

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

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

ȘCOALA DOCTORALĂ ȘTIINȚE ALE NATURII

Cu titlu de manuscris

C.Z.U.: 535.37:535.14:539.196(043.2)

MUNTEANU ION

**ACȚIUNEA COOPERATIV CUANTICĂ A IMPULSURILOR
SCURTE DE RADIAȚIE CU BIOMOLECULELE LA
PROPAGAREA LOR PRIN METAMATERIALE CU APLICAREA
EI ÎN DIAGNOSTICĂ, TRATAMENT ȘI INACTIVAREA
PATOGENILOR**

131.01 - FIZICĂ MATEMATICĂ

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

Chișinău 2025

Teza a fost elaborată în laboratorului de Optică Cuantică și Procese Cinetice, Institutul de Fizică Aplicată, Universitatea de Stat din Moldova, Școala Doctorală Științe ale Naturii.

Conducător științific-

ENACHI Nicolae doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea de Stat din Moldova

Componenta Comisiei de Doctorat:

GERU Ion doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, membru corespondent al AȘM. Universitatea de Stat din Moldova - **Președinte al Comisiei de doctorat;**

ENACHI Nicolae doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea de Stat din Moldova - **conducător de doctorat;**

CIOBANU Nellu doctor în științe fizico-matematice, conferențiar universitar, Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie "Nicolae Testemițanu" din Republica Moldova – **referent;**

EVTODIEV Igor doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea de Studii Politice și Economice Europene "Constantin Stere" USPEE – **referent;**

VOVC Victor doctor habilitat în științe medicale, profesor universitar, Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie "Nicolae Testemițanu" din Republica Moldova – **referent;**

Susținerea va avea loc la 22 Octombrie, ora 14:00 în cadrul Ședinței Comisiei de susținere publică a tezei de doctorat din cadrul Școlii Doctorale Științe ale Naturii, USM.

Sediul – Universitatea de Stat din Moldova, str. M. Kogălniceanu 65 A, blocul 3, sala 332, MD-2009, Chișinău, Moldova.

Teza de doctor și rezumatul pot fi consultate la Biblioteca Națională a Republicii Moldova, Biblioteca Centrală a Universității de Stat din Moldova (MD 2009, mun. Chișinău, str. Alexei Mateevici 60), pe pagina web a ANACEC (<http://www.anacec.md>)

Rezumatul a fost expedit la 15 Septembrie 2025

Președintele Comisiei de Doctorat

doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, membru corespondent al AȘM

Conducător științific

doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar

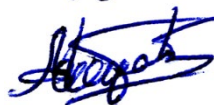
Autor:



GERU Ion



ENACHI Nicolae



MUNTEANU Ion

CUPRINS

Reversul foii de titlu	2
REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII	4
CONȚINUTUL TEZEI	9
CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI	27
REFERINȚE BIBLIOGRAFICE	28
Lista publicațiilor la tema tezei	30
Adnotare (în română, engleză și rusă)	32
Foia privind datele de tipar	35

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

Pandemia de COVID-19 a influențat profund societatea la nivel global, afectând sănătatea publică și transformând modul de viață al oamenilor. Pentru a preveni răspândirea virusului SARS-CoV-2, au fost adoptate măsuri precum distanțarea fizică, purtarea măștilor și vaccinarea. Radiația UV, o formă de radiație ultravioletă, s-a dovedit eficientă în dezinfectarea aerului și a suprafețelor, având capacitatea de a neutraliza bacterii și virusuri, inclusiv SARS-CoV-2. Cu toate acestea, utilizarea sa necesită precauție, deoarece expunerea directă poate afecta grav pielea și ochii.

Conform teoriei dezvoltate de autorii [1], iradierea cu radiații ultraviolete, în special UV-C căreia îi corespunde lungimi de undă cuprinse între $\lambda = (200 - 280) \text{ nm}$, reprezintă una dintre cele mai eficiente metode antivirale, captând în mod constant interesul cercetătorilor. Aceștia susțin că radiația UV-C are capacitatea de a neutraliza o varietate extinsă de agenți patogeni, inclusiv microbi, viruși, bacterii, ciuperci și drojdii.

Absorbția radiațiilor UV-C de către ADN-ul biomoleculelor este cauzată în principal de tranzițiile electronice ale bazelor nucleotidice: Timina (T), Adenina (A), Citozina (C) și Guanina (G). Fiecare dintre aceste elemente absoarbe radiația UV-C la lungimi de undă distincte, generând spectre de absorbție specifice, unde punctele maxime de absorbție pentru aceste baze ADN se regăsesc în jurul valorii de $\sim 265 \text{ nm}$ [2].

Utilizarea radiației UV-C pulsate reprezintă o metodă inovatoare, bazată pe impulsuri scurte și intense, care sporesc eficiența inactivării microorganismelor comparativ cu sursele continue de UV-C. Pe lângă deteriorarea ADN-ului microbial, această tehnică poate genera efecte fotochimice suplimentare, amplificând procesul de neutralizare. Astfel, tehnologia este eficientă în dezinfectarea aerului și a suprafețelor, distrugând structura ADN/ARN a microorganismelor, inclusiv bacterii, virusuri și fungi, și prevenind capacitatea acestora de a se reproduce sau de a provoca infecții.

Recent, dezvoltarea tehnologiilor de dezinfectare pentru gestionarea riscurilor pandemice a atras atenția cercetătorilor. O abordare inovatoare implică utilizarea tehnicilor avansate de manipulare optică pentru inactivarea agenților patogeni. Aceasta include analiza rezistenței microorganismelor și optimizarea procesului de decontaminare în funcție de frecvența și durata impulsurilor luminoase. Unele metode folosesc efecte precum „penseta optică” în zone cu radiație intensă, în special cu pulsuri UV-C, sau aplică efecte centrifuge asupra particulelor în rotație, cum ar fi aerosolii sau patogenii. Aceste procese se bazează pe diferențele dintre indicii de

refracție ai microorganismelor și mediul lor, permițând atragerea acestora în zone cu radiație mai intensă, datorită efectului „pensetă optică”.

Pentru a crește eficiența dispozitivelor de inactivare a patogenilor, au fost studiate interacțiuni cooperative neliniare între microorganisme, în procesele de absorbție și emisie a fotonilor. Un model teoretic, inspirat din efectul Raman din optica cuantică, arată că procesul de dimerizare în ADN/ARN este influențat semnificativ de intensitatea radiației UV-C, sugerând un fenomen microscopic cuantic în interacțiunea cu ADN-ul. Aproximația Born-Oppenheimer este un principiu cheie în mecanica cuantică moleculară [3], care separă mișcarea nucleelor de cea a electronilor într-un sistem molecular. Este crucială pentru studiul interacțiunii radiației UV-C cu ADN-ul, în special în dimerizarea bazelor pirimidinice (timina și citozina). Intensitatea câmpului UV-C modifică poziția nucleelor în timpul împrăștierei, facilitând tunelarea electronilor între puțuri de potențial, ceea ce stimulează vibrații nucleare coerente și modifică ADN-ul. Pentru a explica inactivarea patogenilor prin radiație UV-C împrăștiată, care elimină coerent subsistemul electronic, se utilizează aproximația Born-Markov. Aceasta descrie modul în care radiația UV-C neutralizează eficient microorganismele prin eliminarea coerentă a subsistemului electronic.

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 control 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 perioadă de timp, permit soluționarea multor probleme legate de inactivarea eficientă a patogenilor din diferite medii la interacțiunea lor cu radiația UV-C.

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 timpi de expunere prelungiți.

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.

Cuvinte-cheie:

Radiații UV-C, impulsuri scurte, metamateriale, dimerizare, decontaminare.

CONȚINUTUL TEZEI

Introducerea evidențiază actualitatea temei și relevanța problemei cercetate, definind scopul general și obiectivele specifice ale studiului. Alegerea metodologiei a fost fundamentată în raport cu scopul propus, fiind motivate metodele utilizate.

Capitolul unu „Dezvoltarea tehnologiilor de decontaminare la utilizarea pulsurilor scurte de lumina și a metamaterialelor” oferă o analiză a stadiului actual în cercetarea tehnologiilor inovatoare pentru decontaminarea agenților patogeni. Decontaminarea avansată reprezintă un domeniu strategic cu aplicații în sănătate, industria alimentară, securitate și ecologie. Printre metodele emergente se remarcă utilizarea pulsurilor scurte de lumină și a metamaterialelor, care promit eficiență sporită în neutralizarea microorganismelor din diverse medii.

Radiația UV-C (200–280 nm) este eficientă în inactivarea microorganismelor prin deteriorarea ADN-ului și ARN-ului, împiedicând replicarea acestora [1,2]. Studiile recente confirmă eficacitatea sa împotriva SARS-CoV-2, cu doze de 3,7 mJ/cm² pentru o inactivare de peste 3-log și 16,9 mJ/cm² pentru inactivare completă [3]. Eficiența depinde de factori precum intensitatea radiației, durata expunerii și mediul înconjurător. Eficiența decontaminării este cuantificată prin reducerea logaritmică a patogenilor, calculată conform formulei:

$$\eta = \left(1 - \frac{N_f}{N_i}\right) \times 100, \quad (1)$$

unde η este procentul de inactivare, N_i, N_f sunt numărul inițial și final de patogeni. Doza de radiație UV-C necesară variază în funcție de microorganism, cu valori de la 1,2 mJ/cm² pentru coronavirusuri până la 337 mJ/cm² pentru adenovirusuri [4,5]. Pentru a cunoaște numărul patogenilor rămași în urma decontaminării se va folosi următoarea ecuație:

$$\text{LOG}_{10} \text{Inactiv.Pathogen} = -\log_{10} \left(1 - \frac{I_{\text{patogen}}}{100}\right). \quad (2)$$

Formula (2) calculează numărul de patogeni lăsați în urmă odată ce a avut loc decontaminarea. De exemplu, dacă în urma decontaminării unei suprafețe (să presupunem o masă) dintr-o colonie de 1 milion de viruși de pe masă 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%
Viruși rămași din 1 milion	100.000	10.000	1.000	100	10	1

Conform teorii din lucrarea [6], cantitatea de inactivare virală atinsă pentru un anumit flux radiant UV (iradiere) este ușor descrisă cu ajutorul următoarei ecuații de dezintegrare de ordinul întâi

$$N_t = N_0 \times e^{-Z \cdot E \cdot t}, \quad (3)$$

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:

$$D = E \times t, \quad (4)$$

unde: D este doza de iradiere UV, exprimată în (J/m^2). Prin combinarea relațiilor (3) cu (4), se poate obține valoarea pentru constanta de susceptibilitate Z

$$Z = -\frac{1}{D} \times \ln\left(\frac{N_t}{N_0}\right) = -\frac{1}{D} \times \ln(f), \quad (5)$$

unde f este fracția de supraviețuire. Faptul ca relația dintre doza UV și logaritmul natural al fracției de supraviețuire, este liniară pentru majoritatea patogenilor (5), reiese că starea oricărui patogen expus sub radiația UV poate fi descrisă cu ajutorul lui Z , fără să 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 [6].

Sursele UV-C, cum ar fi lămpile și laserele, diferă prin natura emisiilor — continue sau pulsate. Radiația UV-C, în special în regim pulsant, joacă un rol esențial în decontaminarea eficientă a microorganismelor, datorită intensității mari de vârf și capacității de reglare precise a parametrilor impulsului. Dezactivarea microbiană este dependentă de doza D , timpul de expunere t și iradierea aplicată. LED-urile UV-C pot opera în regim continuu (CL), pulsant în timp (TPL) sau pulsant de putere (PPL), așa cum este ilustrat în Fig. 1. Doza de radiație aplicată se determină prin relația:

$$D_{CL}(t) = \int_0^{t_{CL}} I_{CL} \times t \, dt. \quad (6)$$

Fig. 1, descrie configurația a diferitor tehnici de lumina 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.

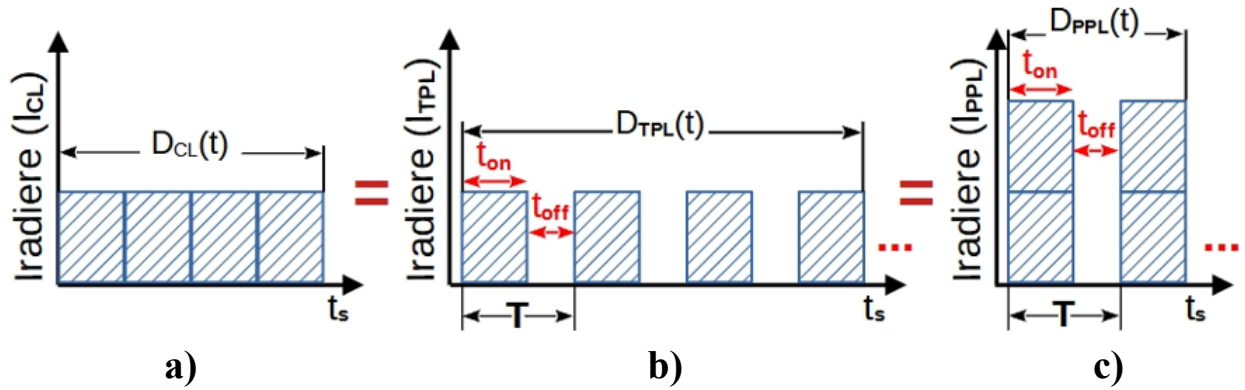


Fig. 1. Dependența iradierii de timp pentru LED-urile UV-C. a) Lumină continuă (CL). b) Lumină pulsată în timp (TPL). c) Lumină pulsată de putere (PPL).

După cum se observă, în (Fig. 1a) 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. 1.1b) și Modul 2 (Fig. 1.1c), care diferă prin doză stabilită la diferite frecvențe sau cu alte cuvinte numărul de cicluri pe secundă.

Lumina pulsată prezintă un avantaj semnificativ față de lumina continuă, printre care se numără nu doar posibilitatea ajustării intensității prin modificarea frecvenței, ci și flexibilitatea în setarea duratei impulsurilor și a ciclului de funcționare. Această abordare permite controlul precis al parametrilor optici, inclusiv timpul de expunere, intensitatea impulsurilor asigurând astfel o aplicare eficientă și precisă a energiei asupra suprafețelor expuse. Forma pulsului poate fi descrisă printr-o funcție Gaussiană:

$$I(t) = I_0 \exp\left(-\frac{(t - \mu_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (7)$$

unde $I(t)$ este intensitatea impulsului la momentul t , I_0 este intensitatea maximă, μ_0 centrul impulsului în timp (momentul în care puterea este maximă), și σ lățimea acestuia. Experimentele arată că impulsurile scurte (5 ns) reduc timpul de inactivare la câteva secunde, comparativ cu minutele necesare pentru sursele continue [7].

Fenomenul undei de galerie, observat inițial de Rayleigh, constituie baza modelelor de rezonatoare neliniare, unde undele electromagnetice se propagă de-a lungul suprafeței rezonatorului cu o pierdere de intensitate redusă comparativ cu spațiul liber.

Figura 2 prezintă două modele de rezonatoare neliniare descris în [8, 9]: (a) un rezonator inel cu o singură undă ghidată și (b) un rezonator inel cu două unde ghidate. Cuplarea unidirecțională în modelul (a) implică un rezonator inel de rază r care interacționează cu un ghid de undă în regiunea de cuplare λ_A , generând câmpurile

transmise E_{t1} și E_{t2} . Modelul (b) extinde această configurație prin includerea unei cuplări bidirecționale cu două ghiduri de undă, caracterizate prin regiunile de cuplare $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_A$ facilitând interacțiuni complexe ale câmpurilor.

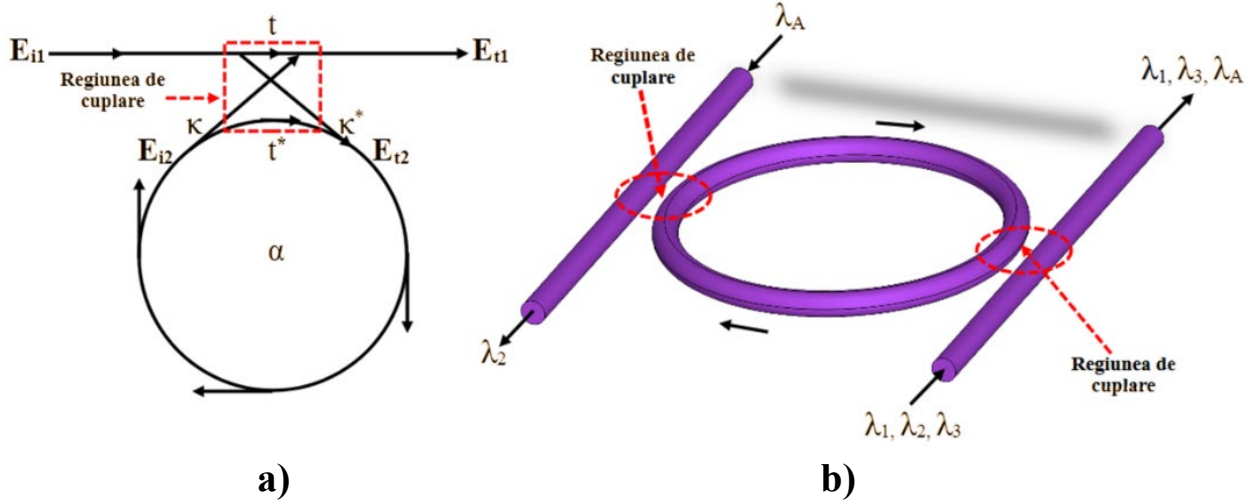


Fig. 2. a) Model de rezonator inelar cu un singur ghid de undă. b) Model de rezonator inelar cu două ghiduri de undă.

Integrarea fibrelor capilare și a sferelor dielectrice sporește eficiența captării optice a biomoleculelor prin exploatarea acestor moduri de unde de galerie, un principiu larg aplicat în rezonatoarele inelare integrate pentru aplicații avansate de biosensori.

Dacă, cuplarea este limitată la undele ce călătoresc într-o direcție (reflecție nu există), 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:

$$\begin{pmatrix} E_{t1} \\ E_{t2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t & k \\ t^* & k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{i1} \\ E_{i2} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

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:

$$|k|^2 + |t|^2 = 1. \quad (9)$$

Forma specifică a lui k nu este atât de necesară, deoarece depinde de mecanismul special de cuplare utilizat. Relația (8) 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:

$$E_{i2} = \alpha e^{i\theta} E_{t2}, \quad (10)$$

unde α este factorul de circulație interioară, fiind o mărime reală, iar pentru pierderi interne egale cu valoarea zero $\alpha = 1$. Din relațiile 8, 9, și 10 obținem:

$$E_{i1} = \frac{-\alpha + te^{-i\theta}}{-\alpha t^* + e^{-i\theta}}, \quad E_{i2} = \frac{-\alpha k^*}{-\alpha t^* + e^{-i\theta}}. \quad (11)$$

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

$$|E_{i1}|^2 = \frac{\alpha^2 + |t|^2 - 2\alpha|t|\cos(\theta + \varphi_t)}{1 + \alpha^2|t|^2 - 2\alpha|t|\cos(\theta + \varphi_t)}, \quad (12)$$

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

$$|E_{i2}|^2 = \frac{\alpha^2(1 + |t|^2)}{1 - 2\alpha|t|\cos(\theta + \varphi_t) + \alpha^2|t|^2}. \quad (13)$$

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 (12, 13) pot fi scrise în felul următor:

$$|E_{i1}|^2 = \frac{(-\alpha^2 + |t|)^2}{(1 - \alpha|t|)^2}, \quad |E_{i2}|^2 = \frac{\alpha^2(1 - |t|)^2}{(1 - \alpha|t|)^2}. \quad (14)$$

Prima parte a ecuației (14) prezintă un interes deosebit, unde se arată că atunci când puterea transmisă dispăre (este zero) $|E_{i1}|^2 = 0$ 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 [10]. În acest punct, transmisia rezultată la ieșirea ghidului de undă devine zero la frecvența de rezonanță.

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.

Capitolul doi „Metodica experimentului. Acțiunea coerentă a radiațiilor UV pulsate cu biomoleculele” explorează interacțiunea radiației UV-C cu materia, evidențiind vulnerabilitatea patogenilor (bacterii, virusuri, fungi) la doze specifice de radiație, care afectează componente celulare esențiale. Este analizat efectul letal al radiațiilor UV asupra microorganismelor, cu accent pe dimerizarea bazelor pirimidinice (timina și citozina) din ADN și ARN, ca rezultat direct al absorbției fotonilor UV.

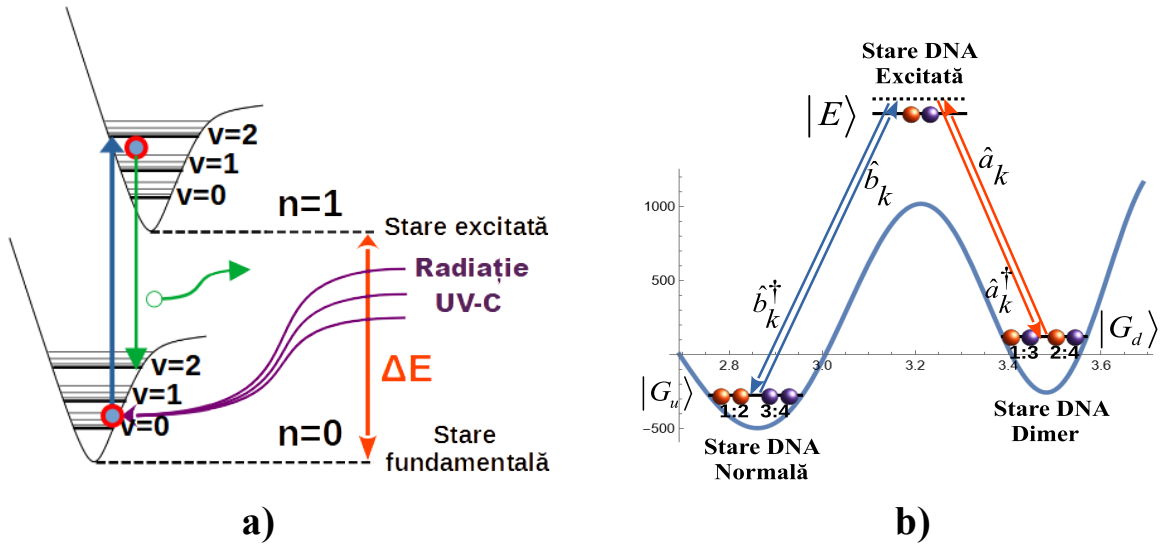


Fig. 3. a) Absorbția radiației UV-C de către molecula cu tranziția ei pe nivele energetice. b) Formarea dimerilor de timină cauzată de absorbția radiațiilor UV-C.

Interacțiunea radiației electromagnetice cu materia, se bazează pe absorbția sau emisia radiațiilor caracteristice (Fig. 3). Tranzițiile moleculare de la starea fundamentală la starea excitată sunt descrise matematic prin relația energiei fotonului absorbit: $\Delta E = E_e - E_f = \frac{hc}{\lambda}$, unde, lungimea de undă $\lambda = \frac{hc}{\Delta E}$, 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.

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: $W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \hat{H}_{\text{int}} | \psi_i \rangle|^2 \rho(E_f)$, unde ψ_i, ψ_f sunt funcțiile de undă ale stărilor inițiale și finale, $\hat{H}_{\text{int}}$ 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 $\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{E}$. 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).

Tehnica iradierii UV-C pulsate cu ajutorul laserului, inactivează virușii 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 coordinata generalizată $X_i = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$. Vom simplifica problema cercetând doar comportamentul unui nucleu sau set de nuclee din regiunea r a moleculei.

$$\hat{H}_n = \frac{M}{2} \left\{ \frac{d^2 X}{dt^2} + \Omega^2 X^2 - 2\chi X^4 / M \right\}. \quad (15)$$

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 (15) 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 noțiune 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 (15) se are în vedere $\rho \times v$ ca și în cazul corzii.

Deoarece subsistemul electronic este rapid în comparație cu subsistemul de nuclee al biomoleculelor, $\tau_e / \tau_n \sim m / M < 1$, este necesar să soluționăm problema cuantica de excitare a subsistemului electronic, considerând că subsistemul atomic de nuclee 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 [13]. Totuși fenomenologic am putea să descompunem polarizarea după câmp așa cum este prezentat în [14]:

$$P^*(r, X_s) = P_0 + \alpha_j(X_s)E_j^*(r) + \alpha_{j,l}(X_s)E_j^*(r)E_l^*(r) + \dots. \quad (16)$$

În rezonanța de tip Raman doar al doilea termen da aport în excitările vibraționale neliniare ale nucleelor moleculei. Trecând la timpuri mai mari polarizarea electronică poate fi descompusă în serie după coordonatele X a subsistemului de nuclee al biomoleculei. Modul de vibrație al unei biomolecule patogene (virus, bacterie, fung,

etc..) excitat de laserul UV poate fi scris explicit reprezentând in seria Taylor descris de expresia de mai jos

$$\alpha_j(X) \approx \alpha_j(0) + X \partial \alpha_j(0) / \partial X, \quad (17)$$

unde setul de coordonate X reprezintă gradele de libertate ale nucleelor în vibrație neliniară [15]. Considerând ca în acord cu legea a doua a lui Newton produsul dintre masă 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:

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + (\Omega^2 - 4\chi X^2)X = F_{ext} / M = [\partial \alpha_j(0) / \partial X] E_j^*(t) E(t) / M, \quad (18)$$

unde γ este parametrul de amortizare, $\gamma \times v$ forța de amortizare a vibrațiilor și $\Omega = \sqrt{\kappa / M}$ reprezintă constanta anarmonică a oscilatorului. Partea dreaptă a expresiei (18) 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

$$F_{ext} = [\partial \alpha_j(0) / \partial X] E_j^*(t) E(t), \quad (19)$$

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:

$$X_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{n\tau}{ck\omega} a_0' E_0 e^{-(\Omega_0\tau/2)^2}. \quad (20)$$

Aici E_0 și τ sunt intensitatea de vârf și, respectiv, lățimea impulsului laserului, date de relația :

$$E_L(t) = E_0 \exp \left[-\left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \right]. \quad (21)$$

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

Să 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 rezonanță $F_{ext} / M = \alpha' E_p^*(0) E_s(0) \exp[i\Omega_0 t]$, $\alpha' = [\partial \alpha_j(0) / \partial X]$. În acord cu acest concept ecuația (18) devine următoare:

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + [\Omega^2 - 4\chi X^2]X = \frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M} \exp[i\Omega_0 t]. \quad (22)$$

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.

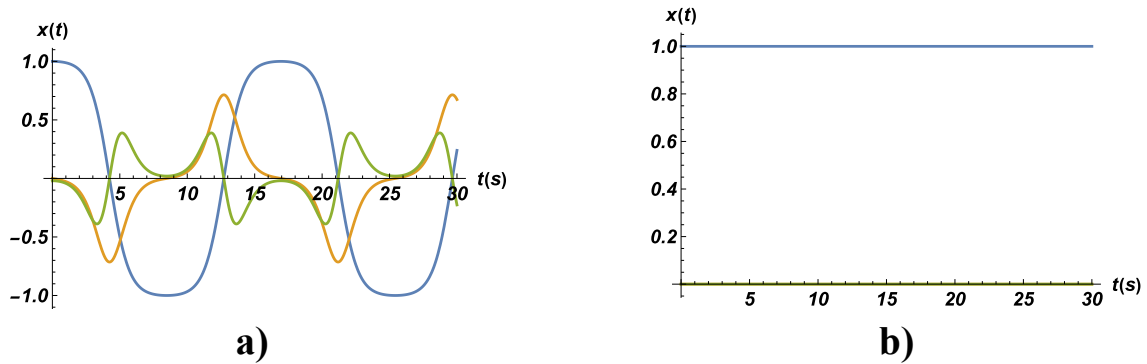


Fig. 4. Dependența vibrației biomoleculii de timp. a) Pană la punctul critic $\chi = 0,25$ exista vibrația moleculei b) $\chi > 0.25$ molecula e rupta, nu mai oscilează

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

$$\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + [\Omega^2]X = \frac{\alpha' E_p^*(0) E_s(0)}{M} \exp[i\Omega_0 t]. \quad (23)$$

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: $\lambda^2 + \gamma\lambda + \Omega^2 = 0$, unde

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

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

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

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

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.

$$(i\Omega_0)^2 X_0 \exp[i\Omega_0 t] + \gamma i\Omega_0 X_0 \exp[i\Omega_0 t] + \Omega^2 X_0 \exp[i\Omega_0 t] = A(0) \exp[i\Omega_0 t] \rightarrow \quad (24)$$

$$X_0 \{\Omega^2 - \Omega_0^2 + i\gamma\Omega_0\} = A(0) \rightarrow X_0 = \frac{A(0)}{\Omega^2 - \Omega_0^2 + i\gamma\Omega_0} . \quad (25)$$

Această soluție trebuie de introdus în ecuația neliniară pentru oscilator (18) 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 (24). Desigur că v-om primi un $\bar{X}$ care se exprimă prin frecvență a oscilatorului nenormată, similară cu soluția (25). 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 că amplitudinea v-a începe să crească atunci când exista 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. Să cercetăm cazul 2 când durată pulsului este mult mai mică decât frecvența.

$$X_0 \exp[i\Omega_0 t] C, \quad |\Delta A(t) / \Delta t| \gg \Omega_0 |A(t)|, \quad \frac{\partial^2 X}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial X}{\partial t} + \Omega^2 X = A(t) \text{ unde,}$$

$$A(t) = \frac{\alpha' E_p^*(m) E_s(m)}{M} \exp[-(t - t_0)^2 / 2\tau_p^2], \quad \tau_p - \text{durata pulsului sau lățimea lui în timp}$$

$$\tau_p \ll \Omega_0^{-1} .$$

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. 5.b.

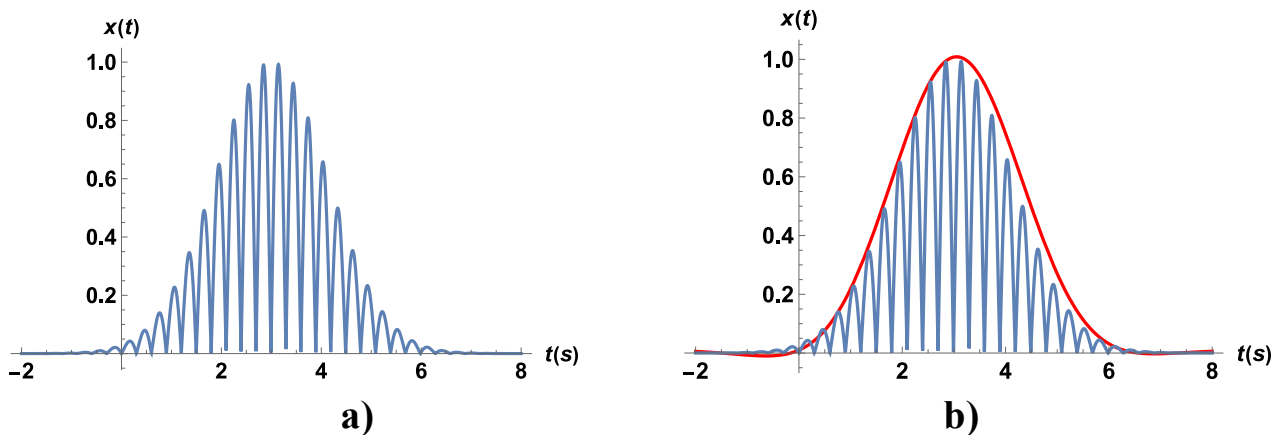


Fig. 5. a) Reprezentare grafică a frecvenței de oscilație a moleculelor b) Înfășurătoarea sau forma pulsului în raport cu frecvența de oscilație a moleculelor dată de expresia $\exp[-(t-t_0)^2 / \tau^2] \sin(\omega t)$ cu valori $\tau = 1.6; t_0 = 3; \omega = 20$

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:

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

Capitolul trei „Influența intensității radiațiilor UV-C asupra ratei de decontaminare a agenților patogeni” analizează aplicarea aproximației Born-Oppenheimer (B-O) în contextul dimerizării ADN induse de radiația UV-C, un proces cheie în modificarea structurii moleculare a ADN-ului. Aproximația B-O se bazează pe separarea mișcării nucleelor atomice de cea a electronilor, datorită diferenței semnificative de masă și viteză dintre aceștia, electronii fiind mult mai rapizi și mai

ușori. Această separare permite modelarea dinamicii moleculare într-un mod simplificat, tratând nucleele ca fiind cvasi-statice în timpul mișcării electronilor.

Ideea acestei aproximații constă în presupunerea că funcțiile de undă ale nucleelor atomice și ale electronilor dintr-o moleculă pot fi tratate separat, pe baza faptului că nucleele sunt mult mai grele decât electronii. Odată ce masa relativă a unui nucleu este mai mare în raport cu masa unui electron, aproximația B-O presupune că nucleele pot fi fixate la intervalele de timp pentru care subsistemul electronic trece într-o stare cuantică determinată de interacțiunile dintre electroni [16]. Pentru a descrie procesul de dimerizare, este propus un model neliniar de interacțiune între subsistemele moleculare ale ADN-ului și pulsurile laser. Se presupune că, pe măsură ce aceste subsisteme sunt excitate, frecvența vibrațională scade proporțional cu amplitudinea de excitație. În acest context, se propune un algoritm de dimerizare bazat pe renormalizarea frecvenței de vibrație după fiecare puls, permițând o descriere dinamică a procesului.

Pornind de la aproximația B-O mai jos considerăm energia moleculară $\hat{H}$, ca o sumă de termeni ce conțin următoarele interacțiuni:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N_n} \left\{ \frac{\hat{P}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + V(r, R_{\alpha}) \right\} + \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m}, \quad (26)$$

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 : $V(r, R) = V_N(R) + V_E(r) + V_{N,E}(r - R)$, unde

$V_N(R) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \left\{ \sum_{j < k} U(|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{R}_{k\beta}|) \right\}$ 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 $V_{N,E}(r - R) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \sum_{j < k} \frac{e_j e_k}{|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{r}_{k\beta}|}$. Aici e_j și e_k sunt sarcinile electrice a

nucleului j și a electronului respectiv, iar 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 $U(R) \approx \sum_{j < k} \frac{e_j e_k}{|R_j - R_k|}$ din seria Taylor relativ la starea sa de echilibru până în ordinul 4 după parametrul mic $\xi_{j\alpha} / R_{j\alpha}^0$.

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

Potrivit [16] într-o vibrație a laticelor neliniare într-o singură dimensiune, acest Hamiltonian este redus la cea mai simplă formă

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

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

Drept metodă de analiză a sistemelor moleculare în mecanica cuantică aproximarea B-O 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 B-O 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):

$$\Psi_t(r, R) = \Psi_e(r, R) \times \Psi_n(R), \quad (27)$$

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

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

$$\left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{[\hat{P}_\alpha + \frac{e_\alpha}{c} A(R_\alpha, t)]^2}{2M_\alpha} + \sum_{i=1}^n \frac{[\hat{p}_i - \frac{e_i}{c} A(r_i, t)]^2}{2m_e} + V(r, R) + U(r, R) \right) \times \\ \times \Psi_e(r, R, t) \times \Psi_n(R, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_e(r, R, t) \times \Psi_n(R, t), \quad (28)$$

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 (26). De exemplu pentru nuclee obținem următorul adaos la $P^2/2M$

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

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, mai observăm că primul termen la partea electronică poate fi mai mare decât potențialul de interacțiune al nucleelor cu câmpul electromagnetic. Acest lucru 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 nuclee are loc legea conservării impulsurilor electronilor și nucleelor în interacțiune P proporțional cu p . Aceasta presupunere ne permite să neglijăm integral interacțiunea nucleelor cu câmpul electromagnetic luând în considerație doar potențialul pentru electroni în aproximația nerelativistă

$V_{ph}^e = -\frac{e}{mc} \vec{A}(r,t) \cdot \vec{p}$. 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 $E = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} V |A_0|^2$. Dacă câmpul este cuantificat cu fotoni de energie $E = \hbar\omega$, putem scrie intensitatea câmpului în termeni de N fotoni.

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \left[\frac{2\pi\hbar c^2 N}{\omega V} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{\epsilon} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t). \quad (29)$$

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 emisiei unui foton și dezintegrării atomului la o stare de energie mai mică.

Capitolul patru „Aplicarea canalelor de rotație pentru decontaminarea agenților patogeni în metamateriale penetrate de radiații UV-C” explorează utilizarea metamaterialelor penetrate de radiații UV-C pentru decontaminarea agenților patogeni, cu accent pe manipularea biomoleculelor prin intermediul canalelor de rotație și a câmpurilor optice evanescente. Interacțiunea agenților patogeni cu metamaterialele sub influența radiațiilor UV-C a fost analizată, evidențiind mecanismele de captare și manipulare a biomoleculelor în câmpuri optice evanescente. S-a demonstrat că metamaterialele compozite, configurate în geometrii sferice și cilindrice, cresc semnificativ rata de decontaminare a soluțiilor infectate datorită amplificării interacțiunilor fotonice [17,18]. 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, în aranjamentele de ambalare [19]. 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 (Fig.6).

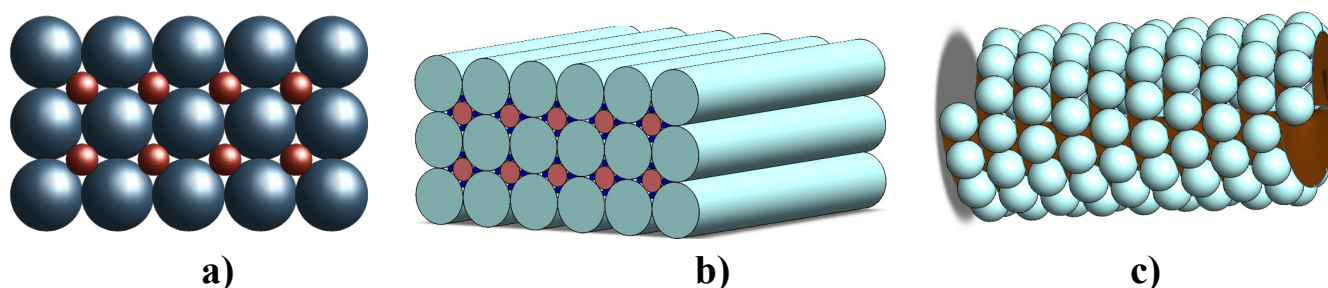


Fig.6 a) Împachetare bile mici/mari (a), respectiv fibre(b), canalele șurub.

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. 6.b densitatea este $\rho = \pi / (3\sqrt{3}) = 0,6086$, care este superioară împachetării rețelei tetraedrice Fig. 4.2a, 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.

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 $k = \lambda / \left[2\pi \sqrt{(n_m^2 - n_f^2)} \right]$. 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} .

Un model de împachetare a bilelor combinat cu tije/fibre din cuarț, prezentat în figura 7, unde suprafața totală a acestor metamateriale în contact cu fluidele contaminate este în acest caz semnificativ crescută, cu efecte benefice asupra decontaminării datorită faptului că radiația este dispersată prin unde evanescente într-un volum extins de fluide circulante. Acest tip de împachetare a tijelor în combinație cu fibrele face posibil ca dispersia radiației să persiste atât pe plan longitudinal cât și pe cel transversal, iar astfel zonele libere dintre bile/fibre să fie la fel pătrunse de radiație.

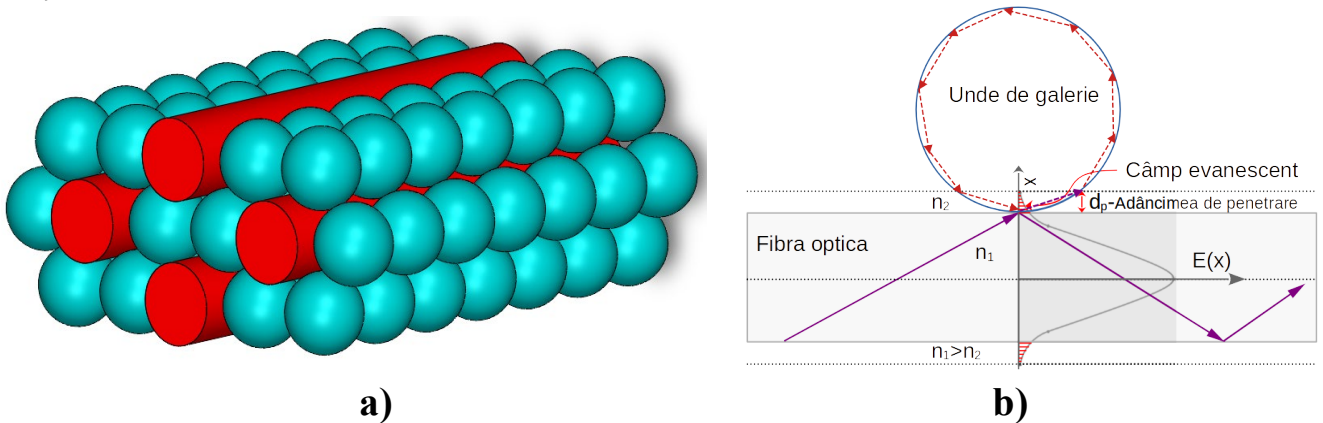


Fig. 7. a) Mod de aranjare bile combinat cu tije din cuarț; b) Unde de galerie ce apar la contactul dintre fibra-bila

Datorită faptului că în jurul fibrelor, pe toată suprafața, apare zona de evanescență [20], care, la contactul cu bila, pătrunde în interiorul ei, astfel creându-se așa-numitele unde de galerie (Fig. 7b), care sunt destul de importante în procesul de decontaminare a patogenilor. Mai mult decât atât, zona de evanescență acoperă o parte bună din suprafața sferei, iar dacă am compara această bilă cu patogeni ale căror diametre sunt mai mari de 10 ori decât adâncimea de penetrare a undei evanescente, undele de galerie ce apar pot provoca unele efecte negative, astfel încât celula să nu mai fie aptă de a se reproduce.

La interacțiunea luminii cu o sferă din cuarț imersată într-o soluție de drojdie, la o lungime de undă de $254nm$, 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.

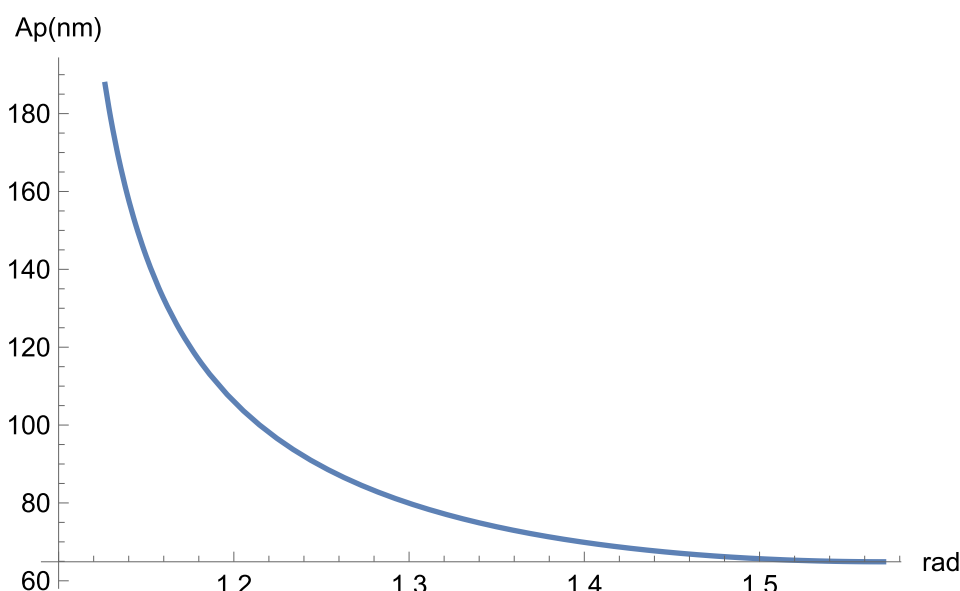


Fig. 8. Dependența adâncimii de penetrare a radiației electromagnetice în mediul n_2 (soluție de drojdie) din mediul n_1 (bilă de cuarț) de unghiul de incidență. Simulare efectuată în Wolfram Mathematica

Pentru calculul adâncimii zonei de evanescență pentru o sferă din cuarț în soluție de drojdie, cu lungimea de undă de $256nm$ și un unghi de incidență de $\theta = 65,89^\circ$, (ales aleatoriu din graficul din Fig.8) astfel încât condiția pentru reflexie totală internă să fie îndeplinită, se va utiliza formula standard pentru adâncimea de penetrare A_p a câmpului evanescent:
$$A_p = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta - n_2^2}}$$

$\delta = A_p \approx 115.83nm$. Aici, am propus ca scop de calculat volumul rămas într-un cub de latură $1cm$, în care se află $N = 1000$ de bile din cuarț, fiecare având $1mm$ 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: $S_{evanescent}(R) = 4\pi R^2 = 3.14mm^2$. **Aplicăm formula volumului** pentru un strat sferic subțire care nu este altceva decât diferența dintre două sfere: $V = \frac{4}{3}\pi[(R + A_p)^3 - R^3]$. Pentru $A_p \ll R$, putem aproxima cu $V_{evanescent} \approx 4\pi R^2 \cdot A_p \approx S_{evanescent}(R) \cdot A_p$, care este o aproximație de ordinul întâi, potrivită pentru zone foarte subțiri primește valoarea: $V_{evanescent} \approx 0.0003638mm^3$; **Volumul unei bile de raza R v-a fi egal cu:** $V_B = \frac{3}{4}\pi R^3 = 5.24 \times 10^{-10}m^3$; Volum total ocupat de bile, plus volumul zonelor evanescente este: $V_{total} = 1000 \cdot (V_B + V_{evanescent}) = 5.24 \times 10^{-7}m^3$. Volumul rămas din cub nu este altceva decât volumul ocupat de drojdie, deci: $V_{drojdie} = V_{cub} - V_{total} = 0.476mm^3$.

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 $d = \sqrt{2} - 1mm$, iar numărul de **cuburi unitare interioare** (fără marginile exterioare) este $(10-1)^3 = 729$ **goluri** în care pot fi

introduse bile. **Aria suprafeței unei bile de raza** $r = \frac{d}{2} = \frac{\sqrt{2}-1}{2} \approx 0.207mm$ **este:**

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

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

$$V_{evanescent}(r) = N \times S_{evanescent}(r) \times A_p \approx 0.0000622mm^3.$$

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

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

CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

Două direcții majore de cercetare sunt tratate în această teză: prima direcție vizează interacțiunea pulsurilor scurte cu biomoleculele, iar a doua investighează utilizarea zonei evanescente generate prin introducerea metamaterialelor transparente în fluide translucide.

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. 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-lui sub acțiunea radiației UV-C. 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. **Recomandări:** Radiația UV-C 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 asupra sănătății populației și desigur asupra mediului.

Expunerea umană trebuie evitată deoarece radiația UV-C poate provoca leziuni oculare, 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.

REFERINȚE BIBLIOGRAFICE

1. KOWALSKI, W. UVGI disinfection Theory. În: Ultraviolet germicidal irradiation handbook, *Springer*, 2009, pp.17-50.
2. 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.
3. MARA, Biasin et al. UV-C irradiation is highly effective in inactivating SARS-CoV-2 replication. În: *Sci Rep* 2021, vol 11, pp. 62-60. doi.org/10.1038/s41598-021-85425-w
4. BUONANNO, M., WELCH, D., SHURYAK, I. *et al.* Far-UVC light (222 nm) efficiently and safely inactivates airborne human coronaviruses. În: *Sci Rep*, 2020, vol. 10. doi.org/10.1038/s41598-020-67211-2
5. LYTLE CD, SAGRIPANTI JL. Predicted inactivation of viruses of relevance to biodefense by solar radiation. În: *J Virol*. 2005, vol. 79. doi: 10.1128/JVI.79.22.14244-14252.2005
6. 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.
7. 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
8. YARIV, A. Critical coupling and its control in optical waveguide-ring resonator systems. În: *IEEE Photon. Technol. Lett.* vol. 14, pp. 483–485
9. YARIV, A.: Universal relations for coupling of optical power between microresonators and dielectric waveguides. În: *Electron. Lett.* vol. 36, pp. 321–322
10. 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
11. HANSON, DAVID. "The Born-Oppenheimer Approximation". Chemistry

- Libretexts. În: *Chemical Education Digital Library*. Retrieved 2 August 2022.
12. 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>
 13. 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.
 14. SCHUBERT, M., WILHELMI, B. Nonlinear Optics and Quantum Electronics. În: *Wiley*. 1986, 752 p., ISBN 0471088072, 9780471088073
 15. SHEN, Y.R., BLOEMBERGEN, N. Theory of simulated Brillouin and Raman scattering. În: *Phys Rev*, 1965, vol. 137.
 16. 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 decontamination of translucent liquids and gases, În: *J Phys D*. 2018, vol. 51, pp.385101-11.
 17. 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
 18. 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.
 19. 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
 20. 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.

LISTA PUBLICAȚIILOR AUTORULUI LA TEMA TEZEI

Articole în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS

1. ENAKI, N.A., PASLARI, T., BAZGAN, S., STARODUB, E., MUNTEANU, I., TURCAN, M., EREMEEV, V., PROFIR, A., MIHAILESCU, I.N. UVC radiation intensity dependence of pathogen decontamination rate: semiclassical theory and experiment. În: *Eur Phys J Plus*. 2022, **137(9)**, 1047-1—1047-14. Doi: [10.1140/epjp/s13360-022-03252-y](https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03252-y) (IF: 2,7).

2. ENAKI, N.A., MUNTEANU, I., PASLARI, T., TURCAN, M., STARODUB, E., BAZGAN, S., PODOLEANU, D., RISTOSCU, C., 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, **16(13)**, 4559-1—4559-13. Doi: [10.3390/ma16134559](https://doi.org/10.3390/ma16134559). (IF 3,4).

3. 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, **53(3)**, 133—145. Doi: [10.1007/s00249-024-01702-2](https://doi.org/10.1007/s00249-024-01702-2) (IF: 2,2).

Articole în reviste din alte baze de date acceptate de către ANACEC

1. MUNTEANU, I. Action Of UV-C Radiation for Biomolecules Inactivation, With Application in Diagnostics. În: *Biomed J Sci & Tech Res*. 2023, **52(1)**, 43282—43287. Doi: 10.26717/BJSTR.2023.52.008192

2. STARODUB, E., MUNTEANU, I., BAZGAN, S., PODOLEANU, D., COSTISEN, I., ENAKI, N.A. Construction of Rotation Channels for Pathogens Using the Repacking Method of Elements from Metamaterial Penetrated By Ultraviolet C Radiation. În: *Phys Sci & Biophys J*. 2023, **7(2)**, 256-1—256-11. Doi: [10.23880/psbj-16000256](https://doi.org/10.23880/psbj-16000256).

3. MUNTEANU, I., STARODUB, E., ENAKI, N.A. Influence of Ultraviolet Radiations Against Bacteria, Fungi, Fungal Spores. Determination of UV Action Spectra Affecting the Infection Process. În: *Biomed J Sci & Tech Res*. 2023, **50(2)**, 41448—41454. Doi: 10.26717/BJSTR.2023.50.007920.

4. ENAKI, N.A., MUNTEANU, I., TURCAN, M., BAZGAN, S., PASLARI, T., STARODUB, E. Application of Rotation Channels for Decontamination of Pathogens in Metamaterials Penetrated by UVC Radiation. În: *J Infections Diseases Preventive Medicine*. 2023, **11(2)**, 1000296-1—1000296-3. Doi: [10.35841/2329-8731.23.11.296](https://doi.org/10.35841/2329-8731.23.11.296).

5. 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, **20(3)**, p.187—191. Doi: [10.30574/gscbps.2022.20.3.0263](https://doi.org/10.30574/gscbps.2022.20.3.0263).

Articole în reviste din Registrul Național al revistelor de profil (cu indicarea categoriei)

1. MUNTEANU, I. Mecanism de inactivare a agenților patogeni cu aplicare în implantologie. În: *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)

Doi.org/10.59295/sum1(171)2024_13. Link: <https://natural.studiamsu.md/nr-1-171/>

Articole în lucrările manifestărilor științifice incluse în bazele de date Web of Science și SCOPUS

1. 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*, 2023. 2022 E-Health and Bioengineering Conference (EHB), 17-18 November 2022, Iasi, Romania , p. 1—4 .
Doi: [10.1109/EHB55594.2022.9991449](https://doi.org/10.1109/EHB55594.2022.9991449)

2. PODOLEANU, Diana., COSTISEN, Igor., MUNTEANU, Ion., STARODUB, Elena., ENACHI, Nicolae. „The Generation of Photonic "Molecules" Under the Action of Ultraviolet Light in the DNA/RNA Dimerization Process” IEEE Conference Advanced Topics on Measurement and Simulation (ATOMS), Constanta. Romania.
<http://atoms2024.org/program.html>

Articole în lucrările manifestărilor științifice incluse în Registrul materialelor publicate în baza manifestărilor științifice organizate din Republica Moldova

1. MUNTEANU, I., STARODUB, Elena. Radiații ultraviolete-c utilizate în dezinfecție și protecția suprafeței implanturilor. In: *Conferința tehnico-științifică a studenților, masteranzilor și doctoranzilor*, 5-7 aprilie 2023, Chișinău. Chișinău, Republica Moldova: Tehnica-UTM, 2023, Vol.2, pp. 158-162. ISBN 978-9975-45-956-3. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/188467

2. MUNTEANU, I. Procedura de inactivare a patogenilor pentru dezinfecția și protecția suprafeței implantului. Conferința științifico-practică internațională „Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă”, Ediția a XI-a, 16-17 martie, 2024, Volumul I, Chișinău, Moldova, p. 240—245, CZU: 535:61, Doi: 10.46727/c.v1.16-17-05-2024. Link: https://drive.google.com/file/d/1FVF3LpuwKz6tShC1IUqyBNLFC_KuNZE8/view

3. MUNTEANU, Ion, CIOBANU, Nellu. New methods of pathogen inactivation using uv-c radiation. Conferința Nationala cu Participare Internațională: ȘTIINȚELE ale NATURII ÎN DIALOGUL GENERAȚILOR, editia VII, 12-13 septembrie 2024, Chișinău, Republica Moldova.

4. MUNTEANU, I. Procedeu de inactivare a agenților patogeni sub acțiunea UVC cu aplicare în implantologie. Conferința științifico-practică „TEHNOLOGII FIZICE AVANSATE CU APLICAREA UVS ÎN MONITORIZAREA ȘI MODELAREA FACTORILOR DE MEDIU”, Ediția a V – a, 8 Noiembrie 2024, Chișinău, [Editura USM], p. 55-62, CZU: 535.37:615.371:616.314-77

Brevete de invenție și alte obiecte de proprietate intelectuală (OPI)

1. MUNTEANU, I., ENACHI, N. Dispozitiv pentru decontaminarea lichidelor. Brevet de Invenție nr. MD 1723 Y 2023.10.31.

2. MUNTEANU, I., ȚURCAN, M. Brevet de scurta durata **MD s 2024 0049** acordat în baza hotărârii nr.225 din 10.01.2025

3. MUNTEANU, I., Dispozitiv sterilizator UV-C, Brevet de scurta durata acordat în baza hotărârii nr.4057 din 27.03.2025, nr. depozit: s 2025 0015

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, 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 diverse tipuri de combinații fibrelor din cuarț. În investigațiile realizate experimental a fost determinată 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 constă în dezvoltarea teoriei în modelul (aproximarea) Born-Oppenheimer și aplicarea lui la dimerizarea ADN-ului 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, aer 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, 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 ultraviolet 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-Opingheimer 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 инаktivации 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, Кишинёв, 2025, написана на румынском языке и состоит из введения, 4 глав, общих выводов и рекомендаций, 135 библиографических названий, 122 страниц основного текста, 46 рисунков. Результаты, представленные в диссертации, опубликованы в 15 научных статьях.

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

Цели диссертации: анализ взаимодействия УФ-С-излучения с веществом; инаktivация 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 инаktivации дрожжевого раствора. Разработаны и запатентованы устройство для обеззараживания жидкости и стерилизатор УФ-С.

Решенная научная проблема: заключается в выделении эффективного механизма инаktivации 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 инаktivации 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.

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**

131.01. FIZICĂ MATEMATICĂ

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

Aprobat spre tipar: 04 Septembrie 2025

Formatul hârtiei: 60×84 1/16

Hârtie offset. Tipar offset.

Tiraj: 50 exemplare

Coli de tipar: 2.0

Comanda nr. 00016

ProEdit SRL

Str. Sprâncenoaia 1/1, MD-2028

Chișinău, Republica Moldova