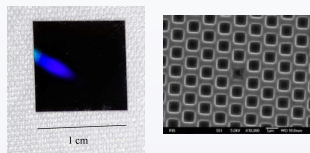


RASPOZNAVANJE KARBONATNIH ČESTICA U VODI

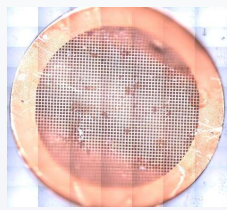
Aleksandar Maksimović, Vlasta Mohaček Grošev
Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb



U sklopu projekta „Razvoj funkcionalnog pića u održivoj ambalaži JamINNO+“ Institut Ruđer Bošković je partner zadužen za provjeru/detekciju/kvantificiranje postojanja mikroplastike u vodi koju proizvodi i stavlja na tržište tvrtka Jamnica d.o.o. U sklopu tog projekta razvijen je sistem za filtraciju od inoksa s teflonskim nosačem dva tipa uzoraka: silicijevih filtera stranice 1 cm i pora 1 mikron (Slika 1), te mrežica za transmisiju elektronsku mikroskopiju $\phi=3$ mm i pora od 26 mikrona (Slika 2)



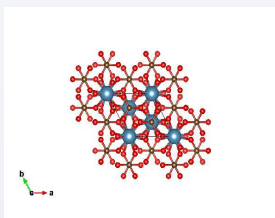
Slika 1. Silicijev filter, pore 1 mikron.



Slika 2. TEM mrežica dijametra 3 mm, pore 26 μm .

Većina čestica u vodovodnoj vodi detektirana na filterima ima spektar poput onog na vrhu Slike 6, koji odgovara CaCO_3 . Međutim ima i spektara koji odstupaju, poput spektra čestice 2 na Slici 5. Pretpostavljamo da bi ta čestica mogla biti od dolomita $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ (vidi Tablicu 1 izračunatih vrijednosti fononskih prijelaza aktivnih u Ramanu).

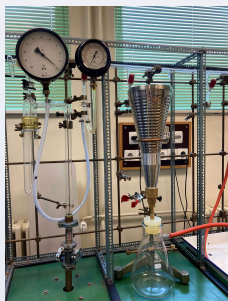
Slika 3. CaCO_3 projekcija na c os.



Tablica 1. Ramanski aktivni modovi za PBE i LDA funkcionalne dobiveni VASP programom analizirani su pomoću programa Yphon. Funkcionalni B3LYP i PBESOL korišteni su u programu CRYSTAL09³.

Ramanske frekvencije R3c grupa	PBE			LDA		
	ZnCO_3	MgCO_3	CaCO_3	CaCO_3	CaCO_3	CaCO_3
ν , cm^{-1} , (Eg)	182.7	203.5	152.5	166.9	155.6	156
ν , cm^{-1} , (Eg)	282.2	315.2	268.4	298.3	279.2	283
ν , cm^{-1} , (Eg)	693.2	705.8	680.1	692.9	706.3	714
ν , cm^{-1} , (A1g)	1060.2	1068.3	1058.5	1096.9	1084.6	1088
ν , cm^{-1} , (Eg)	1373.5	1419.4	1402.6	1461.0	1456.8	1438

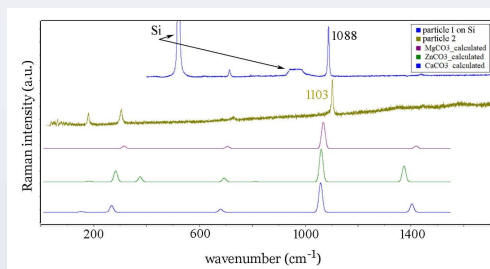
Ramanske frekvencije R3 grupa	B3LYP	PBESOL	opaženi ^{2b}
	$\text{MgCa}(\text{CO}_3)_2$	$\text{MgCa}(\text{CO}_3)_2$	$\text{MgCa}(\text{CO}_3)_2$
ν , cm^{-1} , (Eg)	186.8	173.5	178
ν , cm^{-1} , (Ag)	242.8	214.0	229
ν , cm^{-1} , (Eg)	321.4	301.5	301
ν , cm^{-1} , (Ag)	364.4	345.9	340
ν , cm^{-1} , (Eg)	727.4	702.8	724
ν , cm^{-1} , (Ag)	883.6	830.1	881
ν , cm^{-1} , (Ag)	1111.6	1106.6	1098
ν , cm^{-1} , (Eg)	1484.7	1495.3	1442



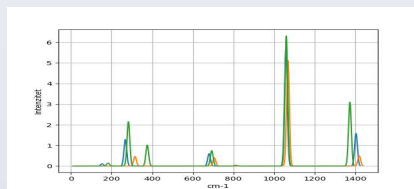
Slika 4. Sistem za vakuumsku filtraciju. Filter je montiran u mješnjeni nosač ispod vrča.



Slika 5. Čestica na TEM mrežici. Rupice su dimenzija 26 μm sa 26 μm .



Slika 6. Usporedba opaženih ramanskih spektara čestica na silicijskom filteru iz vodovodne vode te izračunatih spektara karbonata.



Slika 7. Vibracijska gustoća stanja (eng. VDOS) karbonatnih čestica: plavo - CaCO_3 , zeleno - ZnCO_3 , narančasto - MgCO_3 dobivena DFT računom uz PBE funkcional.

U svijetu se puno pažnje danas poklanja detekciji plastike u vodi, te je provedena i usporedna studija detekcije količine mikroplastike u flaširanoj vodi za piće⁴. Rezultati iz literature pokazuju da broj čestica plastike raste eksponencijalno sa smanjenjem dimenzija čestica, te je najteže utvrditi broj čestica manjih od 1 μm . Za određivanje brzine raspada pojedinih tipova plastičnih čestica, potrebno je određivati raspodjelu broja čestica danog tipa u vremenu⁵. Raspodjelu čestica po tipu i broju može se dobiti Ramanovom spektroskopijom - tako što se za svaku točku filtera može provesti oslikavanje, detektirati čestica i snimiti spektar čestice.

[1] „Razvoj funkcionalnog pića u održivoj ambalaži JamINNO+“, projekt iz poziva Ministarstva gospodarstva i održivog razvoja broj KK.01.2.1.02

[2] a) S. P. S. Porto, J. A. Giordmaine, T. C. Damen, Phys. Rev. 147 (1966) 608., b) S. Farsang et al. American Mineralogist 103 (2018) 1988.

[3] L. Valenzano, Y. Noel, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, M. Ferrero, R. Dovesi, Theor. Chem. Acc. 117 (2007) 991.

[4] S. A. Mason, V. G. Welch, J. Neratko: Frontiers in Chemistry 6 (2018) art. no. 407.

[5] T. Metz, M. Koch, P. Lenz: Extracting microplastic decay rates from field data. Scientific Reports 12 (2022) 1223.

