuplaj plasmonic, cu efecte vizibile în spectrul de extincție (red-shift), utilizat în detecția de ioni sau molecule în probe biologice.

DETERMINAREA DURITĂȚII APEI UTILIZÂND METODE OPTICE

Duritatea apei este definită prin concentrația ionilor de calciu (Ca^{2+}) și magneziu (Mg^{2+}). În această lucrare s-a realizat o metodă optică de determinare bazată pe agregarea nanoparticulelor de aur, care răspund colorimetric la prezența acestor ioni.

DISPOZITIV EXPERIMENTAL

Sistemul experimental a constat într-un spectrofotometru UV-Vis (400–800 nm), cu cuveta de cuarț și detector fotomultiplicator. Nanoparticulele de aur au fost sintetizate prin metoda Turkevich și stabilizate cu citrat. La adăugarea de apă dură, s-a observat o modificare a extincției la ~520 nm, corelată cu concentrația de Ca^{2+} .

Împrăștierea Thomson și Rayleigh pentru radiații în domeniul UV-Vis

Forța de interacțiune electrostatică dintre electron și componenta electrică a câmpului este:

$$\vec{F} = e\vec{E} \quad (1) \quad \} \rightarrow \vec{F} = e\vec{E}_0 \sin \omega t \quad (2)$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \sin \omega t \quad (3)$$

Cu toate acestea, $F_e = ma = m\ddot{r}$ (unde \ddot{r} este derivata de ordinal 2 al spațiului adică accelerația cu care se mișcă electronul).

Momentul de dipol are formula

$$\vec{d} = e\vec{r} \text{ prin derivare obținem } \ddot{d} = e\ddot{r} \rightarrow \ddot{r} = \frac{\ddot{d}}{e} \quad (4) \text{ astfel relația de mai sus devine}$$

$$m\ddot{r} = eE_0 \sin \omega t \quad (4)$$

$$m \frac{\ddot{d}}{e} = eE_0 \sin \omega t \quad | :m \quad (5)$$

$$\ddot{d} = \frac{e^2 E_0}{m} \sin \omega t \quad (6)$$

$$\int \sin(u) du = -\cos(u) + C \quad (7)$$

$$\omega t = u$$

$$\omega dt = du$$

$$\int \sin(\omega t) dt = \frac{1}{\omega} \int \sin(u) du = \frac{1}{\omega} \int \sin(u) du = -\frac{1}{\omega} \cos(u) \quad (8)$$

$$\iint \ddot{d} \rightarrow d = -\left(\frac{e^2 E_0}{m\omega^2}\right) \sin(\omega t) \quad (9)$$

Interacțiunea undei electromagnetice cu electronul liber generează oscilații ale dipolului căruiă îi corespunde amplitudinea:

$$d_0 = \frac{e^2 E_0}{m\omega^2} \quad (10)$$

Unde $m = m_e$ (este masa electronului)

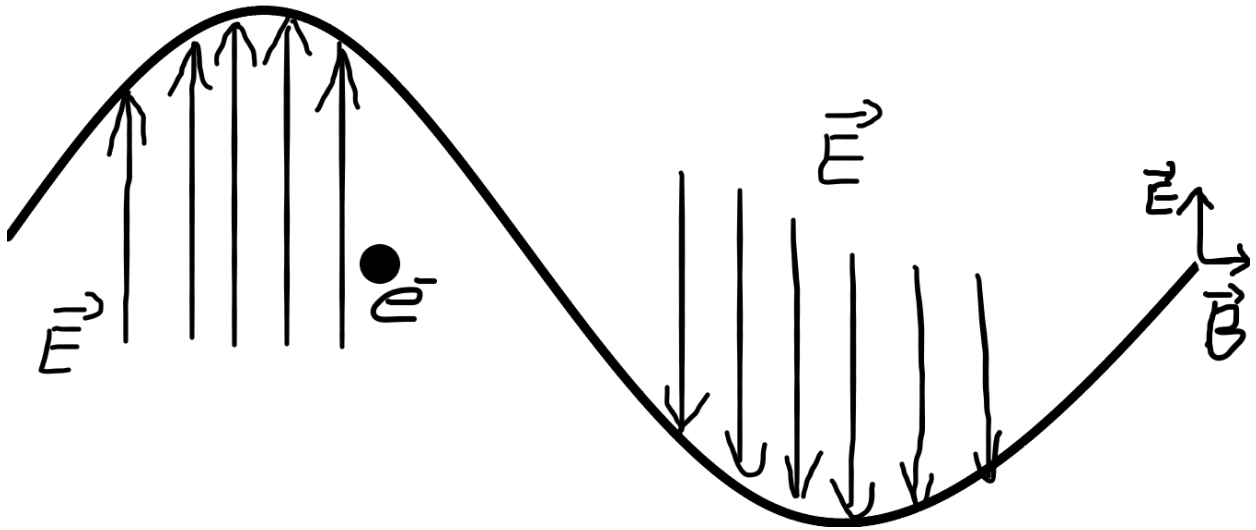


Fig. 1.1 Reprezentare schematică pentru interacțiunea unui electron cu unda electromagnetică.

Ca urmare dipolul oscilant va emite radiații electromagnetice cu frecvența ω , aceeași cu frecvența radiației incidente.

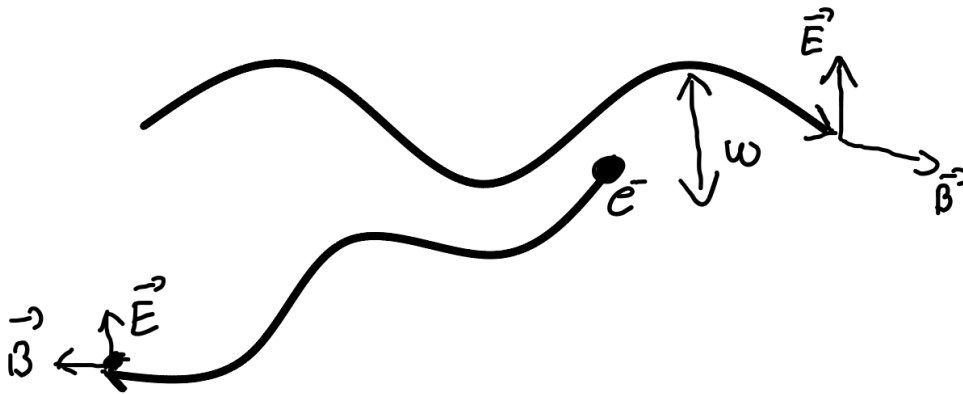


Fig.1. 2 Reprezentare schematică pentru împrăștierea Thomson

Împrăștierea luminii de către atomii/molecule

Împrăștierea luminii de către atomi sau molecule este descrisă prin interacțiunea polarizabilității (α) atomului/moleculei cu componenta electrică \vec{E} a radiației electromagnetice.

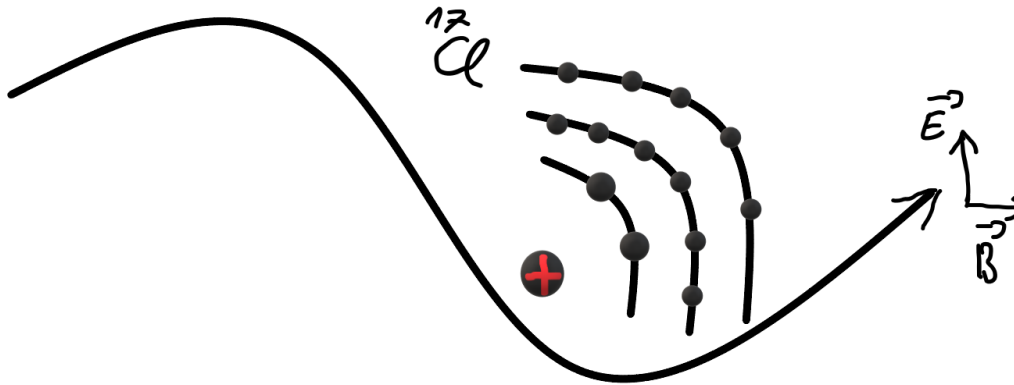


Fig.1.3 Reprezentare schematică pentru atomul de clor (prezentat cu configurația electronică) plasat în câmp electromagnetic.

α – Descrie cât de ușor se distorsionează norul de electroni, de către componenta electrică a undei electromagnetice.

Momentul de dipol indus de o distribuție volumică de sarcină electrică.

$$\vec{d} = \alpha \vec{E} = \alpha \vec{E}_0 \sin(\omega t) \quad (11)$$

În electrodinamică se folosește formula lui Larmor (15) pentru a calcula puterea totală raditată de o sarcină electrică punctiformă în mișcare accelerată.

$$P = \frac{2\dot{d}^2}{3c^3} \quad (15)$$

În această aproximație

$$d = \alpha E_0 \sin \omega t \quad (17)$$

$$\dot{d} = \alpha E_0 \omega \cos \omega t \quad (18)$$

$$\ddot{d} = -\alpha E_0 \sin \omega t \quad (19)$$

$$\ddot{d} \sim \omega^2 \sim \frac{1}{\lambda^2} \quad (20)$$

Acestă putere de împrăștiere a luminii:

$$P = \frac{2\ddot{d}^2}{3c^3} \sim \frac{1}{\lambda^4} \quad \text{Împrăștierea Rayleigh} \quad (21)$$

Frecvența mai mare a spectrului undei electroamnetice va fi cea mai împrăștiată, de exemplu cerul albastru și culoarea roșie la apusul Soarelui. Moleculele cu polarizabilitate mai mare împrăștie mai multă lumină $P \sim \alpha^2$.

Interacțiunea radiației electromagnetice cu material

Ecuția undei în cazul unidimensional care se propagă cu viteza v (cu viteza c în vid, respectiv cu viteza v într-un mediu material).

$$c^2 \frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{d^2 y}{dt^2} \quad (\text{ecuația undei plane 1D}) \quad (22)$$

Soluția acestei ecuații poate fi o funcție sinusoidală sau o funcție exponențială $y = E(x,t)$.

$$E(x,t) = E_0 \sin(kx - \omega t) \quad (23)$$

$$E(x,t) = E_0 \exp(kx - \omega t) \quad (24)$$

$$\lambda k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (25)$$

$$\omega = 2\pi \nu \quad (26)$$

$$c = \frac{\nu}{\lambda} \quad (27)$$

Din relațiile (25), (26) și (27) ne rezultă următoarea formulă pentru vectorul de undă: $k = \frac{\omega}{c}$.

În vid, un câmp electric variabil în timp produce un câmp magnetic variabil în timp și astfel unda electromagnetică se propagă în vid nelimitat (de exemplu, au fost detectate unde de la evenimente ce au avut loc în urmă cu 10^9 ani).

Ce se întâmplă însă când unda electromagnetică se propagă prin materie? Componenta electrică E va interacționa cu proprietățile electrice ale materialului, în timp ce componenta magnetică B va interacționa cu proprietățile magnetice ale materialului. Prin urmare, pentru a clarifica interacțiunea undei electromagnetice cu material, scriem ecuația undei 1D care derivă din ecuațiile lui Maxwell.

$$c^2 \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \varepsilon \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} \quad (31)$$

$$n = \sqrt{\varepsilon} \quad (32)$$

$$\frac{c^2}{\varepsilon} = \frac{c^2}{n^2} \quad (33)$$

$$n = \frac{c}{v} \rightarrow v = \frac{c}{n} \text{ prin ridicare la pătrat vom obține} \quad (34)$$

$$v^2 = \frac{c^2}{n^2} \quad (35)$$

ε – Permitivitatea mediului de constantă dielectrică

ε – este o măsură a eficienței interacțiunii materialului cu unda electromagnetică.

\vec{D} descrie modul în care electronii sunt deplasați în material (analog cu polarizabilitatea).

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \quad (36)$$

$$[\varepsilon] = \frac{F}{m}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0 \quad (37)$$

$$F_{Coulomb} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (38)$$

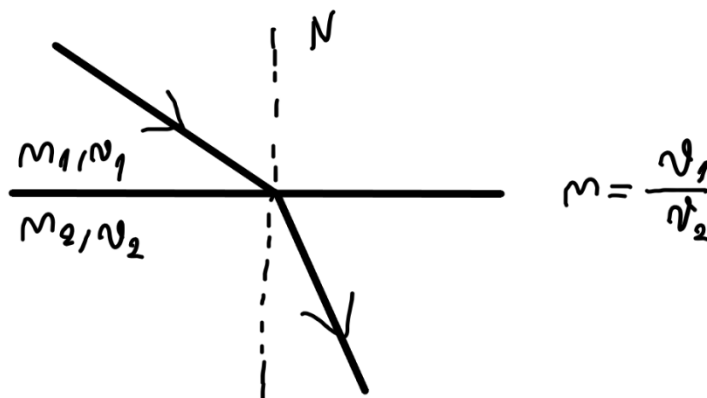


Fig 1. 4. Reprezentare schematică pentru refracția luminii.

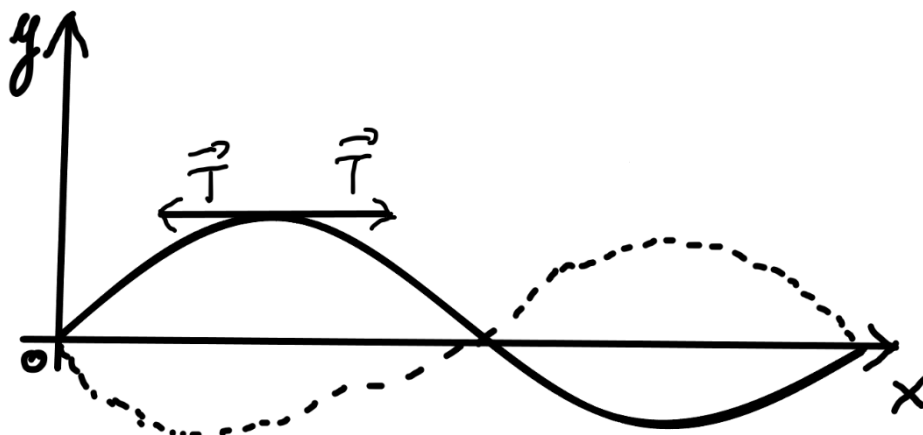


Fig 1. 5. Reprezentare schematică pentru propagarea undelor mecanice staționare (analogia cu o coardă oscilatorie).

Acum adăugăm un factor care să descrie atenuarea unei unde electromagnetice într-un mediu material.

$$c^2 \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \varepsilon \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \frac{\partial E(x,t)}{\partial t} \quad (39)$$

Unde $\varepsilon_0 \rightarrow$ este permitivitatea electrică a vidului.

În timpul deplasării electronilor de către câmpul electric în mediu material apar pierderi de energie. Amortizarea este proporțională cu conductivitatea, o conductivitate mai mare înseamnă un număr mare de electroni liberi în materie.

σ – descrie numărul de electroni liberi din materie.

Variația rapidă a vectorului E înseamnă o amortizare mai mare în mediul material.

$\frac{\partial E}{\partial t}$ descrie variația câmpului electric E în timp.

Introducem o soluție exponențială din echivalentul ecuației diferențiale, ca în cazul formulei (41).

$$E(x,t) = E_0 \exp i(kx - \omega t) \quad (41)$$

În vid

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow k = \frac{2\pi\vartheta}{c} = \frac{\omega}{c}$$

$$c = \lambda\vartheta$$

Într-un mediu material

N-indicele de refracție al mediului material

$$N = \frac{c}{v}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$v = \lambda\vartheta$$

din cele trei formule ne rezultă formula pentru k, $k = \frac{2\pi\vartheta}{v} = \frac{\omega}{v}$, $k = \frac{\omega}{c} = \frac{\omega N}{c}$

Astfel,

$$E(x,t) = E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (42)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -i\omega E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = i^2 \omega^2 E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (44)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = -\omega^2 E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (45)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{i\omega N}{c} E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (46)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \frac{i^2 \omega^2 N^2}{c^2} E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (47)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = -\frac{\omega^2 N^2}{c^2} E_0 \exp i\left(\frac{\omega N}{c} x - \omega t\right) \quad (48)$$

În ecuația (50) apare ecuația unei electromagnetice într-un mediu material.

$$c^2 \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \varepsilon \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \frac{\partial E(x,t)}{\partial t} \quad (50)$$

$$c^2 \left(-\frac{\omega^2 N^2}{c^2} \right) E_0 \exp(i(kx - \omega t)) = -\omega^2 E_0 \exp(i(kx - \omega t)) \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \exp(i(kx - \omega t)) \quad | : \exp(i(kx - \omega t)) \quad (51)$$

După simplificarea cu factorul exponent și cu c^2 ne rezultă următoarea formulă

$$\omega^2 N^2 = \omega^2 \varepsilon + \frac{i\omega\sigma}{\varepsilon_0} \quad | : \omega \quad (52)$$

$$\omega N^2 = \omega \varepsilon + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0} \quad | : \omega \quad (53)$$

$$N^2 = \varepsilon + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0 \omega} \text{ ecuația de dispersie} \quad (48)$$

ε – este termenul responsabil cu dispersia luminii.

Indicele de refracție complex al unui mediu material

Termenul imaginar descrie pierderea de energie prin efect de amortizare în timpul deplasării electronilor de către unda electromagnetică.

Pentru $\sigma = 0$ obținem un material dielectric, un izolator.

$$N^2 = \varepsilon \quad (54)$$

$$n^2 = \varepsilon \quad (55)$$

$$n = \sqrt{\varepsilon} \quad (56)$$

Ecuația (56) descrie relația dintre permitivitate și indicele de refracție.

În general, indicele de refracție complex poate fi exprimat

$$N = n + ik_n \quad (58)$$

Al doilea termen ik_n descrie o pierdere de energie, nu vectorul de undă !

Introducem indicele de refracție complex în ecuația unei electromagnetice.

$$E(x,t) = E_0 \exp i(kx - \omega t)$$

$$k = \frac{N\omega}{c} = \frac{(n+ik_n)\omega}{c} \quad (59)$$

$$\begin{aligned} E(x,t) &= E_0 \exp i \left(\frac{(n+ik_n)\omega}{c} x - \omega t \right) = E_0 \exp i \left(\frac{n\omega}{c} x - \omega t + \frac{i\omega k_n}{c} x \right) \\ &= E_0 \exp i \left(\frac{n\omega}{c} x - \omega t \right) \exp i \left(\frac{i\omega k_n}{c} x \right) \end{aligned} \quad (60)$$

Înlocuim expresia $\frac{n\omega}{c}$ în vectorul de undă cu: $k = \frac{n\omega}{c}$.

Astfel,

$$E(x,t) = E_0 \exp i (kx - \omega t) \exp\left(-\frac{\omega k_n}{c} x\right) \quad (61)$$

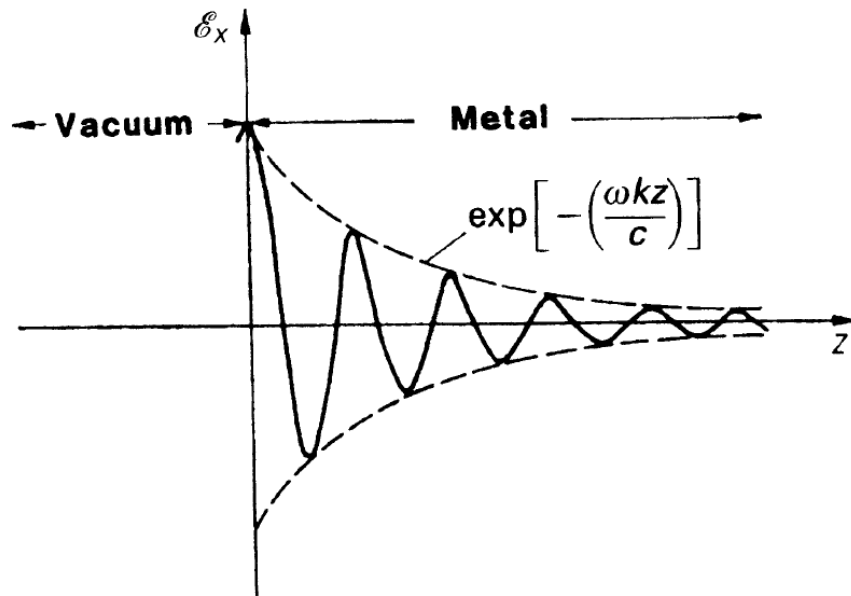


Fig.1.6. Amortizarea unei unde electromagnetice la trecerea din vid într-un metal. Amplitudinea scade exponențial într-un material optic dens. Scăderea este deosebit de puternică în metale, dar mai puțin intensă în material dielectrice, cum ar fi sticla [15].

Modelul Lorentz al funcției dielectrice. Interacțiunea luminii cu un material dielectric

Ecuția de dispersie a fost dedusă în capitolul anterior. Indicele de refracție al unui material N este descris de ecuația de dispersie:

$$N^2 = \varepsilon + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega} \quad (62)$$

ε – Permitivitatea materialului .

ε_0 – Permitivitatea electrică a vidului .

σ – Conductivitatea.

ω – Frecvența undei electromagnetice

$$c^2 \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \varepsilon \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2}$$

$$N = \sqrt{\varepsilon + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega}} = \sqrt{\varepsilon_1 + i\varepsilon_2} = n + ik \quad (63)$$

Funcția dielectrică (indicele de refracția a materialului)

$$n = \sqrt{\varepsilon_1} \quad (64)$$

$$n = \sqrt{\mu_1 \varepsilon_1} \quad (65)$$

Permitivitatea ε este o măsură a modului în care un câmp electric este influențat de materie sau în modul în care materialul afectează câmpul electric. Permitivitatea electrică ε mare înseamnă că materialul prezintă mai multă rezistență la câmp, materialul slăbește câmpul electric.

Permitivitatea este caracterizat prin polarizarea materialului, adică cât de ușor pot fi separați electronii nucleelor atomice din care este alcătuit materialul respectiv. Pe de altă parte, permitivitatea este direct proporțional cu susceptibilitatea electrică χ

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r = (1 + \chi) \varepsilon_0 \quad (66)$$

$$\varepsilon_0 = 8,85 * 10^{-12} \frac{F}{m}$$

Permitivitatea ε este o proprietate macroscopică a unui material care descrie modul în care materialul afectează și este afectat de un câmp electric. Acesta determină cât de mult câmpul electric

este permis sau lăsat să pătrundă în material. Cu alte cuvinte, cuantifică capacitatea unui material de a se polariza ca răspuns la un câmp electric și astfel de a reduce câmpul electric total din interiorul materialului.

Mai jos este prezentată o imaginea moleculară intuitivă (Fig. 1.7).

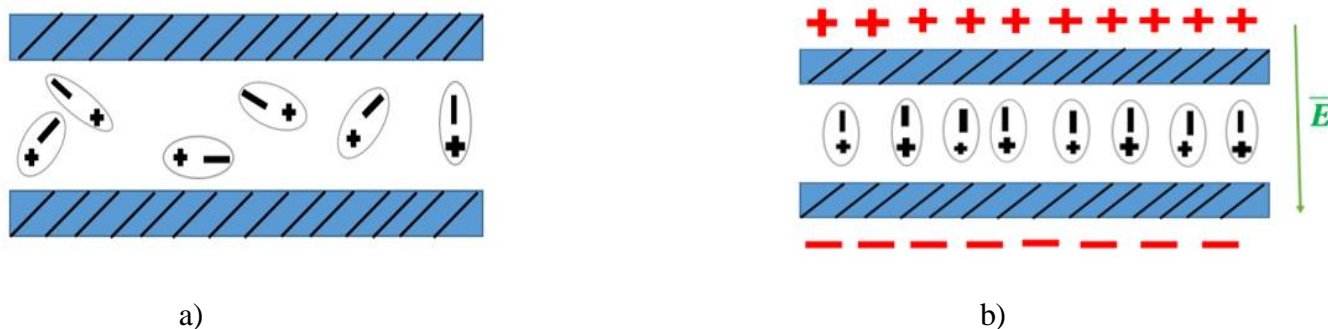


Fig. 1. 7. a) Condesator cu dielectric între plăci, în absența câmpului electric. b) Condensator cu dielectric între plăci, în prezența câmpului electric.

Dipolii din material se aliniază cu câmpul electric aplicat. Polarizabilitatea (α) este o măsură cât de bine are loc orientarea dipolilor la plicarea unui câmp electric. Cu cât polarizabilitatea (α) este mai mare, cu atât materialul devine mai rezistent la câmpul electric care solicit o permitivitate (ϵ) ridicată. Permitivitatea influențează eficiența alinierii dipolilor într-un material. Ca rezultat, câmpul electric în condensator este mai mic decât \vec{E} !

În continuare vom vedea că permitivitatea este dependentă de frecvență

Polarizabilitatea (α) este o proprietate moleculară, pe când permitivitatea (ϵ) și polarizarea (P) sunt proprietăți macroscopice.

$$P = \epsilon_0 \chi E_0 \tag{67}$$

Deplasarea electrică:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \tag{68}$$

$$[\epsilon] = \frac{F}{m}$$

D este sarcina pe unitatea de suprafață care ar fi deplasată printrun strat de conductor plasat într-un câmp electric E (Densitatea fluxului electric).

$$D = \epsilon_0(1 + \chi)E \quad (69)$$

$$\begin{array}{l}
 P = \epsilon_0 \chi E \\
 \epsilon = (1 + \chi)\epsilon_0 \\
 D = \epsilon E
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} P \\ \epsilon \\ D \end{array}} \right\}
 \begin{array}{l}
 D = (1 + \chi)\epsilon_0 E = \epsilon_0 E + \epsilon_0 \chi E \\
 D = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}
 \end{array}
 \quad (70)$$

Materialul constă din atomi într-o imagine simplificată

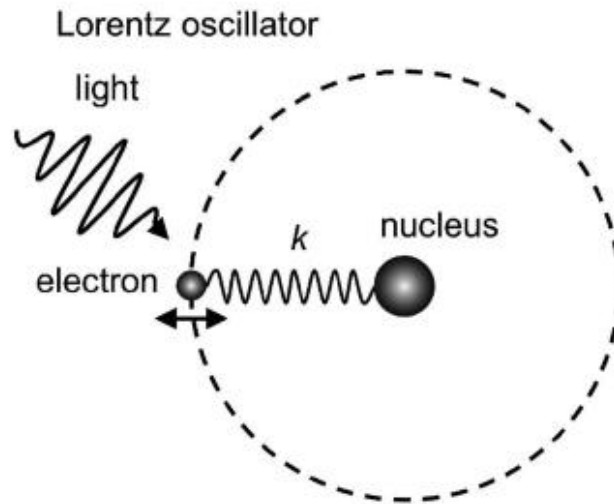


Fig. 1. 8 Model atomic intuitiv pentru descrierea modelului Lorentz [14].

Interacțiunea undelor electromagnetice cu atomul. Datorită acestei interacțiuni electronul se va deplasa (va începe să oscileze). Datorită câmpului electric E asupra electronului va acționa o forță \vec{F} de natură electrică. Deplasarea electronului este determinată de forța elastică care este direct proporțional cu deplasarea.

Considerăm legea lui Hooke

$$F = -kr \quad (71)$$

Unde k -constanta elastică a resortului și r -deplasarea. O forță externă induce oscilații ce pot fi descrise prin variația în timp a poziției:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t) \quad (72)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \rightarrow \text{Frecvența proprie de oscilație} \quad (67)$$

În continuare ne propunem să conectăm modelul atomic cu modelul macroscopic. Polarizarea materialului va rezulta din interacțiunea celor N atomi din material cu unda electromagnetică.

$$P = Np \quad (68)$$

N - nr de atomi, p - dipolul indus de deplasarea de sarcină electrică.

$$P = Np = Nqr \quad (69)$$

Polarizarea unui mediu material P determină momentul dipolului electric pe unitatea de volum a materialului. Câmpul electric \vec{E} acționează asupra atomului cu o forță:

$$\vec{F} = q\vec{E} \quad (73)$$

Rezultă o oscilație dependentă de timp a e^- . Datorită interacțiunii dintre atomi apare amortizarea oscilației, descrisă de factorul de atenuare $\sim m\gamma \frac{\partial r}{\partial t}$ unde m - este masa electronului, γ – constanta de amortizare, $\frac{\partial r}{\partial t}$ – viteza oscilatorului.

Conform legii doi a lui Newton forța este dată de relația: $F = ma = m \frac{\partial^2 r(t)}{\partial t^2}$ (74)

$$qE(t) - kr(t) - m\gamma \frac{\partial r(t)}{\partial t} = m \frac{\partial^2 r(t)}{\partial t^2} \quad (75)$$

$$\frac{q}{m} E(t) = \frac{\partial^2 r(t)}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial r(t)}{\partial t} + \frac{k}{m} r(t) \quad (76)$$

Unde $\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega_0$ – frecvența proprie de oscilație

Ecuția (76) diferențială de ordinul 2 descrie mișcarea electronului în jurul nucleului în urma interacțiunii sale cu unda electromagnetică.

Pentru rezolvarea ecuației diferențiale, trebuie să găsim o funcție de test care să poată fi derivată de mai multe ori (soluție generală). Cunoaștem câmpul electric

$$E(t) = E_0 e^{i\omega t} \quad (78)$$

$$\text{Găsim, } r(t) = r_0 \exp(-i\omega t) \quad (79)$$

Introducem relația (78) și (79) în ecuația (76).

$$\frac{q}{m} E_0 \exp(-i\omega t) = -\omega^2 r_0 \exp(-i\omega t) + \gamma i \omega r_0 \exp(-i\omega t) + \frac{k}{m} r_0 \exp(-i\omega t)$$

Termenul exponențial se simplifică în relația de mai sus și vom obține:

$$\frac{q}{m} E_0 = -\omega^2 r_0 + \gamma i \omega r_0 + \omega^2 r_0 = r_0 (\omega_0^2 - \omega^2 + \gamma i \omega)$$

$$r_0 = r_0(\omega) = \frac{q}{m} \frac{E_0}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma i \omega} \quad (83)$$

Amplitudinea deplasării e^- depinde de ω unei electromagnetice

$$r_0 \sim E_0 ; r_0 \sim q ; r_0 \sim \frac{1}{m}$$

Deplasarea maximă la ω se obține pentru condiția $\omega = \omega_0^2$

$$P = N p = N q r_0(\omega) = \frac{N q^2}{m} \frac{E_0}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma i \omega} \quad (84)$$

$$P = \varepsilon_0 \square E_0 \rightarrow \square = \frac{P}{\varepsilon_0 E_0} \quad (85)$$

$$\varepsilon = (1 + \square) \varepsilon_0 \rightarrow \varepsilon_{rel} = (1 + \square) \quad (86)$$

$$\varepsilon_{ref}(\omega) = 1 + \square = 1 + \frac{N q^2}{m \varepsilon_0 E_0} \frac{E_0}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma i \omega} \quad (87)$$

$$\omega_p^2 = \frac{N q^2}{m \varepsilon_0} \rightarrow \text{Frecvența de Plasmă} \quad (81)$$

$$\varepsilon_{ref}(\omega) = 1 + \frac{\omega_0^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma i \omega} \quad | * \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) - \gamma i \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2) - \gamma i \omega} \quad (88)$$

$$\varepsilon_{ref}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2 (\omega_0^2 - \omega^2) - \gamma i \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2 \omega^2} \quad (89)$$

$$\varepsilon_{ref}(\omega) = \varepsilon_1 + i \varepsilon_2 \quad (90)$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{\omega_p^2 (\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2 \omega^2} = 1 + \frac{\omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \frac{\gamma^2 \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2}} \quad (91)$$

Dacă $\omega \rightarrow \omega_0$ $\varepsilon_1 \rightarrow 1 + 0$

$$\varepsilon_2 = \frac{-\gamma \omega \omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2 \omega^2} \quad (92)$$

Când $\omega = \omega_0 \rightarrow \varepsilon_2$ este maxim la rezonanță, iar γ – constanta de atenuare

Interacțiunea luminii cu materia. Modelul Drude al funcției dielectrice

Considerăm ecuația ce descrie propagarea unei electromagnetice într-un mediu material:

$$c^2 \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \varepsilon \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \frac{\partial E(x,t)}{\partial t}$$

(unde ultimul termen este factorul de atenuare datorită interacțiunii unei electromagnetice cu materia).

$$N = n + ik_n$$

Unda electromagnetică în interacțiune cu un mediul material are expresia

$$E(x,t) = E_0 \exp\left(-\frac{\omega k_n}{c} x\right) \exp\left(\frac{n\omega}{c} x - \omega t\right) \quad (93)$$

k_n mic \rightarrow atenuare redusă ; materialul este considerat transparent

k_n mare \rightarrow atenuare mare; o undă nu poate pătrunde adânc în material; reflectivitate ridicată.

$$F = ma = m \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = qE_0 \exp(-i\omega t) - m\omega_0^2 r - m\gamma \frac{\partial r}{\partial t} \quad (94)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Conectarea cu modelul microscopic se realizează prin polarizare și conduce la funcția dielectrică:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\omega)_1 + i\varepsilon(\omega)_2 = 1 + \frac{\omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}$$

$$n = 1 + ik_n \quad (95)$$

În continuare, analizăm două situații: unda electromagnetică în dielectric și metal.

Mediul dielectric se caracterizează prin faptul că electronii sunt legați în atom și sunt deplasați de câmpul electric. Forța de revenire :

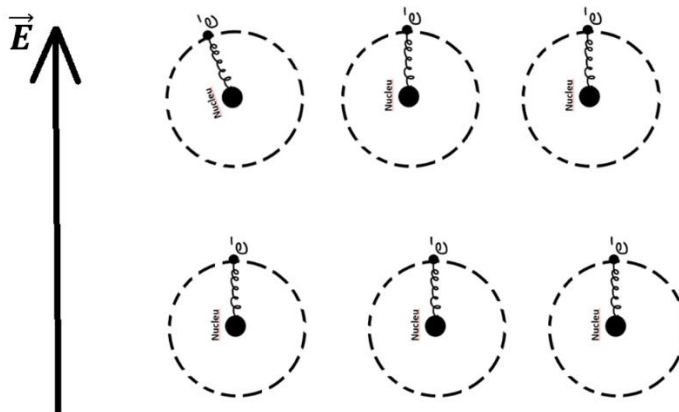


Fig.1. 10. Reprezentare schematică pentru un material dielectric aflat în câmp electromagnetic.

$\vec{F} = -k\vec{r}$ și determină ca răspuns frecvența de rezonanță:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Metalul se caracterizează prin faptul că electronii din banda de conducție sunt liberi să se deplaseze **fără forță de revenire** [13].

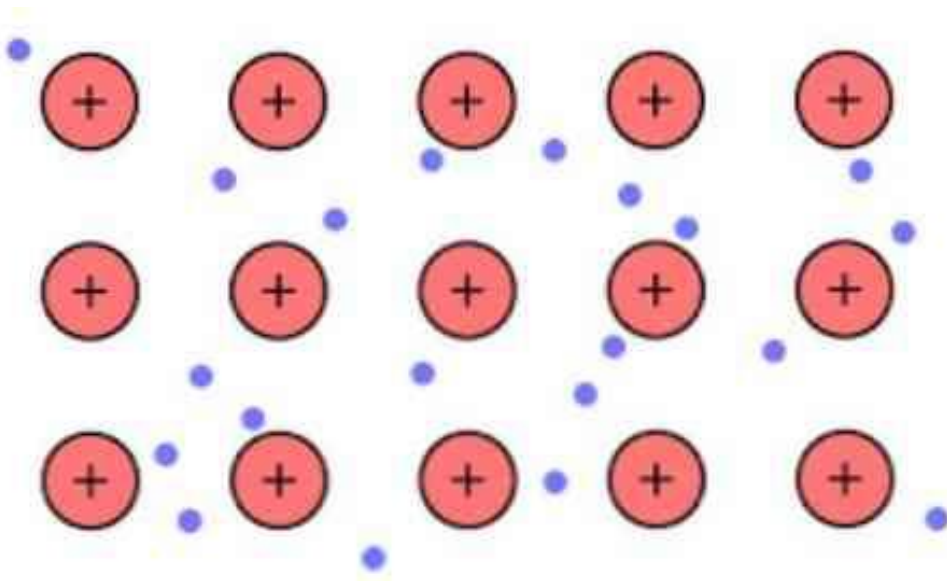


Fig.1. 11. Reprezentare schematică pentru un metal aflat în câmp electromagnetic [13].

$$m \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = qE_0 \exp(-i\omega t) - m\gamma \frac{\partial r}{\partial t} \quad (96)$$

Trebuie să rezolvăm ecuația diferențială parțială. Căutăm o soluție generală. Scurtăm căutarea soluției: presupunem pur și simplu o soluție similară cu cea din modelul Lorentz.

Fără forța de revenire → fără rezonanță și eliminăm factorul de rezonanță.

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (97)$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{i\gamma\omega - \omega^2} \quad (98)$$

Funcția dielectrică Drude pentru metale. Permitivitatea descrie interacțiunea undei electromagnetice de frecvență ω .

$$\omega_p^2 = \frac{Nq^2}{m\epsilon_0}$$

N-densitatea de electroni ($\frac{Nr.de e^-}{Volum}$)

$$\frac{\frac{1}{m^3} * (A*s)^2}{Kg * \frac{F}{m}} = \frac{\frac{1}{m^2} * (A*s)^2}{Kg * \frac{A*s}{V}} = \frac{\frac{1}{m^2} * A*s*V}{Kg} = \frac{\frac{1}{m^2} * A*s * \frac{Kg*m^2}{A*s^3}}{Kg} = \frac{1}{s^2} = \omega_p^2$$

$$F = \frac{C}{V} = \frac{A*s}{V}$$

$$V = \frac{Kg*m^2}{A*s^3}$$

Dacă frecvența este scăzută, toți electronii din material interacționează cu câmpul electric. Electronii pot fi deplasați cu ușurință de câmpul electric și pot oscila în jurul nucleului. Dacă frecvența câmpului crește, inerția electronului devine prea mare și aceștia nu vor mai putea urmări variațiile câmpului electric. Oscilația câmpului electric este atât de rapidă, încât electronii nu o mai pot urmări corespunzător. Acest punct de cotitură, în care electronii nu mai pot urmări câmpul electric, înseamnă că nu mai pot fi considerați liberi. Această frecvență de prag este dată de frecvența de plasmă ω_p .

ω_p → descrie cât de repede pot electronii să se deplaseze într-un câmp electric.

Pornind de la această înțelegere, realizăm că odată ce este atinsă frecvența de plasmă, are loc ceva fundamental în material. Înainte, electronii puteau răspunde la câmpul electric și schimbările acestuia, iar după aceea, electronii nu mai pot urmări variațiile câmpului electric. Această schimbare de comportament este notată prin ω_p .

ω_p → poate avea frecvențe diferite pentru material diferite, în funcție de densitatea de sarcină (ρ).
Indică cât de repede poate electronul să urmeze câmpul electric oscilant.

În continuare, facem o presupunere simplă: electronii din metal formează un gaz de electroni liberi. Presupunem că nu există coliziune cu nucleele, fără pierderi. (nu este realist din punct de vedere fizic, dar modelul este instructiv pentru a înțelege ω_p).

Simplificare: Vom trata metalele ca electroni liberi

$$i\gamma\omega = 0$$

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{99}$$

$$N = \sqrt{\epsilon}$$

$$N = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \tag{100}$$

$\omega < \omega_p \rightarrow N$ este negativ în acest caz

Rădăcinile pătrate ale numerelor negative sunt exprimate cu ajutorul numerelor complexe.

$$[\gamma]_{SI} = \frac{1}{s} = \frac{1}{\tau}$$

$$N = \sqrt{\epsilon + \frac{i\sigma}{\epsilon_0\omega}}$$

A fost introdus factorul de amortizare prin conductivitatea σ în ecuația undei electromagnetice prin termenul $\frac{\sigma}{\epsilon_0} \frac{\partial E(x,t)}{\partial t}$.

$$N = n + ik$$

Dacă N este negativă întreaga expresie a lui N este dominată de k_n .

Cazul $\omega < \omega_p$

→ Electronii se mișcă împreună cu câmpul electric și ecranează câmpul electric.

→ Sarcinile urmează câmpul electric → slăbesc câmpul electric.

Cazul $\omega > \omega_p$

$$N = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$
 unde radicalul este pozitiv

→ N este dominat de partea reală.

→ Metalul se comportă ca un material dielectric.

→ Devine transparent la frecvențe înalte.

ω_p desemnează o proprietate optică a metalelor.

$\omega < \omega_p$ metal (reflectă)

$\omega > \omega_p$ dielectric (material izolator)

→ Frecvența de tăiere (plasmă), este frecvența de la care electronii nu mai pot urmări oscilațiile câmpului electric. Electronii nu mai sunt liberi, ei se comportă ca și cum ar fi legați de nucleu.

Reflectivitatea unui metal

Din experiența noastră de zi cu zi, știm că metalele au o reflectivitate ridicată (precum oglinzile).

$$R = \frac{(n-1)^2 + k_n^2}{(n+1)^2 + k_n^2} \quad (101)$$

$$N = \sqrt{1 - \frac{\omega_p}{\omega^2}}$$

$$\omega < \omega_p, n \cong 0 \rightarrow R = \frac{1+k_n^2}{1+k_n^2} = 1 \text{ (reflexia luminii)} \quad (102)$$

$$\omega \gg \omega_p, k_n \cong 0, N=1 \rightarrow n \cong 1.$$

$$R = \frac{0}{(n+1)^2} = 0 \text{ (refracția luminii)}. \quad (103)$$

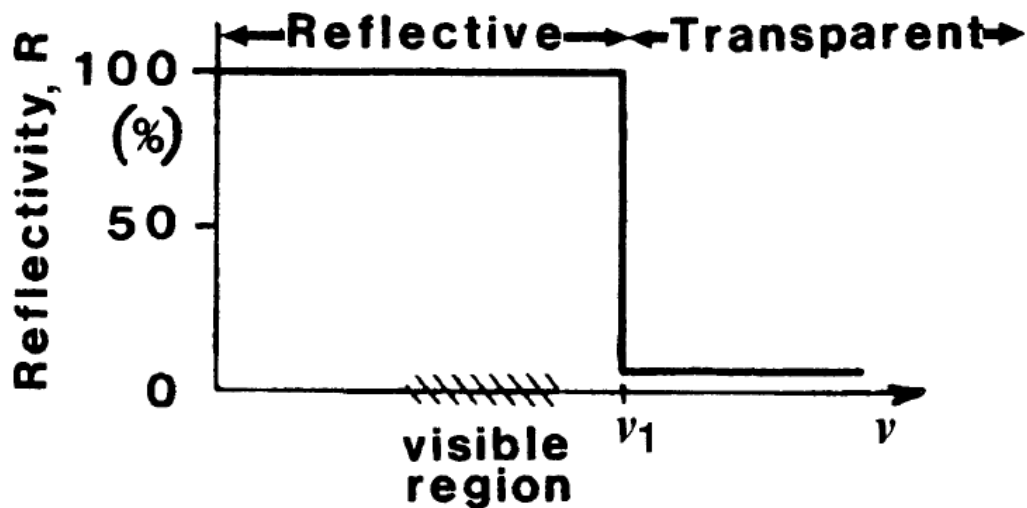


Fig. 1. 12. Dependența de frecvență a unui metal alcalin conform teorieie electronului liber, fără amortizare, unde ν_1 este frecvența de plasma [15].

Funcția dielectrică completă

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{i\gamma\omega - \omega^2} \quad (104)$$

Amortizarea este cauzată de coliziunile electronilor și de ciocnirile cu ionii.

ϑ = Frecvența coliziunilor.

Descriere echivalentă: timpul de relaxare al electronilor τ (timpul dintre coliziuni). Timpul dintre două coliziuni (timpul de relaxare).

$$\tau \sim 10^{-14} \text{ s}$$

$$\tau = \frac{1}{\gamma}$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{i\omega \frac{1}{\gamma} - \omega^2} \quad | \quad * \frac{\tau}{\tau}$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\tau \omega_p^2}{\tau(i\frac{\omega}{\tau} - \omega^2)} = 1 + \frac{\tau \omega_p^2}{i\omega - \tau \omega^2}$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\tau \omega_p^2}{i\omega - \tau \omega^2} \frac{(i\omega + \tau \omega_p^2)}{(i\omega + \tau \omega^2)}$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\tau \omega_p^2 (i\omega + \tau \omega^2)}{-\omega^2 - \tau^2 \omega^4} \quad (105)$$

Vom separa partea imaginară de cea reală

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{\tau^2 \omega_p^2 \omega^2}{-\omega^2(1 + \tau^2 \omega^2)} = 1 - \frac{\tau^2 \omega_p^2}{1 + \tau^2 \omega^2}$$

$$\omega > \tau, \omega * \tau > 1, \tau = 10^{-14} \text{ s}, \omega = 10^{15} \frac{1}{\text{s}}$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (106)$$

Partea imaginară

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\omega \tau \omega_p^2}{\omega^2(1 + \tau^2 \omega^2)} = \frac{\tau \omega_p^2}{\omega(1 + \tau^2 \omega^2)} \quad (107)$$

$$\omega > \tau \rightarrow \tau^2 \omega^2 > 1$$

$$\varepsilon_2 \cong \frac{\omega_p^2}{\tau \omega^3} \quad (108)$$

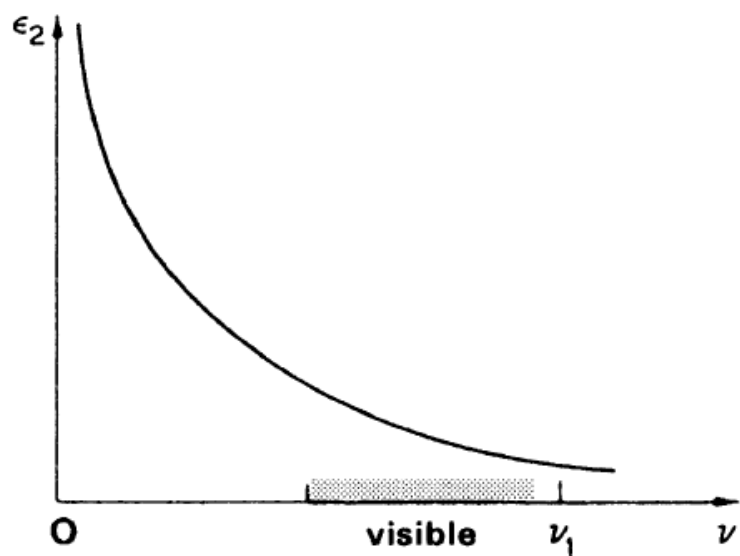


Fig. 1. 13. Absorbția $\epsilon_2 = 2nk$, în funcție de frecvență ν conform teoriei electronului liber [15].

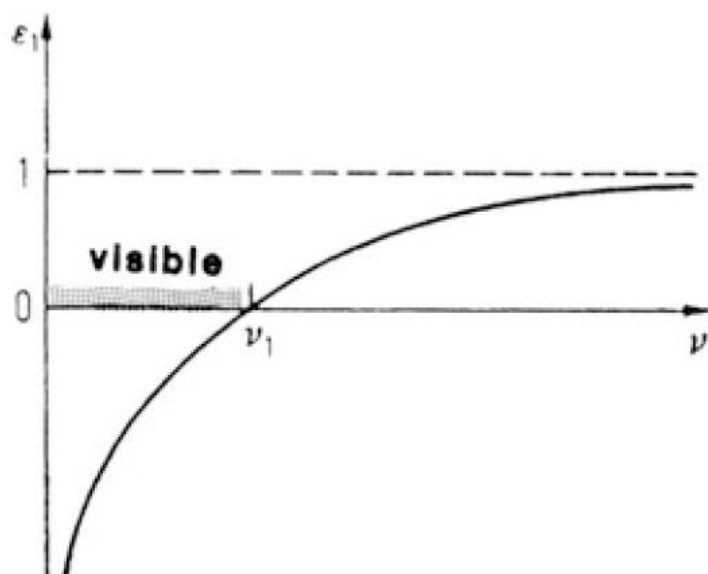


Fig. 1. 14. Polarizarea dielectrică, $\epsilon_1 = n^2 - k^2$, în funcție de frecvență, conform teoriei Drude pentru metale [15].

Partea experimentală

Prepararea nanoparticulelor de argint

“Pentru prepararea soluției coloidale de argint, 0.017g de AgNO_3 au fost dizolvați în 98 ml de apă ultrapură, sub agitarea magnetică. După ce soluția a atins punctul de fierbere, au fost adăugați 2 mL de soluție de citrat de sodiu 1%, iar soluția a fost lăsată să fiarbă încă 30 de minute (Fig.1.17) [19] .”

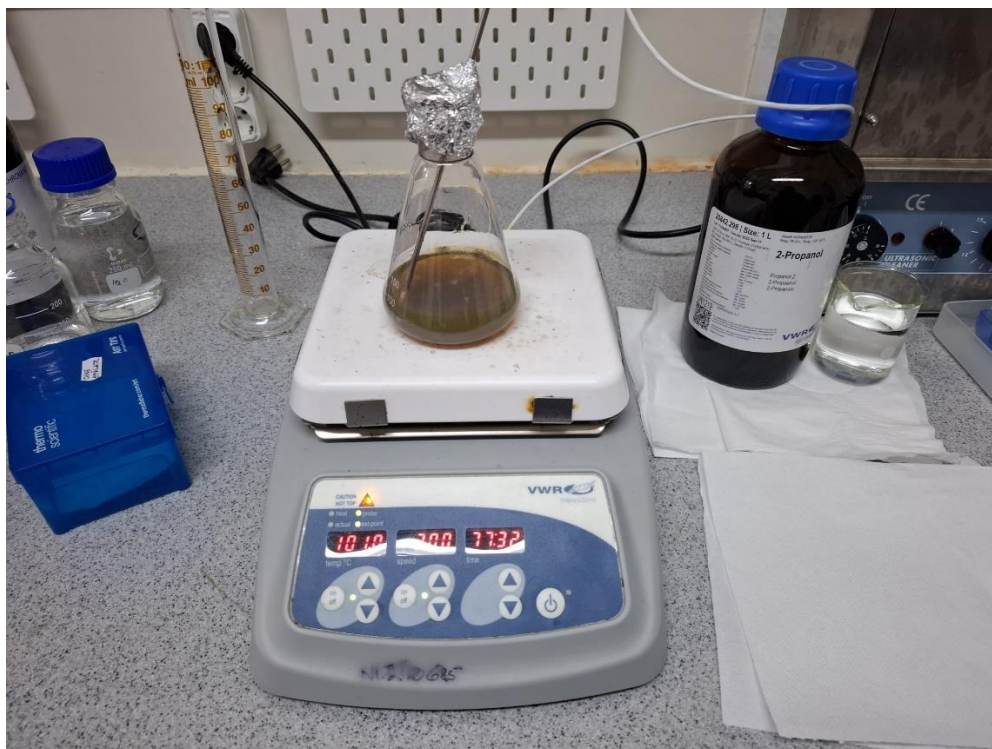


Fig.1.17. Prepararea nanoparticulelor de argint în laborator.

Obsevații. Dacă se formează un strat de oglindă de argint pe pereții vasului, înseamnă că temperatura este prea mare. Se pot folosi în continuare nanoparticulele, dar am preferat să le prepar din nou.

Prepararea nanoparticulelor de aur

Nanoparticulele de aur pot fi sintetizate prin reducerea unui precursor auric- de obicei tetraclorură de aur (III) AuCl_4 în prezența unui agent reducător și adesea a unui stabilizator. O metodă clasică și bine documentată este metoda Turkevich.

Metoda Turkevich (1951) – sinteză coloidală în fază apoasă .

1. **Precursor:** Se prepară o soluție apoasă de acid tetrachloroauric HAuCl_4
2. **Încălzire:** Soluția este adusă la punctul de fierbere sub agitare constantă.
3. **Reducere:** Se adaugă rapid o soluție de citrat de sodiu (trisodiu citrat $\text{Na}_4\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7$), ca agent reducător ($\text{Au}^{3+} \rightarrow \text{Au}^0$) ca stabilizator prin absorbție electrostatică la suprafața nanoparticulei.
4. **Formarea nanoparticulelor:** Soluția își schimbă culoarea (galben \rightarrow Gri \rightarrow Roșu rubiniu) pe măsură ce se formează nanoparticule sferice de Au cu diametru de 10-20 nm.
5. **Răcire și stocare:** După terminarea reacției (aproximativ 15 minute), soluția se răcește și se păstrează la temperatura camerei sau la 4°C

Parametrii importanți care influențează sinteza:

Raportul molar citrat / aur determină dimensiunea și monodispersitatea particulelor. De asemenea, pH-ul și temperatura afectează cinetica reducerii [16].

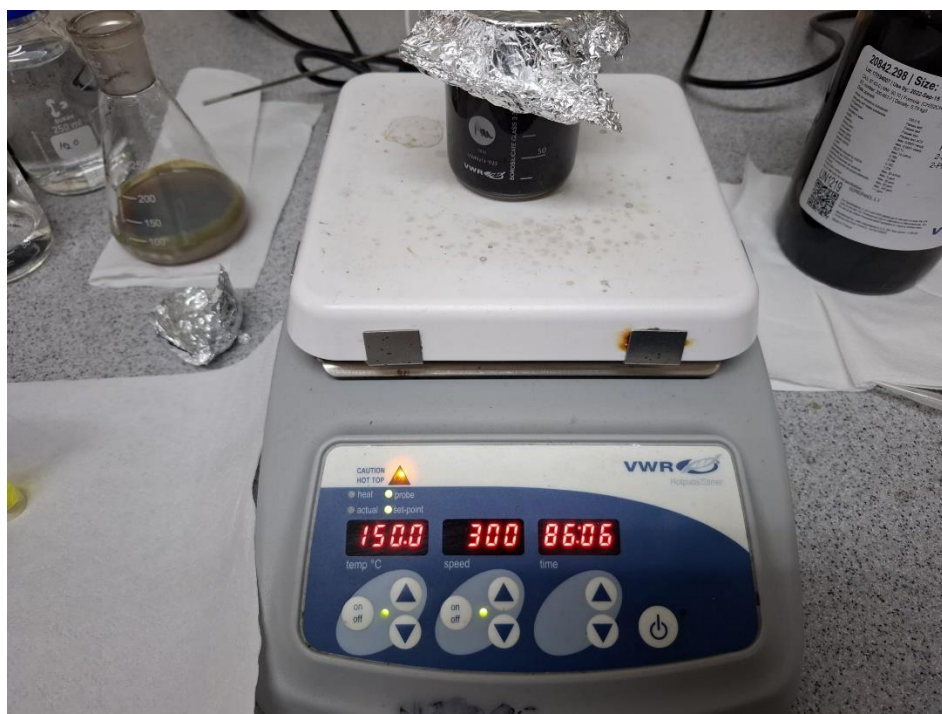


Fig.1. 18. Prepararea nanoparticulelor de aur în laborator.



Fig.1. 19. Nanoparticulele de aur și argint obținute în laborator.

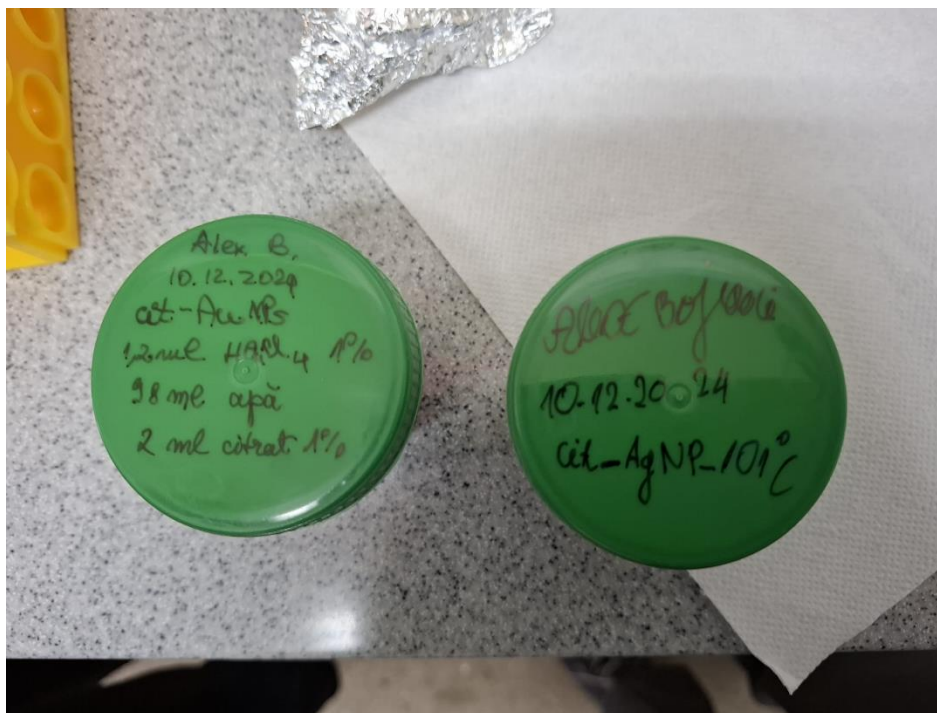


Fig. 1. 20. Volume de soluții utilizate pentru nanoparticulele de aur și argint.

Comportamentul nanoparticulelor de aur și argint în prezența ionilor de Ca^{2+} și Mg^{2+}

Nanoparticulele meralice (aur, argint), în special cele sintetizate coloidal, sunt de obicei stabilizate electrostatic prin agenți anionici precum citratul (Trukevich pentru AuNPs) sau borohidrat

(AgNPs). Aceste nanoparticule prezintă o încărcare superficială negativă, ceea ce determină o stabilitate coloidală prin repulsie electrostatică.

Rolul ionilor de Ca^{2+} și Mg^{2+}

Ionii Ca^{2+} și Mg^{2+} sunt ioni bivalenți care pot ecrana sarcina negativă de la suprafața nanoparticulelor și pot duce la:

a) Reducerea potențialului zeta

Ca^{2+} și Mg^{2+} se absorb pe suprafața nanoparticulelor, reduc grosimea stratului dublu electric, determină scăderea repulsiei electrostatice între particule.

b) Inducerea agregării coloidale

Prin neutralizarea sarcinii de suprafață și formarea de punți ionice, particulele se apropie sub influența atracției van der Waals → agregare sau chiar precipitare.

c) Interacțiuni specifice cu liganzi

Dacă nanoparticulele sunt funcționalizate cu grupări carboxil, Ca^{2+} și Mg^{2+} pot forma legături ionice chelatare, în funcție de Ph și ligand, poate apărea auto-asamblare supramoleculară.

Observații experimentale frecvente:

Schimbarea de culoare la AgNPs și AuNPs → semn de agregare.

Creștere a dimensiunii hidrodinamice.

Scădere a potențialului zeta → *sub* -30 mV = stabil, peste -10 mV = instabil [17;18].

Analiza soluțiilor coloidale

Am folosit pentru această parte placa Arduino Uno care este compatibil cu diferiți senzori și actuatori, ILI9341 un ecran tactic de 320 x 240 compatibil cu Arduino, un TCS34725 un senzor de culoare cu elemente de detectare RGB pentru măsura culorii soluțiilor, un LED roșu ca sursă de lumină, un rezistor de 220 Ω pentru a limita tensiunea pe led.

“Placa Arduino este un concept hardwar și Software programabil în limbajul C++ care permite analiza unor date din exterior cu ajutorul unor dispozitive numiți senzori, programarea lor numerică și transformarea lor în acțiune prin intermediul actuatorilor” (Bojodi Alex-Robert -2023- Pag.19).

Senzorul este un dispozitiv capabil să detecteze și să măsoare o mărime fizică, chimică, sau biologică (precum temperatură, lumină, presiune, umiditate, mișcarea, etc) și să o transforme într-un semnal electric sau digital ușor de interpretat, prelucrat sau transmis către un sistem electronic.

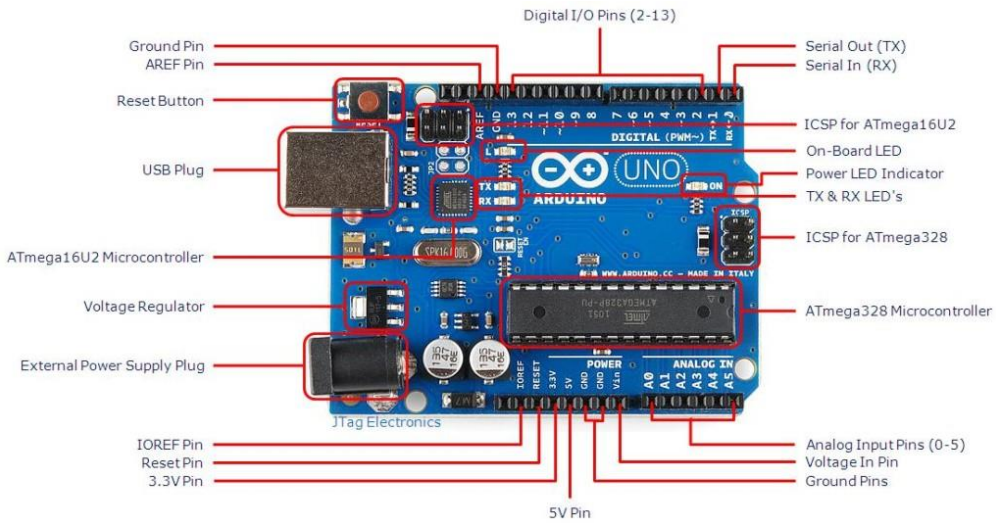


Fig. 1.15. Pini modului Arduino Uno [11].

Măsurători experimentale



Fig.1. 16. Soluțiile de Nanoparticule de Aur tratate cu Ca^{2+} cu concentrațiile cuprinse între $10^{-2}M$ și $10^{-6}M$ ($A=10^{-2}M, B = 10^{-3}M, C = 10^{-4}M, D = 10^{-5}M, E = 10^{-6}M$).



Fig.1.17. Soluțiile de Nanoparticule de Argint tratate cu Ca^{2+} cu concentrația cuprinsă între $10^{-2}M$ și $10^{-6}M$ ($A=10^{-2}M, B = 10^{-3}M, C = 10^{-4}M, D = 10^{-5}M, E = 10^{-6}M$).



Fig.1.18. Soluțiile de Nanoparticule de Aur și Argint tratate cu Ca^{2+} .

Soluțiile agregă doar la concentrații de peste $5 \cdot 10^{-4} M$. Astfel în cât detecția modificării de culoare se observă doar la peste această concentrație. Dar oricum, apa este considerată dură de la concentrații de $6 \cdot 10^{-4} M$ pentru Ca^{2+} .



Fig.19. Spectrometrul UV-Vis utilizat în experimnte.

În continuare sunt prezentate spectrele UV-Vis ale soluțiilor coloidale. Fig.1.20 prezintă spectrul UV-Vis al soluției coloidale de argint nemodificate.

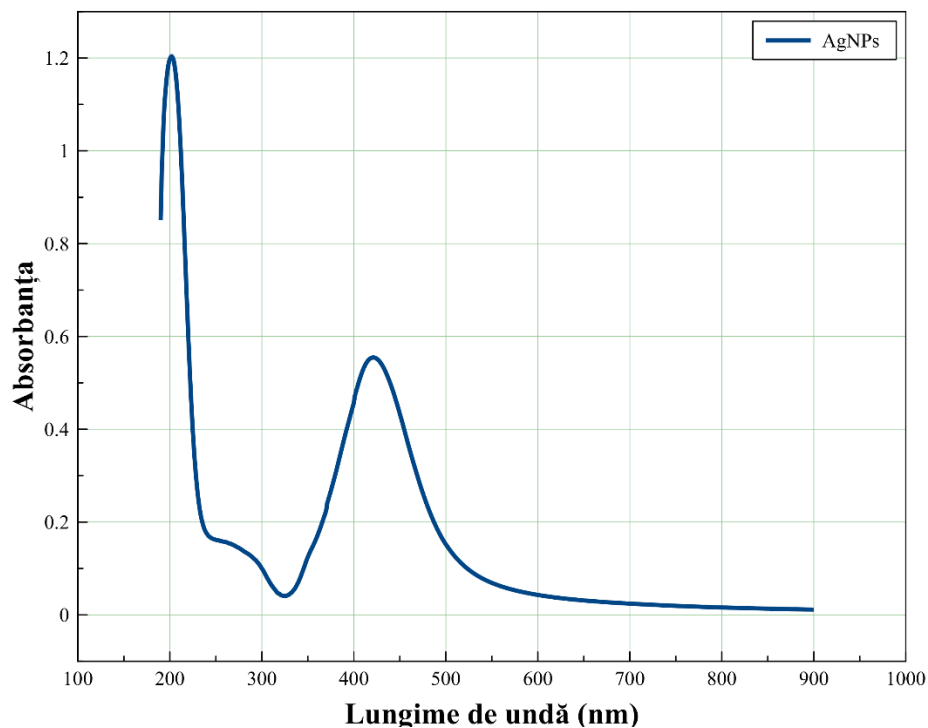


Fig. 1.20. Spectrul UV-Vis pentru AgNPs.

După cum se observă în spectrele din Fig.1.22 și Fig.1.23 concentrațiile mai mari de $10^{-3}M$ determină agregatele puternică a soluțiilor coloidale, astfel că absorbția în domeniul vizibil este neglijabilă.

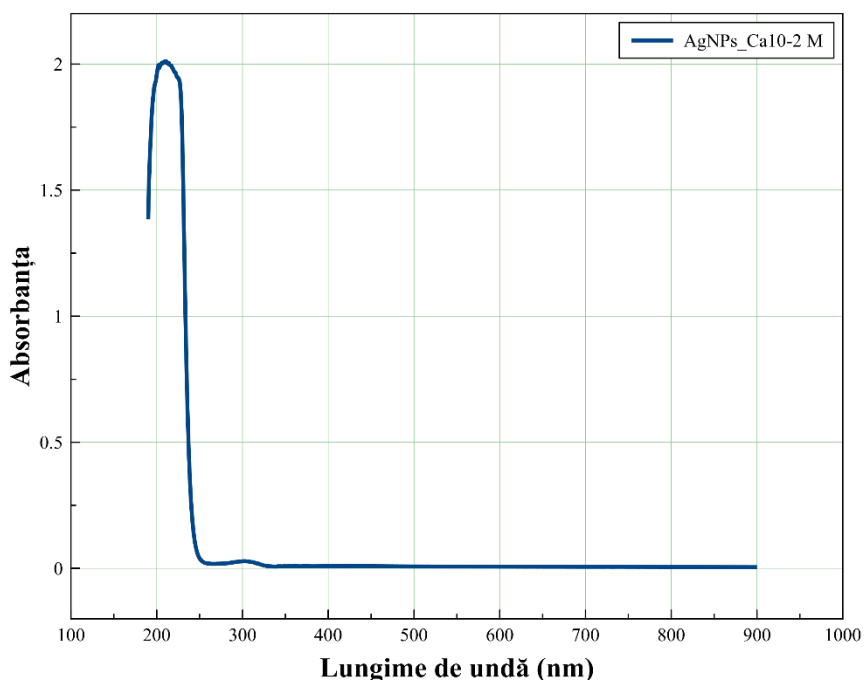


Fig.1.21. Spectrul UV-Vis pentru AgNPs tratat cu Ca de concentrație $10^{-2}M$.

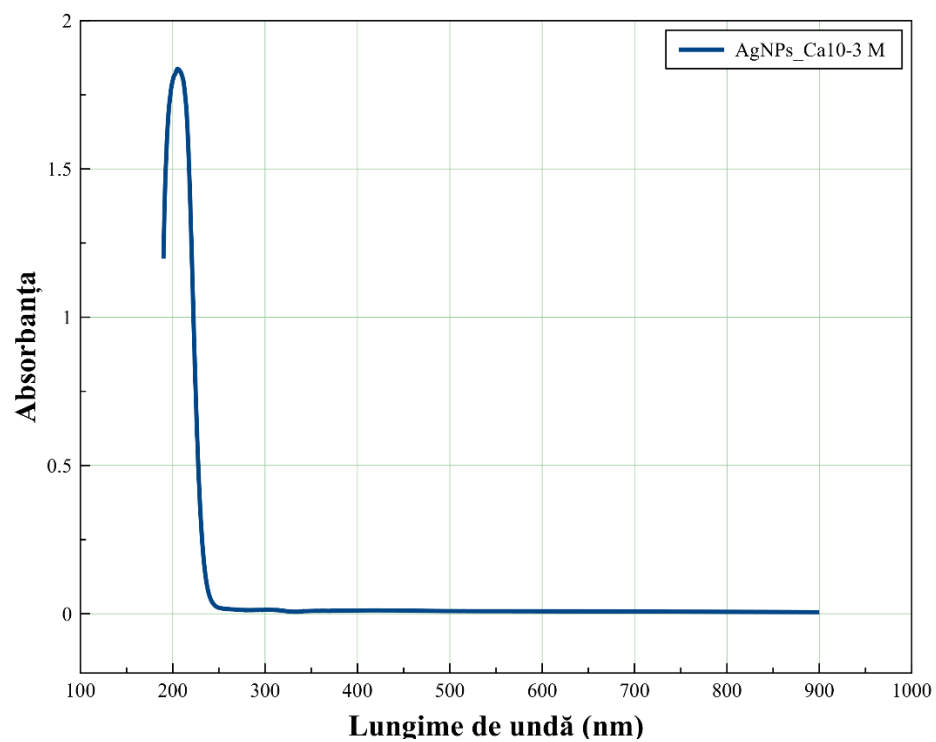


Fig. 1.22. Spectrul UV-Vis pentru AgNPs tratat cu Ca de concentrație $10^{-3} M$.

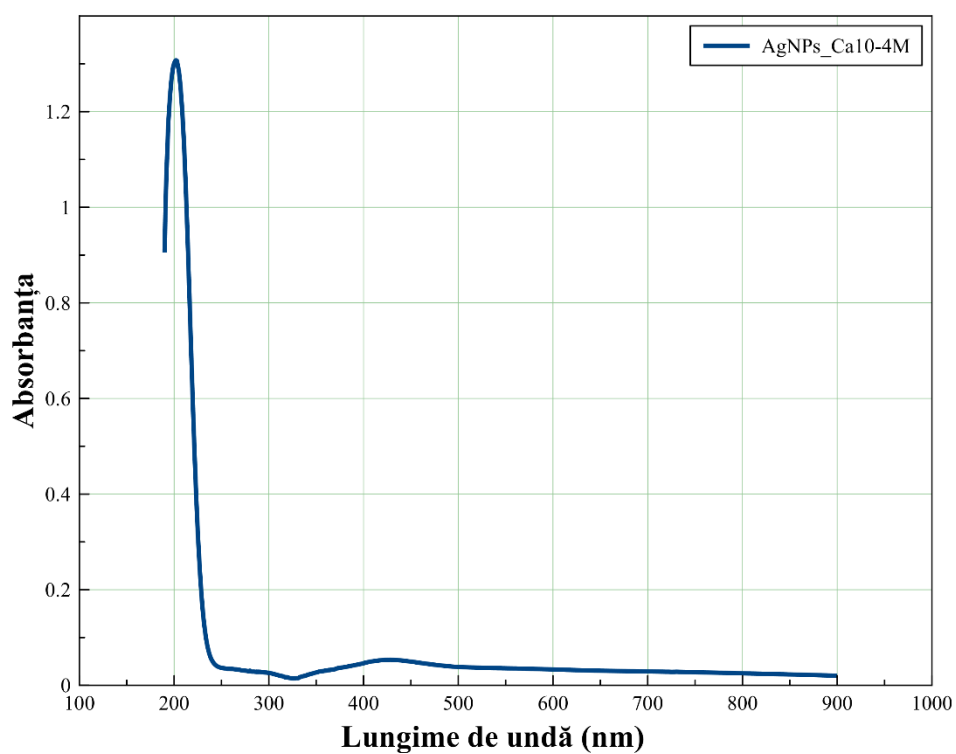


Fig.1. 23. Spectrul UV-Vis pentru AgNPs tratat cu Ca de concentrație $10^{-4} M$.

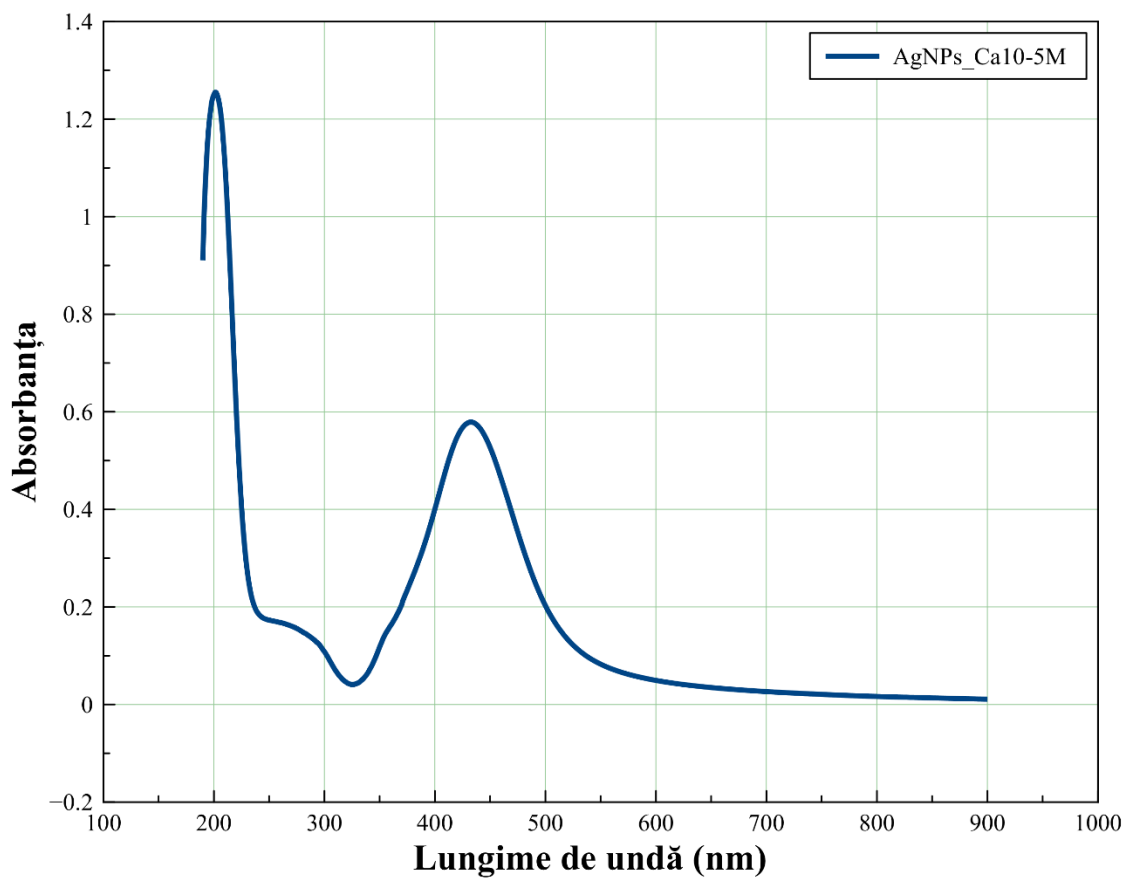


Fig.1.24. Spectrul UV-Vis pentru AgNPS tratat cu Ca de concentrație $10^{-5}M$.

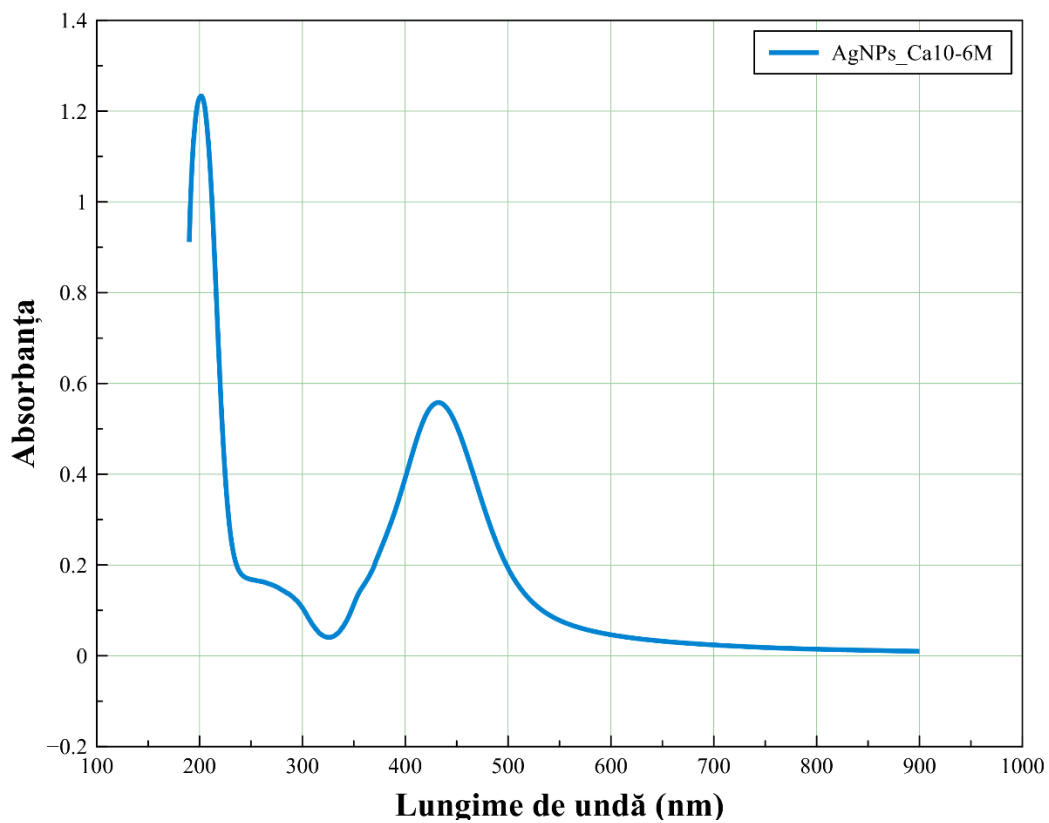


Fig.1.25. UV-Vis pentru AgNPS tratate cu Ca de concetație $10^{-6}M$.

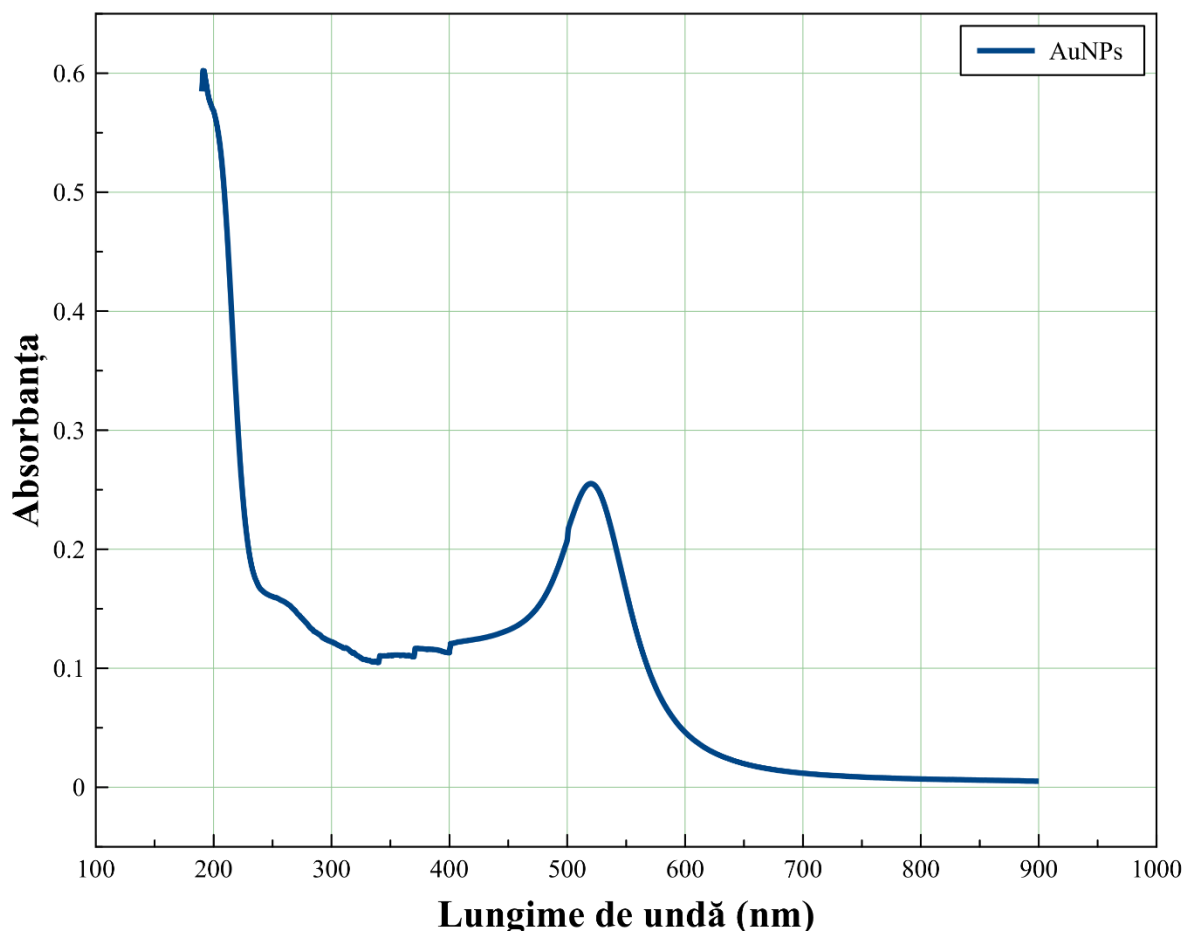


Fig.1.26. Spectrul UV-Vis pentru AuNPs.

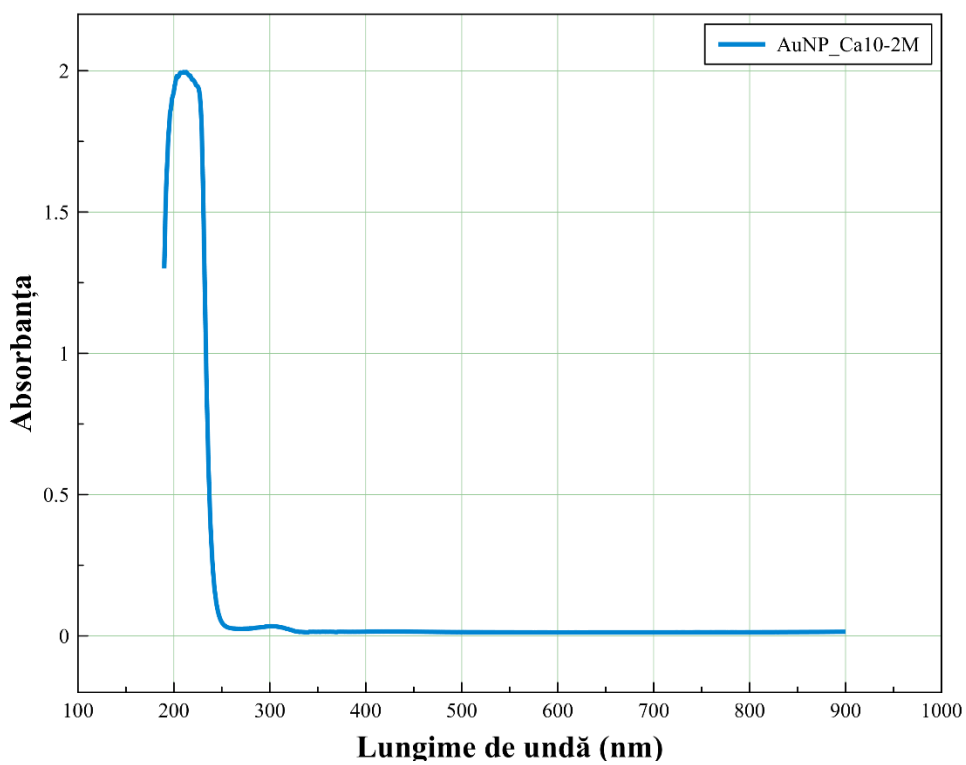


Fig.1.27. Spectrul UV-Vis pentru AuNP tratat cu Ca de concentrație $10^{-2} M$.

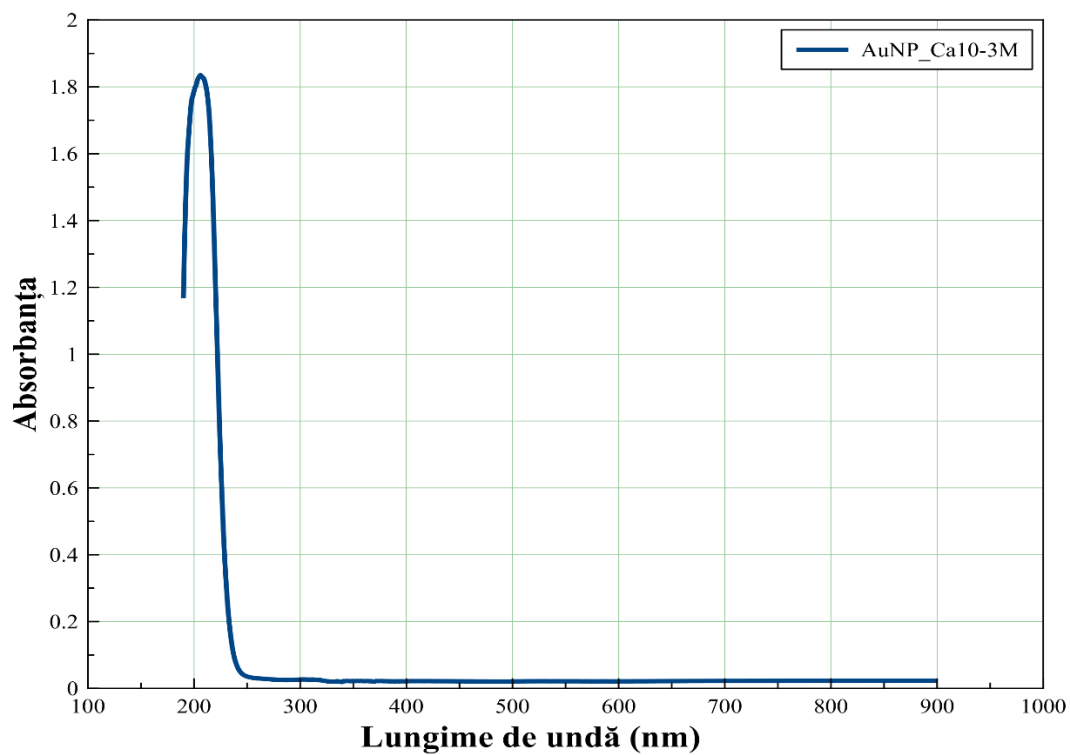


Fig.1. 28. Spectru UV-Vis pentru AuNP tratate cu Ca de concentrație $10^{-3} M$.

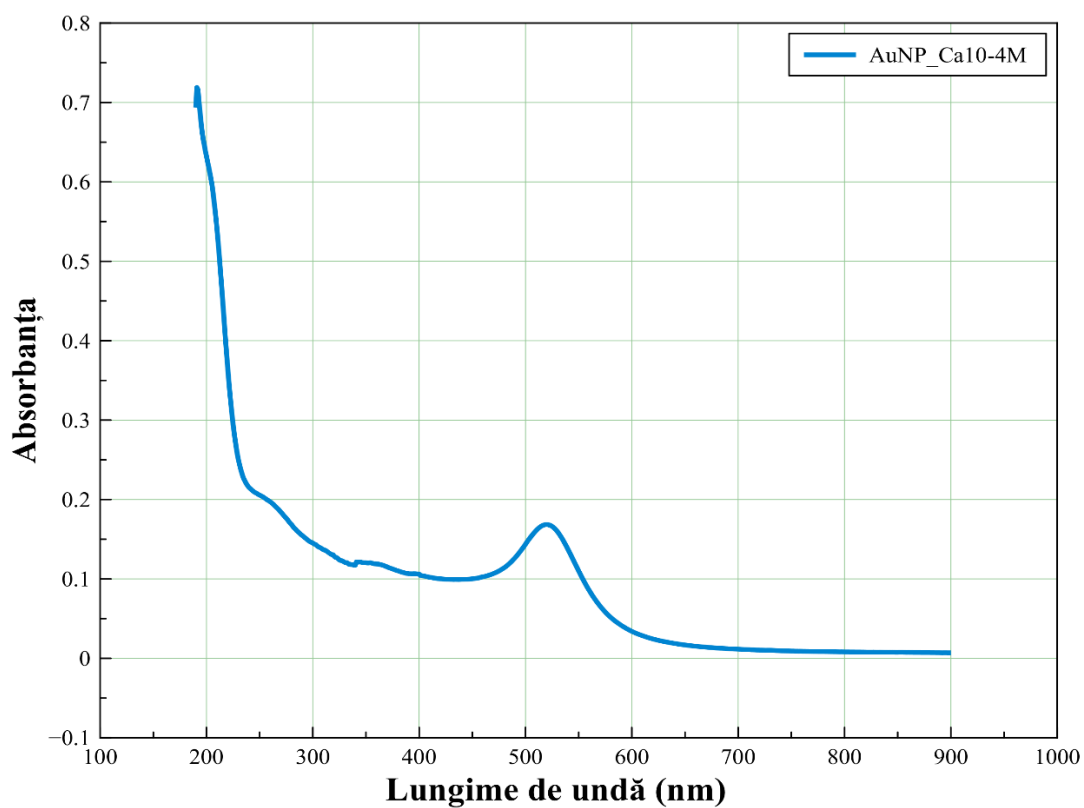


Fig.1.29. Spectru UV-Vis pentru AuNP tratate cu Ca de Concentație $10^{-4} M$.

Figurile 1.26. și 1.25 prezintă peak-urile de rezonanță plasmonică ale soluțiilor coloidale de argint nealternante la concentrații mai mici de $10^{-4}M$.

În mod analog au fost testate soluțiile coloidale de aur privind agregatele la diferite concentrații ale ionilor de Ca^{2+} .

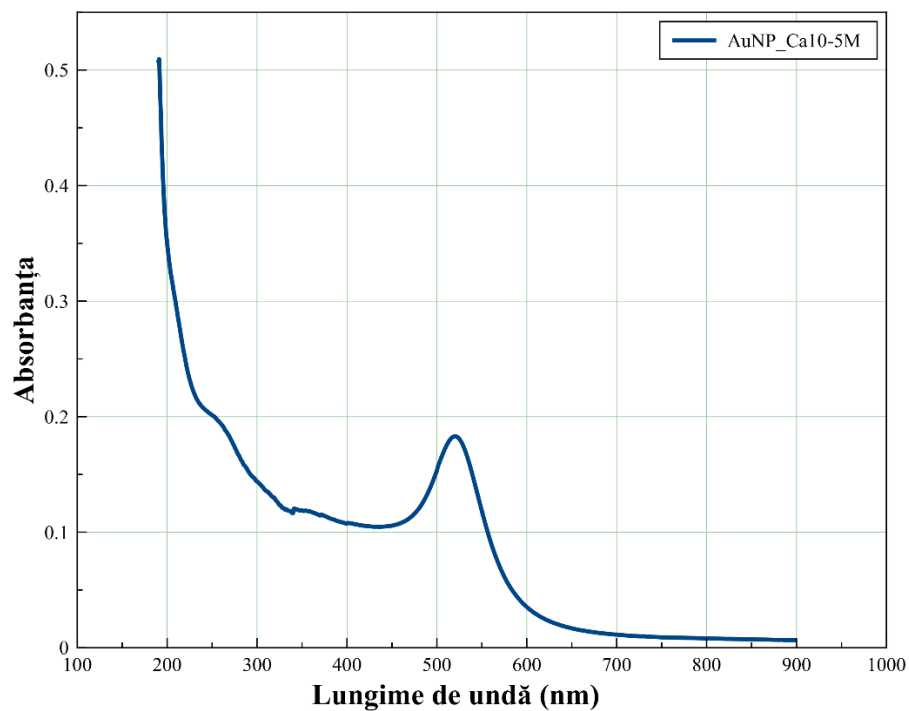


Fig.1.30. Spectrul UV-Vis pentru AuNP tratate cu Ca de concentrație $10^{-5}M$.

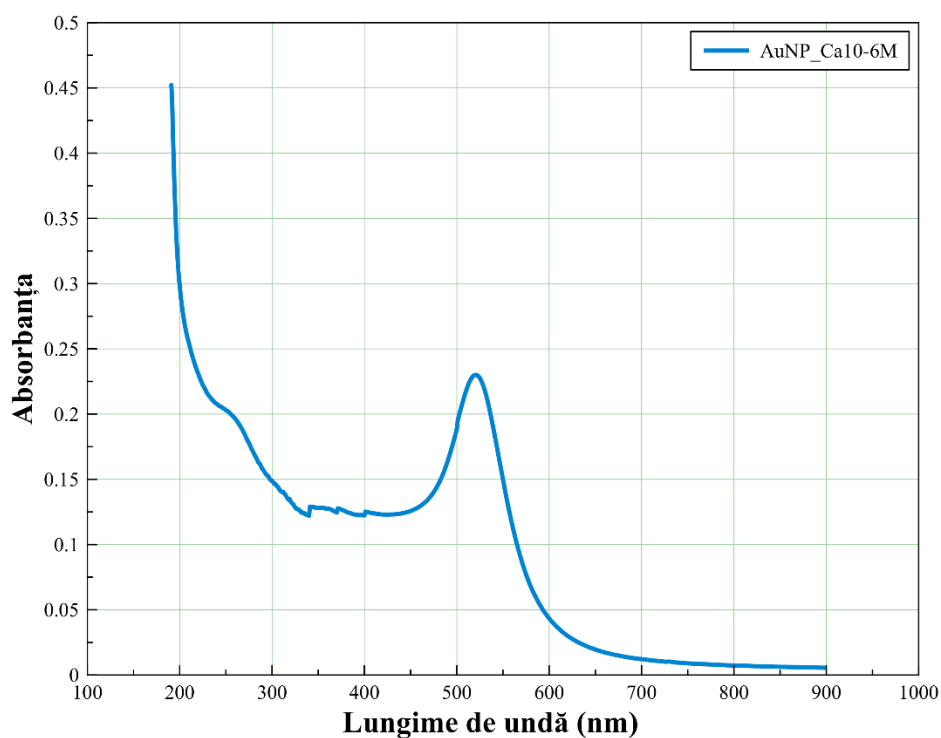


Fig.1.31. Spectrul UV-Vis pentru AuNP tratate cu Ca de concentrație $10^{-6}M$.

În mod analog, agregatele nanoparticulelor de aur are loc la concentrații mai mari de $5 \times 10^{-5}M$ ale ionilor de Ca^{2+}

Mai departe așa cum se vede în Fig.1.32 am folosit placa Arduino am măsurat absorbția, transmitanța, intensitatea inițială și cea finală al ledului de lumină roșie pentru fiecare soluție coloidală de nanoparticule de aur și argint.

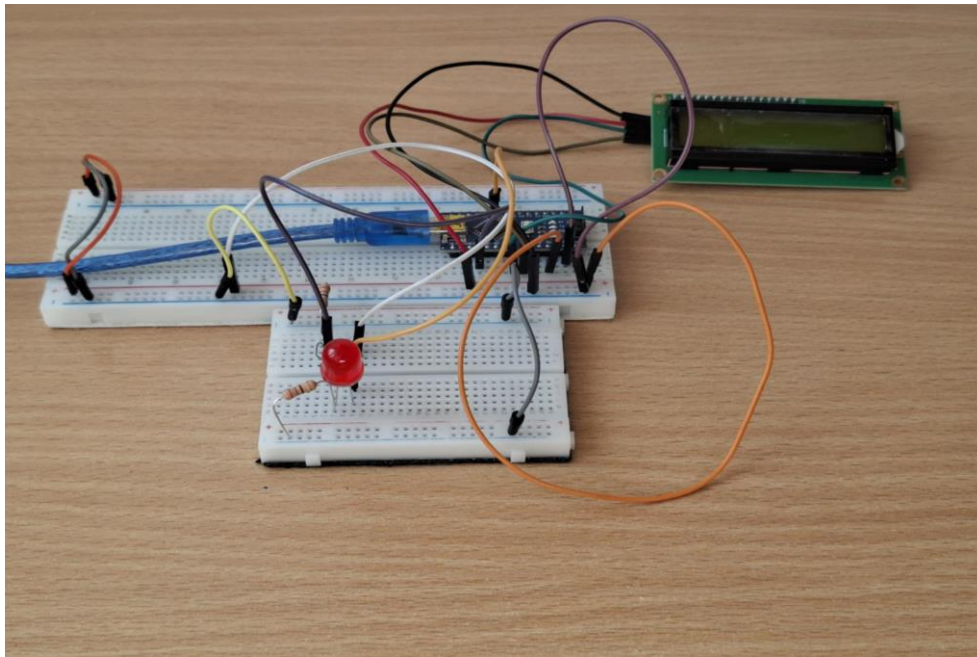


Fig.1.32. Montajul experimental folosit pentru măsurarea absobanței,transmitanței și a intensităților led-ului în absența și prezența probei.

Măsurătorile pentru AgNPs

```

Cod_Arduino_dedicat_pentru_m_sur_tori_A_vs_C | Arduino 1.8.16
File Edit Sketch Tools Help
Cod_Arduino_dedicat_pentru_m_sur_tori_A_vs_C
#include <Wire.h>
#include <LiquidCrystal_I2C.h>

LiquidCrystal_I2C lcd(0x27, 16, 2);

const int sensorPin = A0;
const int ledPin = 7;

float I0 = 0.0; // Intensitate fără ioni (referință)
float I = 0.0; // Intensitate cu probă

void setup() {
  pinMode(ledPin, OUTPUT);
  digitalWrite(ledPin, HIGH); // LED pornit
  lcd.init();
  lcd.backlight();
  Serial.begin(9600);

  lcd.setCursor(0, 0);
  lcd.print("Calibrare I0...");
  delay(2000);
  I0 = getAVERAGE();
  lcd.clear();
  lcd.print("I0=");
  lcd.print(I0, 2);
  delay(2000);
  lcd.clear();
}

void loop() {
  I = getAVERAGE();
  float A = log10(I0 / I);
  float T = (I / I0) * 100;

  lcd.setCursor(0, 0);
  
```

```

COM12
I0=60.20 I=54.50 A=0.043 T=90.5%
I0=60.20 I=38.60 A=0.193 T=64.1%
I0=60.20 I=43.70 A=0.135 T=72.6%
I0=60.20 I=44.70 A=0.129 T=74.3%
I0=60.20 I=45.00 A=0.126 T=74.8%
I0=60.20 I=45.50 A=0.122 T=75.6%
I0=60.20 I=46.00 A=0.117 T=76.4%
I0=60.20 I=45.30 A=0.123 T=75.2%
I0=60.20 I=40.10 A=0.176 T=66.6%
I0=60.20 I=47.30 A=0.105 T=78.6%
I0=60.20 I=42.80 A=0.148 T=71.1%
  
```

Sketch uses 6978 bytes (22%) of program storage space. Maximum is 30720 bytes.
Global variables use 496 bytes (24%) of dynamic memory, leaving 1552 bytes for local variables. Maximum is 2048 bytes.

Arduino Nano, ATmega328P on COM12 08:36 23.06.2025

Fig.1.33. Print Screen efectuat în timpul măsurătorilor pentru AgNPs tratate cu Ca^{+2} de concentrație $10^{-2}M$.

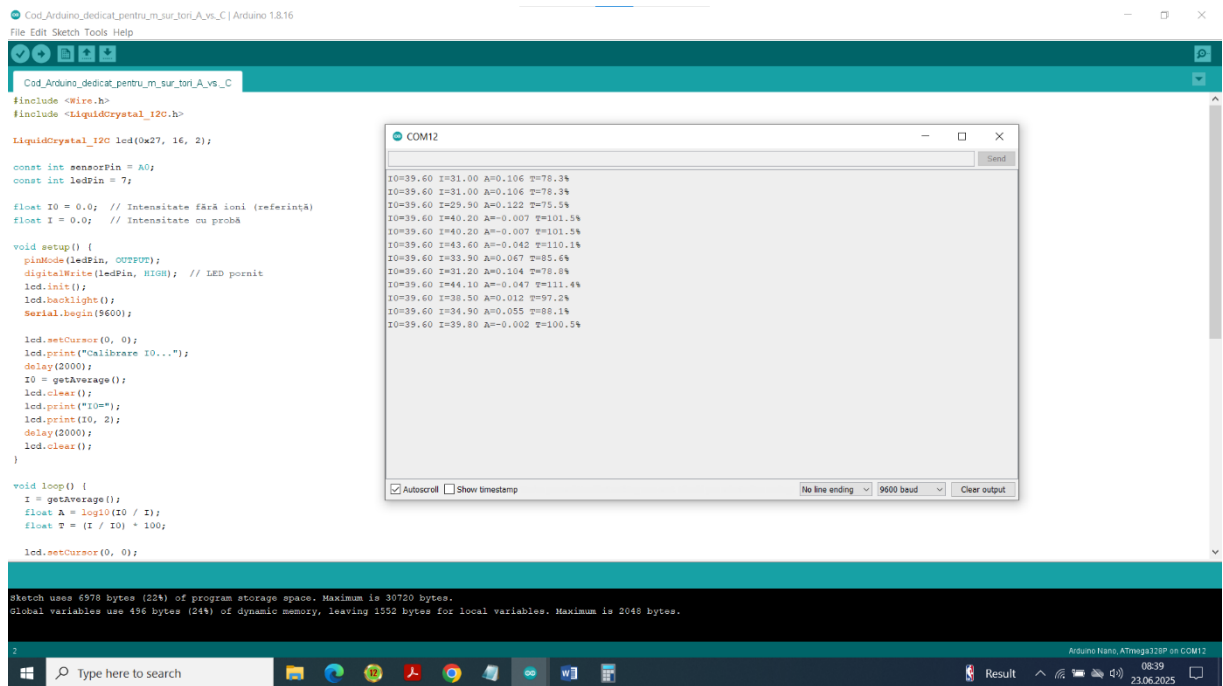


Fig.1.34. Print Screen efectuat în timpul măsurătorilor pentru AgNPs tratate cu Ca^{+2} de concentrație de $10^{-3}M$.

Măsurătorile pentru AuNPs

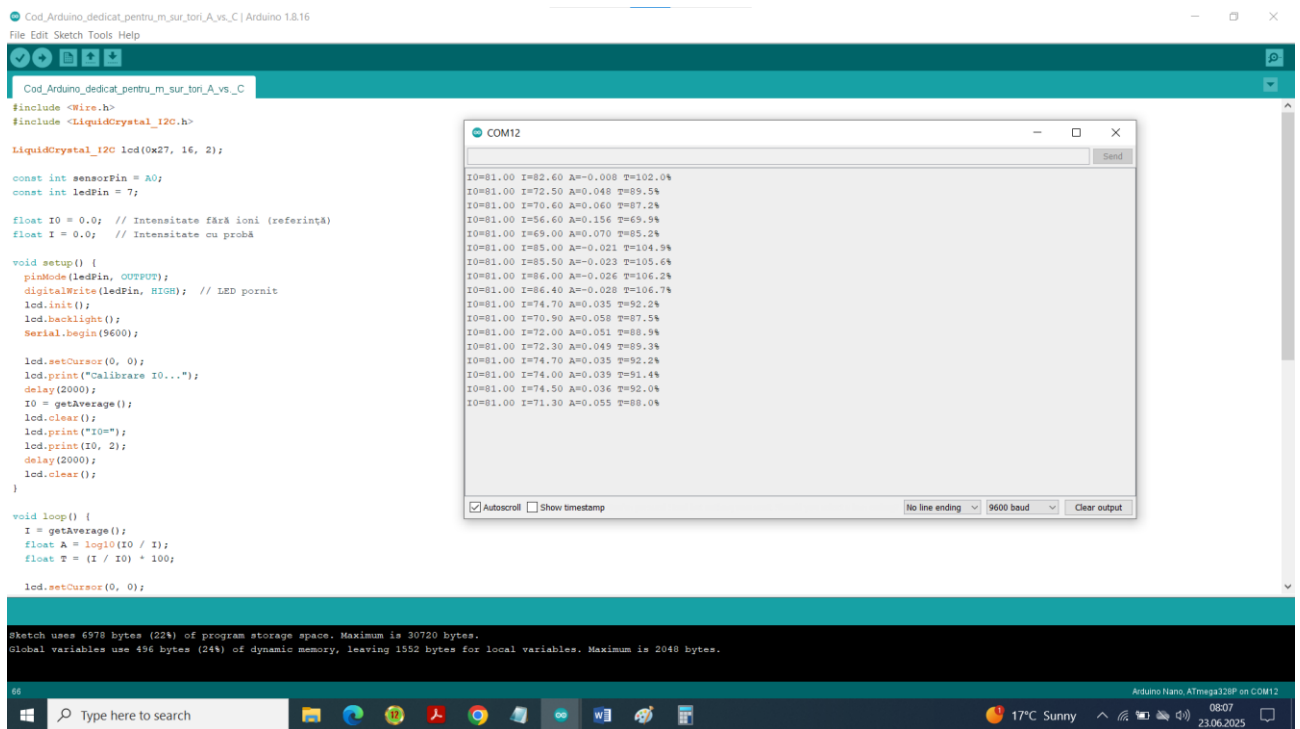


Fig.1.35. Print Screen efectuat în timpul măsurătorilor pentru AuNPs tratate cu Ca^{+2} de concentrație de $10^{-4}M$.

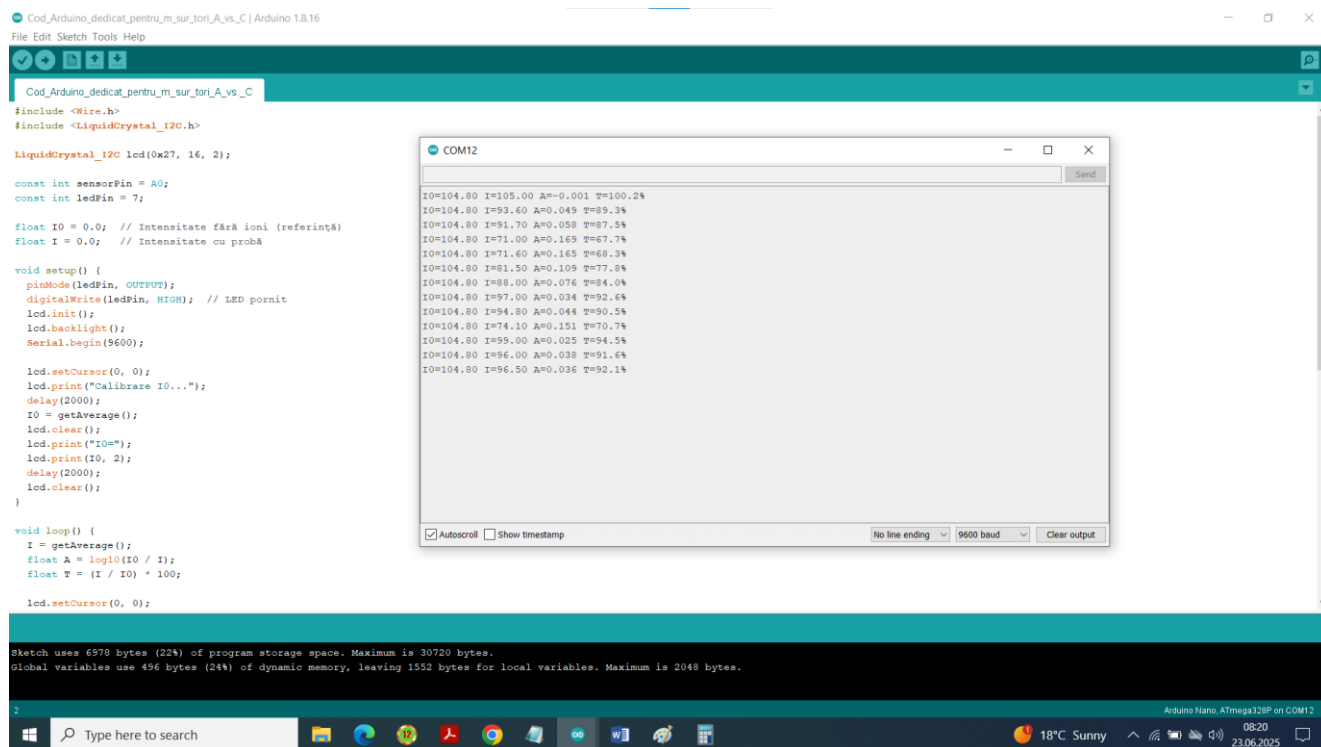


Fig.1.36. Print Screen efectuat în timpul măsurătorilor pentru AuNPs tratate cu Ca^{+2} de concentrație $10^{-6}M$.

Codul sursă utilizat

```
#include <Wire.h>
```

```
#include <LiquidCrystal_I2C.h>
```

```
LiquidCrystal_I2C lcd (0x27, 16, 2);
```

```
const int sensorPin = A0;
```

```
const int ledPin = 7;
```

```
float I0= 0.0;
```

```
float I = 0.0
```

```
void setup () {
```

```
  pinMode (ledPin, OUTPUT);
```

```
  digitalWrite (ledPin, HIGH);
```

```
  lcd.init () ;
```

```
  lcd.backlight ();
```

```
  Serial.begin (9600);
```

```

lcd.setCursor (0, 0);

lcd.print (“Calibrare.....I0”);

delay(2000);

lcd.clear ();

}

void loop () {

I=getAverage ();

float A log10(I0/I);

float T = (I/I0)*100;

lcd.setCursor (0, 0);

lcd.print (“A: ”);

lcd.print (A, 3);

lcd.setCursor (0,1 );

lcd.print (“T”); ;

lcd.print (T, 1);

lcd.print (“%”);

//Serial monitor pentru datele măsurate

Serial.print (“I0=”);

Serial.print (I0, 2);

Serial.print (“I=”);

Serial.print (“A=”);

Serial.print (A, 3);

Serial.print (“T=”);

Serial.print (T, 1);

Serial.print (“%”);

delay (5000);

```

```
lcd.clear ();  
  
}  
  
float getAverage () {  
long sum = 0;  
for (int i= 0; i< 10; i++) {  
sum + = analogRead (sensorPin);  
delay (20);  
}  
Return sum / 10.0 ;  
}
```

CONCLUZII

Lucrarea a prezentat bazele teoretice ale interacțiunii luminii cu materia, folosind modele consacrate precum Lorentz și Drude. Aceste modele explică modul în care unda electromagnetică este modificată de proprietățile dielectrice și conductoare ale materialelor. În plus, s-a demonstrat aplicabilitatea practică a acestor concepte prin determinarea optică a durității apei utilizând nanoparticule de aur. Rezultatele obținute susțin utilizarea nanotehnologiilor în analiza chimică de rutină.

BIBLIOGRAFIE

1. Bohren, C. F., & Huffman, D. R. (109). Absorption and Scattering of Light by Small Particles.
2. Griffiths, D. J. (110). Introduction to Electrodynamics, 4th ed.
3. Maier, S. A. (111). Plasmonics: Fundamentals and Applications.
4. Artik, H., et al. (112). "Colorimetric Determination of Water Hardness Using Gold Nanoparticles", Sensors and Actuators B.
5. Jackson, J. D. (113). Classical Electrodynamics, 3rd ed.
6. Fox, M. (114). Optical Properties of Solids.
7. Novotny, L., & Hecht, B. (115). Principles of Nano-Optics.
8. Saleh, B. E. A., & Teich, M. C. (116). Fundamentals of Photonics.
9. Electrodynamică și Teoria Relativității- Mircea Vasile-Editura: Didactica și Pedagogica București, anul:1979.
10. S.D. Anghel, Principii ale proceselor de măsură cu senzori, Presa Universitară Clujeană Cluj-Napoca, 2016, ISBN:978-973-595-952-4.
11. <https://mlab.vn/10609-hoc-arduino-bai-2-nhung-dieu-co-ban-ve-arduino.html> [04.06.2025 ora 13:30]
12. https://pubs.acs.org/doi/suppl/10.1021/acs.jchemed.9b01156/suppl_file/ed9b01156_si_001.pdf [07.05.2025 ora 12:00] .
13. <https://th.thpanorama.com/articles/qumica/teora-del-mar-de-electrones-fundamentos-propiedades-e-inconvenientes.html> [07.04.2025 ora 10:12]
14. https://www.uni-potsdam.de/fileadmin/projects/udkm/Documents/BaMa_theses/sche2024bsc.pdf [07.04.2025 ora 10:15]
15. Electronic Properties of Materials, Rolf E. Hummel, fourth edition springer 2011.
16. Turkevich, J., Stevenson, P. C., & Hillier, J. (1951). A study of the nucleation and growth processes in the synthesis of colloidal gold. Discussions of the Faraday Society, 11, 55–75. <https://doi.org/10.1039/df9511100055>
17. Haiss, W., Thanh, N. T., Aveyard, J., & Fernig, D. G. (2007). Determination of size and concentration of gold nanoparticles from UV–vis spectra. Analytical Chemistry, 79(11), 4215–4221. <https://doi.org/10.1021/ac0702084>
18. Zhang, Y., et al. (2011). Aggregation behavior of citrate-coated silver nanoparticles in aqueous solutions: Influence of Ca²⁺ and Mg²⁺. Journal of Colloid and Interface Science, 353, 524–530. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2010.10.060>

19. Lee, P. C., & Meisel, D. (1982). Adsorption and Surface-Enhanced Raman of Dyes on Silver and Gold Sols. *The Journal of Physical Chemistry*, 86(17), 3391–3395. <https://doi.org/10.1021/j100214a025>

20. Nicula, A., Cristea, G., & Simion, S. (1982). "Electricitate și magnetism". București: Editura Didactică și Pedagogică.