



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
FACULTATEA DE FIZICĂ
ȘCOALA DOCTORALĂ DE FIZICĂ

Fotocatalizatori pe bază de TiO_2 :
impactul asupra mediului și alternative

Teză de doctorat

Conducător de doctorat:

Prof. dr. habil. Lucian Baia

Student doctorand:

Kata Saszet

Cluj-Napoca

2025

Cuprins

1. Introducere.....	1
2. Principalele obiective ale tezei de doctorat.....	3
3. Structura tezei de doctorat.....	4
4. Metode și instrumente	5
4.1. Metodă de testare a căutării hranei (la furnici) pe bază de feromoni în prezența TiO_2	5
4.2. Prepararea compozitelor de TiO_2 - Fe_3O_4 separabile magnetic	7
4.3. Metoda de prelucrare a mineralelor de rutil.....	8
4.4. Instrumentație aplicată pentru caracterizarea materialelor.....	8
Microscopie electronică de baleiaj și transmisie (SEM și TEM)	8
Difracția cu raze X (XRD).....	9
Spectroscopia Raman.....	9
Fluorescență cu raze X (XRF)	10
Spectroscopia fotoelectronică cu raze X (XPS).....	10
Spectroscopia de reflexie difuză (UV-Vis DRS).....	11
Măsurarea suprafeței specifice	11
Magnetometria prin vibrații (VSM).....	11
4.5. Evaluarea proprietăților fotocatalitice.....	11
5. Rezultate și discuții	13
5.1. Investigarea ecotoxicității și descompunerea fotocatalitică a unui feromon specific de către Evonik AEROXIDE P25 TiO_2	13
5.1.1. Investigarea ecotoxicității TiO_2 cu privire la comportamentul de hrănire al furnicii <i>Lasius niger</i>	13
5.1.2. Evaluarea degradării fotocatalitice a unui compus organic prezent în feromoni de către TiO_2	14

5.2.	Investigații privind sistemele fotocatalitice pe bază de TiO_2 și Fe_3O_4 .	15
5.2.1.	Prepararea compozitelor de TiO_2 - Fe_3O_4 separabile magnetic. .	15
5.2.2.	Evaluarea eficienței fotocatalitice a compozitelor magnetice de TiO_2 pentru eliminarea paracetamolului sub iradiere UV.....	16
5.2.3.	Evaluarea separabilității și reutilizării compozitelor magnetice.	16
5.2.4.	Investigarea corelațiilor dintre proprietățile structurale, optice și de suprafață, eficiența fotocatalitică și capacitatea de reutilizare.	17
5.3.	Investigarea mineralului rutil ca fotocatalizator activ sub acțiunea luminii vizibile, obținut prin nano măcinare [9].	18
5.3.1.	Explorarea unei metode de prelucrare a mineralelor de rutil pentru utilizarea lor în fotocataliza activată de lumina vizibilă.	18
5.3.2.	Investigarea proprietăților structurale, optice și de suprafață ale mineralelor prelucrate.	20
5.3.3.	Evaluarea performanței fotocatalitice a rutilului natural în eliminarea fenolului și ibuprofenului sub iradiere cu lumină Vis. & Stabilirea corelațiilor dintre proprietățile structurale, optice și de suprafață a materialelor și activitatea fotocatalitică.	20
5.3.4.	Analiza raportului cost-beneficiu între mineralul rutil natural și TiO_2 comercial Evonik Aeroxide P25 în aplicații de fotocataliză eterogenă..	21
6.	Concluzii.....	22
7.	Activitatea științifică.....	25
8.	Bibliografie	32

1. Introducere

Prin eforturi de colaborare, știința și industria au dezvoltat o varietate de procese noi de remediere a apei în urma poluării cauzată de contaminanții emergenți (CEC), care nu pot fi eliminați eficient din apele reziduale prin metode convenționale. O categorie importantă a acestor tehnici este reprezentată de procesele avansate de oxidare (AOP)[1], printre care fotocataliza eterogenă a câștigat o mare popularitate în ultimele decenii datorită eficienței sale ridicate de eliminare a unei game largi de poluanți organici. Unul dintre cele mai promițătoare aspecte ale fotocatalizei eterogene este potențialul său de sustenabilitate ecologică. Cu ajutorul unui fotocatalizator adecvat, această metodă poate valorifica energia solară pentru a mineraliza complet contaminanții organici în produse finale nepoluante, cum ar fi apa și dioxidul de carbon [2]. În plus, datorită celor două faze diferite prezente în sistemul fotocatalitic - fotocatalizatorul solid și poluantul din mediul apos - reținerea fotocatalizatorului uzat la sfârșitul procesului este relativ ușoară.

Dioxidul de titan (TiO_2) a fost primul semiconductor utilizat în procesele fotocatalitice și a fost utilizat prima dată pentru descompunerea fotocatalitică a apei de Fujishima și Honda în 1972 [3]. De atunci, este cel mai utilizat fotocatalizator, în principal datorită performanțelor sale excelente sub iradiere cu lumina UV. Cu toate acestea, cercetările semnificative din ultimele decenii s-au concentrat pe extinderea activității fotocatalitice a TiO_2 la spectrul solar, pe îmbunătățirea eficienței sale și pe realizarea unui proces mai viabil pentru aplicații la scară largă. Procesul de cercetare și dezvoltare a nanomaterialelor noi și performante pentru fotocataliză implică numeroase abordări de sinteză, mai multe substanțe chimice dure, procese costisitoare și

complexe, unele dintre acestea generând diverse produse secundare nedorite [4]. Având în vedere procesul general de fotocataliză eterogenă, aceste aspecte ale producției de fotocatalizatori pun în discuție clasificarea TiO_2 ca soluție prietenoasă cu mediul înconjurător.

Odată cu creșterea producției industriale de nano TiO_2 și cu eliberarea necontrolată a acestor structuri în mediu, s-a observat o acumulare a acestora atât în mediul nostru tehnic, cât și în cel natural. În plus, valorile crescătoare de nano TiO_2 sugerate de modelele predictive ridică probleme tot mai mari legate de ecotoxicitate [5]. Efectul toxic al TiO_2 prin diferite căi de expunere și asupra mai multor organisme model a fost investigat în mod cuprinzător, însă accentul principal al acestor studii a fost pus pe seama efectului direct al expunerii la TiO_2 . Unul dintre principalele mecanisme ale efectului toxic al TiO_2 este stresul oxidativ cauzat de speciile reactive de oxigen (ROS) generate de semiconductor [6].

Literatura de specialitate privind efectele ecologice indirecte, subletale și cronice în cazul eliberării prelungite a TiO_2 în mediu, în special asupra comportamentului și structurii unor comunități de specii, este limitată. Insectele sociale, precum furnicile, sunt deosebit de vulnerabile în ceea ce privește efectele fotocatalitice ale TiO_2 , datorită importanței indicilor chimici în comunicarea lor. Cu toate acestea, posibilitatea oxidării fotocatalitice a acestor molecule endobiotice nu a fost luată în considerare anterior.

Pentru reducerea emisiilor în mediu și prevenirea impactului nano TiO_2 asupra mediului natural, o soluție propusă este separarea magnetică a fotocatalizatorilor după procesul de depoluare a apei, permițând recuperarea și reutilizarea acestora. Acest proces implică introducerea TiO_2 în compozite cu nanoparticule magnetice, cum ar fi Fe_3O_4 (magnetită). Principala provocare a

acestei metode constă în stabilizarea oxidului de fier în cadrul matricei compozite, care este esențială pentru asigurarea unei performanțe fotocatalitice constante și pentru menținerea capacității de reciclare [7,8].

Optimizarea fotocatalizatorului TiO_2 , pe lângă îmbunătățirea eficienței sale, trebuie să implice, de asemenea, dezvoltarea unei metode de preparare simple, viabile, cu materiale potențial prietenoase cu mediul și cu mai puține produse secundare nedorite. Forma minerală naturală a TiO_2 , rutilul, este utilizată în principal ca materie primă în producția industrială. Deși a fost neglijat anterior în fotocataliză eterogenă din cauza conținutului său de impurități și posibilității limitate de modificare a proprietăților, studiile recente sugerează faptul că, cu o prelucrare adecvată, rutilul natural poate servi ca o sursă alternativă promițătoare de fotocatalizatori TiO_2 [9].

2. Principalele obiective ale tezei de doctorat

Obiectivul principal al tezei este investigarea impactului asupra mediului al fotocatalizatorului sintetic TiO_2 și studiul a două metode alternative pentru atenuarea potențială a acestui impact. Obiectivul principal este atins printr-o cercetare interdisciplinară care se ramifică în trei direcții: evaluarea efectelor ecotoxicologice ale TiO_2 comercial asupra comunicării furnicilor; investigarea separabilității și reutilizării compozitelor pe bază de TiO_2 separabile magnetic pentru a reduce emisiile în mediu; și investigarea potențialului fotocatalitic a mineralelor naturale de TiO_2 rutil ca surse alternative de fotocatalizatori.

3. Structura tezei de doctorat

Teza de doctorat conține cinci capitole și este urmată de o secțiune de referințe, mulțumiri, anexe ale lucrării științifice și o prezentare a activității științifice a doctorandului.

Capitolul 1. subliniază motivația din spatele cercetării științifice a tezei, prezintă aspectele teoretice legate de fotocatalizatorii de TiO_2 și observațiile cheie din literatura anterioară și definește obiectivele tezei. Capitolele 2, 3 și 4. evidențiază trei teme de cercetare științifică interconectate, care investighează impactul fotocatalizatorilor de TiO_2 asupra mediului și soluțiile alternative. Următoarea secțiune prezintă etapele parcurse pentru atingerea obiectivelor principale, prezentate în structura capitolelor 2, 3 și 4.

Capitolul 2. Investigarea ecotoxicității și descompunerea fotocatalitică a unui feromon specific de către Evonik AEROXIDE P25 TiO_2 .

- Investigarea ecotoxicității TiO_2 asupra comportamentului de căutare a hranei la specia de furnici *Lasius niger*.
- Evaluarea degradării fotocatalitice a unui compus organic prezent în feromoni de către TiO_2 .

Capitolul 3. Investigații privind sistemele fotocatalitice pe bază de TiO_2 și Fe_3O_4 .

- Prepararea compozitelor de TiO_2 - Fe_3O_4 separabile magnetic.
- Evaluarea eficienței fotocatalitice a compozitelor magnetice TiO_2 pentru eliminarea paracetamolului sub iradiere UV.
- Evaluarea separabilității și reutilizării compozitelor magnetice.
- Investigarea corelațiilor dintre proprietățile structurale, optice și de suprafață, eficiența fotocatalitică și capacitatea de reutilizare.

Capitolul 4. Investigarea mineralului rutil ca fotocatalizator activ sub acțiunea luminii vizibile, obținut prin nano măcinare.

- Explorarea unei metode de prelucrare a mineralelor de rutil pentru utilizarea în fotocataliza activată de lumina vizibilă.
- Investigarea proprietăților structurale, optice și de suprafață ale mineralelor prelucrate.
- Evaluarea performanței fotocatalitice a rutilului natural în eliminarea fenolului și ibuprofenului sub iradiere cu lumină vizibilă.
- Stabilirea corelațiilor dintre proprietățile structurale, optice și de suprafață a materialelor și activitatea fotocatalitică.
- Analiza raportului cost-beneficiu între mineralul rutil natural și TiO_2 comercial Evonik Aeroxide P25 în aplicații de fotocataliză eterogenă.

Teza se încheie cu **Capitolul 5., Observații finale și concluzii**, care evidențiază principalele rezultate ale cercetării prezentate.

4. Metode și instrumente

4.1. Metodă de testare a căutării hranei (la furnici) pe bază de feromoni în prezența TiO_2

Pentru a evalua impactul nanoparticulelor de TiO_2 asupra comportamentului de căutare de hrană bazat pe feromoni la furnici, a fost efectuat un test ecotoxicologic în condiții de laborator folosind specia model *Lasius niger* (furnica neagră de grădină). Furnicile lucrătoare au fost colectate dintr-o colonie naturală și acclimatizate în patru colonii artificiale timp de două săptămâni în condiții controlate. Înainte de testare, hrănirea a fost întreruptă timp de trei zile pentru a încuraja activitatea căutării de hrană. Configurația experimentală a inclus o cutie de plastic umplută cu apă conectată la un cuib

printr-un tub de plastic, cu un pod de hârtie în formă de romb suspendat deasupra apei, care ducea la o sursă de hrană (**Figura 1a.**). Podul avea două ramuri identice: una tratată cu o suspensie apoasă de TiO_2 ($1 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$) și cealaltă cu apă distilată. Controalele negative aveau ambele ramuri tratate cu apă; controalele pozitive aveau ambele ramuri tratate cu suspensie de TiO_2 (**Figura 1b.**).

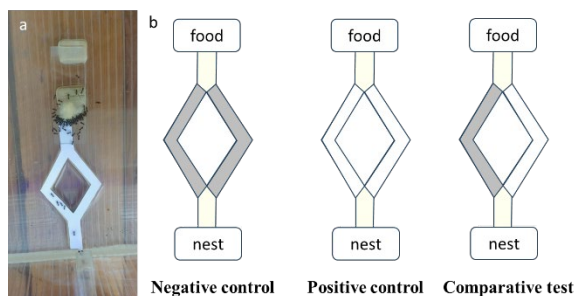


Figura 1.a. Configurație experimentală. **b.** Schiță a configurației experimentale și a tipurilor de teste (gri - tratament cu apă distilată; alb - tratament cu suspensie de TiO_2).

Fiecare experiment a fost efectuat sub iradiere cu lumină UV-A (6 W, $\lambda_{\text{max}} = 365 \text{ nm}$) pentru a activa proprietățile fotocatalitice ale TiO_2 . Pentru fiecare replicare au fost utilizate poduri noi și sursă nouă de hrană. Testele comparative au fost efectuate în 12 replici, controalele în 5, cu atribuirea aleatorie a cuiburilor pentru a elimina efectul memorării. Fiecare eveniment de trecere a furnicilor prin linia din centrul podului a fost înregistrat și contorizat în fiecare minut timp de 9 minute cronometrul fiind pornit după primul eveniment. Analizele statistice au fost efectuate prin mediul de software R (pachetul lme4) pentru a analiza datele prin modele mixte liniare generalizate

(GLMM, distribuție Poisson), cu tratamentul ramurii ca variabilă de intrare și traversările furnicilor ca ieșire. Identificatorul testului individual a fost utilizat ca efect aleatoriu pentru a ține seama de variația între replici.

4.2. Prepararea compozitelor de TiO_2 - Fe_3O_4 separabile magnetic

Nanoparticulele de oxid de fier (IONP) au fost sintetizate printr-o metodă de precipitare controlată, utilizând precursorul $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (0,2 M). Au fost obținute patru probe prin variația condițiilor experimentale, respectiv alcalinitatea soluției și temperatura (**Figura 2**). Proba IONP_0.8_75 a fost aleasă pentru a fi introdusă în compozit cu TiO_2 datorită dimensiunii medii favorabile a cristalitelor și a fazei cristaline predominante de magnetită.

	0.4 M NaOH	0.8 M NaOH
25 °C	33.3 nm	23.2 nm
75 °C	43.7 nm	46.4 nm

Figura 2. Condiții de sinteză și dimensiunea medie a cristalitelor în cazul probelor IONP.

Pentru partea fotocatalitică a compozitelor au fost alese două probe de TiO_2 . Primul TiO_2 a fost sintetizat prin metoda cristalizării hidrotermale din izopropoxid de titan (IV) (TTIP), producând o fază cristalină pură de anatază cu o mărime medie a cristalitelor de 9,2 nm. Al doilea a fost o probă de referință, Evonik Aeroxide P25 comercial, cu dimensiuni medii ale cristalitelor de 24 nm (anatază) și 36 nm (rutil).

Pentru prepararea compozitelor de TiO_2 - Fe_3O_4 , la soluția de sinteză a nanoparticulei de oxid de fier IONP_0,8_75 s-a adăugat fie TiO_2 comercial, fie

TiO₂ anatază. Concentrația de FeCl₂·4H₂O a fost ajustată la 0,05 M, iar amestecul a fost preparat pentru a obține un conținut de 10 m/m% IONP în compozitul final. Procesul a reflectat metoda de sinteză IONP, asigurând consecvența proprietăților materialului.

4.3. Metoda de prelucrare a mineralelor de rutil

Materia primă a mineralului de rutil natural provine din Brazilia. Excesul de materiale însoțitoare, în special Fe₂O₃, au fost eliminate prin tratare cu soluție apoasă de acid oxalic cu o concentrație de 0,1 M. Ulterior rutilul purificat a fost măcinat până la o dimensiune a particulelor mai mică de 106 μm cu ajutorul unei mori planetare cu bile Retsch (probă denumită R@000) și prelucrat ulterior prin nano măcinare într-o moară cu mediu agitat Netzsch MiniCer care funcționează în mod continuu în circuit închis. Probele au fost măcinate pentru intervale de timp variabile (30, 60, 150, 180, 240 și 300 de minute) și denumite corespunzător (de exemplu, R@030).

4.4. Instrumentație aplicată pentru caracterizarea materialelor

Microscopie electronică de baleiaj și transmisie (SEM și TEM)

Dimensiunea particulelor, morfologia și microstructura nanomaterialelor preparate și a mineralelor prelucrate au fost analizate utilizând un microscop electronic de baleiaj cu emisie în câmp la rece, Hitachi S-4700 Type II, care a funcționat la o tensiune de accelerare de 10 kV pentru a înregistra imaginile SEM.

Imaginile de microscopie electronică de transmisie (TEM) au fost înregistrate cu un echipament FEI Tecnai G2 20 X-TWIN care funcționează la

o tensiune de accelerare de 200 kV pentru a analiza morfologia, dimensiunea și rețeaua cristalină a nano rutilului.

Difracția cu raze X (XRD)

Identificarea fazei cristaline și a valorilor medii ale dimensiunii cristalitelor au fost obținute prin analiza de difracție de raze X, utilizând două echipamente diferite. Un difractometru Rigaku MiniFlex II echipat cu un monocromator de grafit care funcționează cu radiație Cu-K α ($\lambda = 0,15406$ nm, 30 kV, 15 mA) și un difractometru Shimadzu XRD 6000 cu un monocromator de grafit care funcționează cu radiație CuK α ($\lambda = 1,54$ Å, 40 kV, 30 mA) și filtru Ni. Intervalul de măsurare a fost dependent de probă, iar viteza de scanare a fost de 1 sau 2 (20°) min $^{-1}$. Valorile medii ale dimensiunii cristalelor primare au fost determinate utilizând ecuația Scherrer [10].

Spectroscopia Raman

Structura cristalină a probei a fost determinată prin spectroscopie Raman, utilizând două echipamente diferite. Un microscop Raman confocal Thermo Scientific DXR echipat cu un laser Nd:YAG cu frecvență dublată cu pompă cu diodă. Pentru achiziția spectrelor Raman, a fost utilizat un spot de aproximativ 1 μ m, o putere laser de 8 mW (8% din intensitatea maximă), laser de 532 nm și obiectiv 10 $\times$. Rezoluția spectrelor a fost de 2 cm $^{-1}$, în timp ce deschiderea confocală pinhole utilizată pentru fiecare măsurătoare a fost de 25 μ m. Al doilea instrument a fost un spectrometru Reflex Raman confocal multilaser Renishaw inVia echipat cu un detector CCD RenCam. Laserul de 532 nm a fost utilizat ca sursă de excitare, în timp ce spectrele au fost înregistrate folosind o mărire de 100 $\times$ și obiectivul de 0,9NA. Timpul de

achiziție a fost de 30 s, grila de 1800 linii/mm pentru toate spectrele și puterea laserului de 20 mW (10% din intensitatea maximă a laserului). Rezoluția spectrală a fost de 4 cm^{-1} .

Fluorescență cu raze X (XRF)

Conținutul de elemente însoțitoare a mineralelor de rutil a fost investigat cu ajutorul unui spectrometru fluorescent Horiba Jobin Yvon XGT-5000 echipat cu o sursă de raze X Rh. Măsurătorile au fost efectuate la o tensiune de excitație de 30 kV, un curent anodic de 0,5 mA și o durată de colectare a datelor de 1000 s.

Spectroscopia fotoelectronică cu raze X (XPS)

Spectrele XPS ale probelor au fost înregistrate în modul FAT, utilizând un instrument SPECS prevăzut cu un analizor de energie electronică emisferic PHOIBOS 150 MCD 9. Sistemul a utilizat o sursă monocromatică Al-K ($1486,6\text{ eV}$), operată la 14 kV și 20 mA. Probele au fost fixate pe bandă adezivă de carbon cu două fețe și așezate cu grijă pentru a asigura acoperirea completă de către particulele de probă. Sursa de raze X a funcționat la o putere de 200 W, iar presiunea din camera de analiză a fost menținută între 10^{-9} și 10^{-10} mbar. Scala energiei de legare a fost calibrată la vârful C1s de $284,6\text{ eV}$. Spectrele de înaltă rezoluție pentru toate elementele detectate au fost obținute cu o energie de trecere a analizorului de 20 eV, utilizând pași de 0,05 eV pentru probele analizate. Analiza datelor a fost efectuată utilizând software-ul Casa XPS, cu deconvoluția tuturor vârfulor prin aplicarea unui fundal Shirley și a formelor de linie Lorentzian-Gaussian, unde raportul Gaussian-Lorentzian a fost setat la 30.

Spectroscopia de reflexie difuză (UV-Vis DRS)

Spectrele de reflexie difuză (DR) ale probelor au fost înregistrate în intervalul spectral $\lambda=250-800$ nm (cu ajutorul software-ului SpectraManager) utilizând un spectrofotometru JASCO-V650 cu rețea de diode controlat de calculator, care a fost echipat cu o sferă de integrare ILV-724. Valorile intervalului de bandă benzilor de energie interzise au fost estimate folosind funcția Kubelka-Munk [11].

Măsurarea suprafeței specifice

Suprafața specifică a probelor minerale de rutil a fost determinată prin adsorbția azotului la 77 K, utilizând un dispozitiv BELCAT-A. Suprafața specifică a fost calculată utilizând tehnica Brunauer, Emmett și Teller (BET).

Magnetometria prin vibrații (VSM)

Măsurătorile magnetice au fost efectuate utilizând un magnetometru cu probă vibrantă, 12 T VSM de la Cryogenic Limited London, la 300 K și câmpuri magnetice externe de până la 5 T. Pulberile preparate au fost sigilate în rășină epoxidică pentru măsurători. Magnetizările de saturație (M_s) au fost determinate din izotermele de magnetizare [12].

4.5. Evaluarea proprietăților fotocatalitice

Pentru evaluarea proprietăților fotocatalitice, au fost preparate diverse soluții de poluanți organici cu un conținut al fotocatalizatorului de $1 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (*Tabel 1.*). În cazul iradierii cu radiație UV-A, a fost utilizat un reactor din sticlă Pyrex cu o manta de răcire ($25,0^\circ\text{C}$), iradiat de șase lămpi fluorescente

(Vilber-Lourmat T-6L UV-A, cu o putere de 6 W, emisie maximă la 365 nm). Fotoreactorul utilizat pentru experimentele cu lumină vizibilă a fost un tub de sticlă deschis cu pereți dubli, echipat cu o lampă metalohalogenică OSRAM (Osram Sylvania Inc., Wilmington, MA, SUA; tip Power Star HCL-TC 75W/WDL) și înconjurat de o manta termostatăă (25,0 °C), conținând o soluție apoasă de NaNO₂ (1 M, min. 99,13%) care absoarbe fotonii UV ($\lambda < 400$ nm). În ambele cazuri, concentrația de oxigen dizolvat a fost menținută constantă prin barbotarea aerului prin reactor. Cantități de 1,5 ml au fost luate la anumite momente, iar modificarea concentrației a fost urmărită cu un spectrofotometru UV-Vis (Jasco-V650) sau cu un cromatograf de lichide de înaltă performanță (Hitachi D-7000 HPLC). Înainte de testele de eliminare fotocatalitică, s-au efectuat teste de stabilitate și teste de adsorbție în întuneric pentru intervale de timp specifice.

Tabel 1. Detalii privind evaluarea fotocatalitică

Poluanți model testați	Concentrația inițială a soluției	Tipul de iradiere	Fotocatalizator aplicat
(R)-(-)-mellein	10 mM	UV-A	P25
Paracetamol	0,1 mM	UV-A	TH, P25, TH/IONP, P25/IONP
Fenol	0,1 mM	UV-A, Vis	probele R@
Ibuprofen	0,1 mM	UV-A, Vis	R@030, R@180, R@300

5. Rezultate și discuții

5.1. Investigarea ecotoxicității și descompunerea fotocatalitică a unui feromon specific de către Evonik AEROXIDE P25 TiO₂.

5.1.1. Investigarea ecotoxicității TiO₂ cu privire la comportamentul de hrănire al furnicii *Lasius niger*.

Studiile de ecotoxicitate ale TiO₂ în ceea ce privește comunicarea furnicilor au constatat într-un control negativ și pozitiv și în studii comparative. În cadrul controlului negativ, în care ambele ramuri ale podului de testare au fost tratate cu apă distilată, furnicile nu au arătat nicio preferință inițială, dar ulterior au favorizat o parte. Această preferință a fost explicată prin acumularea de feromoni pe ramura respectivă, care rezultă din comportamentul natural al furnicilor în timpul recrutării în masă. În schimb, controlul pozitiv, în care ambele ramuri au fost tratate cu o suspensie de TiO₂, nu a arătat nicio preferință semnificativă, ceea ce susține ipoteza că TiO₂ degradează feromonii de urmărire și perturbă strângerea în masă. Atunci când au avut de ales între două trasee care duceau la o sursă de hrană, una tratată cu apă și una tratată cu o suspensie de TiO₂, furnicile au preferat în mod clar opțiunea tratată cu apă. Deoarece diferențele semnificative din punct de vedere statistic au apărut abia după al treilea minut de iradiere, constatările indicând degradarea feromonilor de urmărire pe calea tratată cu TiO₂ sub iradiere UV-A, mai degrabă decât o perturbare fizică.

5.1.2. Evaluarea degradării fotocatalitice a unui compus organic prezent în feromoni de către TiO_2 .

Pentru a obține informații suplimentare cu privire la relația dintre TiO_2 și urma de feromoni, s-a efectuat un experiment de degradare fotocatalitică folosind P25 TiO_2 sub lumină UV-A pentru a elimina o componentă a feromonilor de urmărire dintr-o soluție apoasă. Compusul selectat, (R)-(-)-3,4-dihidro-8-hidroxi-3-metilisocoumarina ((R)-(-)-mellein), este feromona de urmărire a speciei de furnici *Formica rufa* și prezintă asemănări structurale cu feromona *Lasius niger* ((R)-3,4-dihidro-8-hidroxi-3,5,7-trimetilisocoumarina), având însă disponibilitate comercială, spre deosebire de aceasta din urmă. TiO_2 Evonik Aeroxide P25 a eliminat 62 % din melleină din soluție în timpul unui test fotocatalitic de 120 de minute (**Figura 3.**).

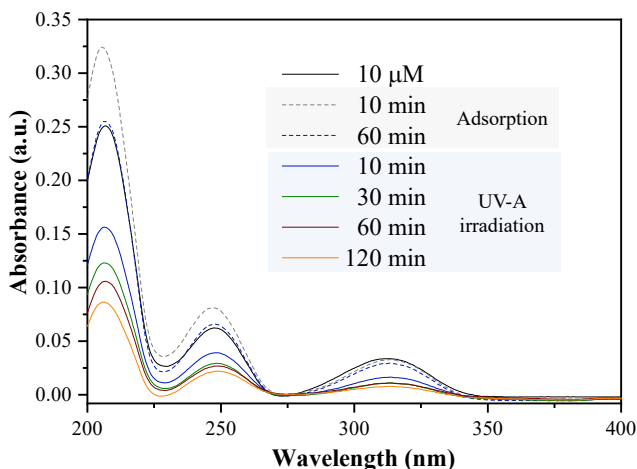


Figura 3. Spectre de absorbție UV-Vis arătând adsorbția și degradarea fotocatalitică a melleinei în prezența P25 TiO_2 .

Testul de stabilitate de 24 de ore la temperatura camerei și testul de stabilitate de 120 de minute la UV-A al melleinei, precum și testul de adsorbție de 60 de minute cu P25, au confirmat fiabilitatea rezultatelor fotocatalitice.

Un proces de degradare fotocatalitică necesită două condiții esențiale: mediu apos, furnizat de precipitații sau de apele subterane din natură, și suficientă iradiere UV-A, care, pe parcursul unei zile de vară în Europa, poate acumula suficientă energie pentru a activa TiO_2 și a declanșa reacții fotocatalitice [13]. În lumina rezultatelor de mai sus, este plauzibil ca prezența nedorită a TiO_2 sintetic în natură să poată declanșa oxidarea fotocatalitică a compușilor organici din feromonii de urmărire. Având în vedere diferitele contribuții semnificative ale furnicilor la mediul înconjurător, chiar și perturbațiile minore ale comunicării lor chimice au potențialul de a influența procese de mediu mai ample.

5.2. Investigații privind sistemele fotocatalitice pe bază de TiO_2 și Fe_3O_4 .

5.2.1. Prepararea compozitelor de TiO_2 - Fe_3O_4 separabile magnetic.

Prepararea cu succes a compozitelor P25/IONP și TH/IONP a fost confirmată de prezența reflexiilor caracteristice ale ambelor componente (TiO_2 și IONP) în difractograme. Proba de Fe_3O_4 pur a prezentat un magnetism puternic fără saturație completă la 5 T (54,2 emu/g), în timp ce compozitele s-au saturat în jurul valorii de 0,8 T cu o magnetizare mult mai scăzută datorită diluării (7,5 și 4,2 emu/g). Chiar dacă toate probele prezintă proprietăți ferimagnetice slabe și o suprapunere de proprietăți superparamagnetice cu

coercitivitate și remanență scăzute, acestea sunt încă adecvate pentru utilizarea în separarea magnetică.

5.2.2. Evaluarea eficienței fotocatalitice a compozitelor magnetice de TiO_2 pentru eliminarea paracetamolului sub iradiere UV.

Atât P25 comercial, cât și proba de TiO_2 anatază (TH) au eliminat eficient paracetamolul, atingând valori de 100% și, respectiv, 95,62% (**Figura 4.**). Cu toate acestea, atunci când au fost încorporate în compozite cu nanoparticule de IONP, eficiența ambelor materiale a scăzut (**Figura 4.**). Ecranarea parțială a site-urilor active ale TiO_2 de către Fe_3O_4 sau conținutul limitat de fotocatalizator rezultat din încărcarea cu Fe_3O_4 de 10 m/m % în greutate au contribuit probabil la eficiența redusă.

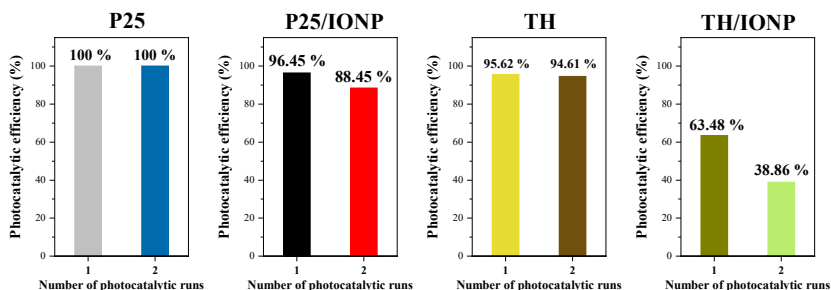


Figura 4. Eficiența fotocatalitică a probelor de TiO_2 și a compozitelor magnetice în eliminarea paracetamolului sub iradiere UV.

5.2.3. Evaluarea separabilității și reutilizării compozitelor magnetice.

După primul ciclu fotocatalitic, fotocatalizatorii magnetici au fost colectați, uscați și reutilizați pentru un al doilea test. În timpul testului de reutilizare, proba P25 goală nu a prezentat nicio modificare a eficienței, în

schimb, compozitul său, P25/IONP arăta o activitate ușor scăzută (*Figura 4.*). Eficiența probei de antază TH a rămas surprinzător de ridicată în a doua încercare (*Figura 4.*). Acest rezultat a fost atribuit intermediarilor de degradare rămași pe suprafața fotocatalizatorului după primul ciclu de degradare, care i-au conferit hidrofilicitatea suprafeței și proprietățile de adsorbție, îmbunătățindu-i astfel indirect eficiența fotocatalitică în al doilea ciclu. Observația a fost confirmată de apariția compușilor intermediari în cromatogramele probelor din faza de adsorbție. Compozitul TH/IONP a înregistrat o scădere semnificativă a eficienței, de la 63,5% la 38,9%, indicând necesitatea unor investigații structurale și compoziționale suplimentare pentru a înțelege influența oxidului de fier asupra performanței.

5.2.4. Investigarea corelațiilor dintre proprietățile structurale, optice și de suprafață, eficiența fotocatalitică și capacitatea de reutilizare.

Urmând testele fotocatalitice și de reciclare, nu au fost observate modificări în structura cristalină a probelor în formă de bulk. Cu toate acestea, spectrele XPS al Fe2p au evidențiat doar Fe^{3+} pe suprafața TH/IONP după reciclare, indicând oxidarea Fe_3O_4 la Fe_2O_3 . În schimb, în compozitul P25/IONP, magnetita a rămas stabilă chimic. Diferențele observate în randamentele fotocatalitice au fost explicate prin mecanisme diferite de transfer de sarcină în compozitele pe bază de P25 și în cele pe bază de anatază. În P25/IONP, valorile apropiate ale benzilor permise ale fazelor de anatază și rutil face posibilă separarea eficientă a sarcinilor, protejând magnetita de oxidare și menținând astfel stabilitatea compozitului. În schimb, TH anatază pură nu dispune de această sinergie, ceea ce duce la utilizarea directă a purtătorilor sale de sarcini fotogenerați și la oxidarea treptată a Fe^{2+} la Fe^{3+} ,

formând în cele din urmă Fe_2O_3 inactiv și inhibând formarea radicalilor hidroxil, ducând la o eficiență fotocatalitică redusă.

5.3. Investigarea mineralului rutil ca fotocatalizator activ sub acțiunea luminii vizibile, obținut prin nano măcinare [9].

5.3.1. Explorarea unei metode de prelucrare a mineralelor de rutil pentru utilizarea lor în fotocataliza activată de lumina vizibilă.

În urma procesului de măcinare, au fost obținute șapte probe de nano minerale de TiO_2 , cu faza cristalină de rutil pură (**Figura 5a.**), cu o scădere a mărimii medii a cristalitelor de la 132 nm la 20,1 nm pe măsură ce timpul de măcinare a crescut de la 0 la 300 de minute.

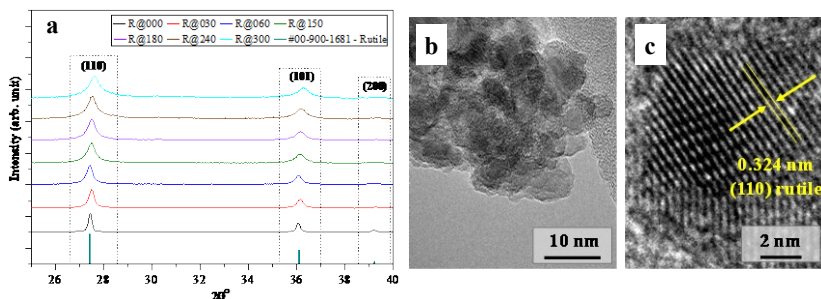


Figura 5. a. Difractogramele de raze X ale probelor de rutil măcinate la diferite intervale de timp. **b.** Imagine TEM ale rutilului natural măcinat (R@300) **c.** Distanța interplanară a (110) de rutil identificabilă pe baza imaginilor TEM.

Analizele SEM și TEM (**Figura 5b.**) au arătat o reducere progresivă a mărimii particulelor și o creștere a omogenității: în proba prelucrată pentru

cel mai lung timp (R@300) până la 94% din particule ating mărimea $\leq 0,5 \mu\text{m}$ (**Figura 6.**).

În ciuda măcinării extensive, materialul și-a păstrat cristalinitatea, după cum confirmă spectroscopia Raman și prezența planelor cristaline observate în imaginile TEM (**Figura 5c.**). Rezultatele evidențiază eficiența procesului de măcinare în producerea de particule de rutil la scară nanometrică fără a le altera integritatea structurală.

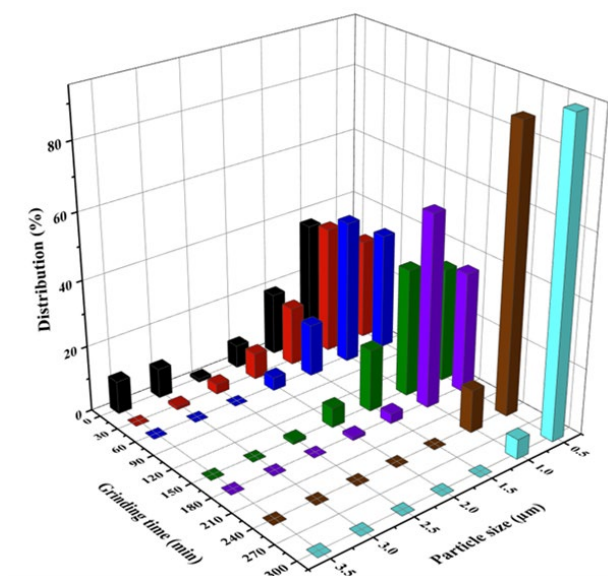


Figura 6. Histograma distribuției dimensionale a particulelor de rutil natural măcinat estimată din micrografile SEM.

5.3.2. Investigarea proprietăților structurale, optice și de suprafață ale mineralelor prelucrate.

Probele de rutil măcinat au prezentat benzi interzise mai înguste (2,4-2,8 eV) decât cele raportate în literatura de specialitate pentru rutilul sintetic (3,0 eV), în principal datorită prezenței dopanților naturali precum Nb, Nd, Zr și W, care conduc la absorbție în lumina vizibilă. Cu creșterea timpului de măcinare s-a observat o lărgire treptată a benzii interzise, posibil datorită prezenței a două fenomene: efectul dimensiunii nanoparticulelor nou formate (< 10 nm, confirmat prin TEM) și pierderea lentă a dopanților în timpul măcinării. În același timp, valorile energiei Urbach au scăzut de la 386 la 285 meV, sugerând mai puține impurități și o ordine structurală îmbunătățită în ciuda prelucrării mecanice, confirmând teoria pierderii elementelor însoțitoare. Analiza XPS a evidențiat prezența speciilor Ti^{3+} de suprafață, prezente în mod natural în rutil în cazul de față, ceea ce a condus la creșterea activității fotocatalitice prin promovarea generării radicalilor $\bullet OH$.

5.3.3. Evaluarea performanței fotocatalitice a rutilului natural în eliminarea fenolului și ibuprofenului sub iradiere cu lumină Vis. & Stabilirea corelațiilor dintre proprietățile structurale, optice și de suprafață a materialelor și activitatea fotocatalitică.

Rezultatele testelor fotocatalitice sub lumină vizibilă arată rezultate remarcabile: proba R@180 a atins o rată de degradare de 33% în cazul fenolului (*Figura 7.*), prezența intermediarilor de degradare fiind confirmată prin măsurători HPLC. Suprafața specifică a probelor a crescut odată cu timpul de măcinare, dar activitatea normalizată pe suprafață a scăzut, sugerând un compromis între suprafața și conținutul de dopant pierdut în timpul măcinării.

Frecvența mai mare a particulelor de 0,5-1 μm în probe (de exemplu, R@180) a arătat o corelare cu performanța fotocatalitică îmbunătățită în cazul eliminării fenolului. În cazul testelor de degradare a ibuprofenului, toate probele selectate au arătat activitate sub iradiere cu lumina vizibilă, R@300 atingând cea mai mare rată de degradare (32,6%), corelată cu tendința de îmbunătățire a activității odată cu reducerea dimensiunii particulelor.

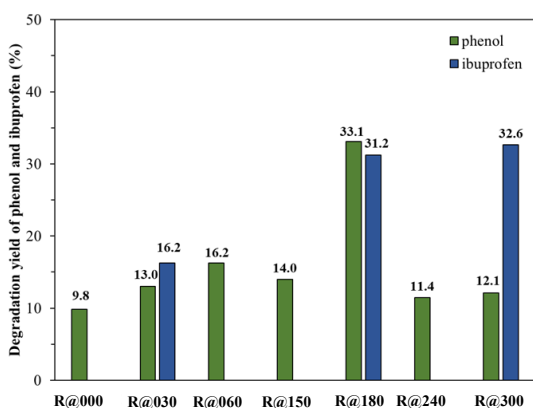


Figura 7. Performanța fotocatalitică a probelor de rutil nano-măcinate sub acțiunea luminii vizibile

5.3.4. Analiza raportului cost-beneficiu între mineralul rutil natural și TiO_2 comercial Evonik Aeroxide P25 în aplicații de fotocataliză eterogenă.

Producția de fotocatalizatori de rutil natural prin nano măcinare umedă a fost comparată cu sinteza produsului comercial Evonik Aeroxide P25, despre care se știe că este fabricat printr-un proces de hidroliză cu flacără.

Această comparație, realizată la scară de laborator, a luat în considerare nu numai costurile de producție - 9,93 €/kg pentru rutilul natural față de 265 €/kg pentru P25 sintetic - ci și impactul asupra mediului, produsele secundare și eficiența fotocatalitică. În timp ce TiO_2 sintetic a demonstrat o performanță puternică, probele de rutil natural, în special R@180 și R@300, au prezentat o activitate fotocatalitică promițătoare în lumină vizibilă, cu un cost de producție semnificativ mai scăzut normalizat la degradarea fenolului (6,6 €/mmol fenol degradat/h față de 25 €/mmol fenol degradat/h pentru P25). Rezultatele analizei evidențiază necesitatea unui compromis între performanță și sustenabilitate pe termen lung.

6. Concluzii

După cum s-a propus în obiectivele tezei, au fost investigate trei aspecte ale fotocatalizatorilor TiO_2 : ecotoxicitatea acestora, separabilitatea și reutilizarea lor în cazul încorporării în compozite magnetice și potențialul fotocatalitic al mineralelor naturale de TiO_2 . Deși interdisciplinară, prezenta cercetare este unificată de obiectivul general al domeniului de cercetare de a dezvolta materiale fotocatalitice eficiente, dar sustenabile și prietenoase cu mediul înconjurător.

În prima parte a tezei, a fost investigată influența Evonik Aeroxide P25 TiO_2 asupra comunicării furnicilor *Lasius niger* în cadrul testelor de căutare de hrană în condiții de laborator și sub iradiere UV-A. Testele au evidențiat o preferință semnificativă din punct de vedere statistic pentru căile tratate cu apă față de cele tratate cu TiO_2 și au sugerat că TiO_2 a degradat fotocatalitic urmele de feromoni mai degrabă decât să deranjeze fizic furnicile. Testele suplimentare de eliminare fotocatalitică a componentei feromonale

mellein au confirmat că TiO_2 poate oxida feromonii, evidențiind impactul potențial indirect, pe termen lung, al materialului asupra proceselor din mediul înconjurător.

A doua parte a tezei a investigat separarea magnetică ca metodă promițătoare de recuperare a fotocatalizatorilor și de prevenirea eliberării lor în mediu. Doi fotocatalizatori sintetici TiO_2 - o probă sintetică de anatază și P25 comercial - au fost introduși în compozite cu magnetită (Fe_3O_4) și testați pentru eliminarea fotocatalitică a paracetamolului sub iradiere UV-A. În timp ce compozitele de $\text{P25-Fe}_3\text{O}_4$ și-au păstrat activitatea și reciclabilitatea relativ ridicate, compozitele pe bază de anatază au suferit o pierdere semnificativă a eficienței și oxidarea parțială a Fe_3O_4 în Fe_2O_3 . Această deteriorare a fost atribuită dinamicii mai puțin favorabile a purtătorilor de sarcini în compozit, comparativ cu probele pe bază de P25, în care este prezentă o sinergie a fazelor cristaline anatază și rutil, facilitând separarea sarcinilor. Aceste observații au subliniat importanța structurii cristaline a TiO_2 în menținerea stabilității compozitului.

În ultima cercetare a tezei, mineralul natural de TiO_2 , rutilul, a fost prelucrat prin nano măcinare și aplicat pentru eliminarea fotocatalitică a fenolului și ibuprofenului. În ciuda aplicării doar a metodelor de procesare fizică și a lipsei ajustării sintetice a proprietăților materialului, probele de nano rutil au prezentat rezultate remarcabile sub iradiere cu lumină vizibilă. Proprietățile fotocatalitice au fost corelate cu dimensiunea particulelor, cu proprietățile de suprafață și cu prezența dopanților naturali (de exemplu, Nb, Nd și Zr), care au redus intervalul de bandă și au îmbunătățit activarea la lumina vizibilă.

Teza se încheie cu o analiză cost-beneficiu, care compară producția sintetică de Evonik Aeroxide P25 și prelucrarea fizică a nano rutilului. Rezultatele subliniază nevoia de compromis dintre eficiența fotocatalitică ridicată și viabilitatea ecologică pe termen lung. Atât recuperarea magnetică, cât și fotocatalizatorii cu sursă de minerale naturale pot fi alternative bune pentru sustenabilitate și pentru atenuarea impactului TiO_2 asupra mediului. Cu toate acestea, identificarea soluției potrivite constă în găsirea unui echilibru - fiecare opțiune implică un anumit nivel de compromis.

7. Activitatea științifică

Lucrări legate de programul de doctorat publicate până la 25.07.2025

1. Saszet, K.; Almási, E.E.; Rácz, Á.; Bohács, K.; Todea, M.; Hernádi, K.; Pap, Z.; Baia, L.

“Visible Light Active Natural Rutile Photocatalyst Obtained via Nano Milling”

Molecules, 2025 <https://doi.org/10.3390/molecules30071600>

I.F.: 4.2 AIS:0.676

Citat: 0 (Google Scholar)

Alte lucrări

2. Tóth, Zs.; Feraru, A.; Saszet, K.; Veréb, G.; Vodnar, D. C.; Todea, M.; Timar-Gabor, A.; Dave, A. K.; Sand, D.; Dreanca, A.; Magyari, K.; Baia, L.

“Relation between shape-tailored CeO₂ nanoparticles morphology and hemocompatibility and antimicrobial effect”

Biomaterials Advances, 2025 <https://doi.org/10.1016/j.bioadv.2025.214229>

I.F.: 5.5

Citat: 0 (Google Scholar)

3. Bobu, E.; Saszet, K.; Tóth, Z.-R.; Páll, E.; Gyulavári, T.; Baia, L.; Magyari, K.; Baia, M.

“TiO₂-Alginate-Chitosan-Based Composites for Skin Tissue Engineering Applications”

Gels, 2024 <https://doi.org/10.3390/gels10060358>

I.F.: 5.0

Citat: 5 (Google Scholar)

4. Nikita Sharma, N.; **Saszet, K.**; Szabó, T.; Karajz, D.; Szilágyi, I. M.; Garg, S.; Pap, Zs.; Hernádi, K.

“Demonstration of effectiveness: Plant extracts in the tuning of BiOX photocatalysts' activity”

Catalysis Today, 2023 <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2022.12.015>

I.F.: 5.2

Citat: 7 (Google Scholar)

5. Cadiş, A. I.; Mureşan, L. E.; Perhaiţa, I.; Pop, L. C.; **Saszet, K.**; Barbu-Tudoran, L.; Borodi, G;

“Peculiarities on methyl orange adsorption by porous ZnIn₂S₄ prepared in different conditions”

Journal of Nanoparticle Research, 2022 <https://doi.org/10.1007/s11051-022-05458-8>

I.F.: 2.5

Citat: 5 (Google Scholar)

6. Stingescu, L.; Cadar, C.; Cotet, L.C.; Baia, L.; **Saszet, K.**; Magyari, K.; Mihis, A. G.; Fort, C.I.; Stroe, M.; Matei, E.; Nila, A.; Anghel, I.; Baia, M.; Baibarac, M.; Danciu, V.;

“Morphological and structural investigation of the poly (vinyl chloride) / graphene oxide composites”

Studia UBB Chemia, 2020 <https://doi.org/10.24193/subbchem.2020.3.19>

I.F.: 0.447

Citat: 3 (Google Scholar)

Publicații anterioare studiilor de doctorat

7. Kása, Zs.; **Saszet, K.**, Dombi, A.; Hernádi, K.; Baia, L.; Magyari, K.; Pap, Zs.

"Thiourea and Triton X-100 as shape manipulating tools or more for Bi₂WO₆ photocatalysts?"

Materials Science in Semiconductor Processing, 2018

<https://doi.org/10.1016/j.mssp.2017.10.001>

I.F.: 2.722

Citat: 13 (Google Scholar)

8. Vajda, K; **Saszet, K.**; Kedves, Zs.; Kása, Zs.; Danciu, V.; Baia, L.; Magyari, K.; Hernádi, K.; Kovács, G.; Pap, Zs.

"Shape-controlled agglomeration of TiO₂ nanoparticles. New insights on polycrystallinity vs. single crystals in photocatalysis"

Ceramics International, 2016

<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2015.10.095>

I.F.: 2.986

Citat: 38 (Google Scholar)

9. Baia, L.; Orbán, E.; Fodor, Sz.; Hampel, B.; Kedves, E. Zs.; **Saszet, K.**; Székely, I.; Karácsonyi, É.; Réti, B.; Berki, P.; Vulpoi, A.; Magyari, K.; Csavdári, A.; Bolla, Cs; Coșoveanu, V.; Hernádi, K.; Baia, M.; Dombi, A.; Danciu, V.; Kovács, G.; Pap, Zs.

"Preparation of TiO₂/WO₃ composite photocatalysts by the adjustment of the semiconductors' surface charge"

Materials Science in Semiconductor Processing, 2016

<https://doi.org/10.1016/j.mssp.2015.08.042>

I.F.: 2.359

Citat: 48 (Google Scholar)

Publicații non-ISI

1. Almási, E.; Pap, Zs.; **Saszet, K.**; Gyulavári, T.; Rácz, Á.; Mucsi, G.; Halyag, N.; Rákhely, G. “*Fine structural features of ilmenite achieved by wet milling and its potential in the degradation of pollutants in wastewater*”, Geosciences and Engineering (HU ISSN 2063-6997), Vol. 8, No. 12 (2020), pp. 251–263.

2. Almási, E.; Pap, Zs.; **Saszet, K.**; Rácz, Á.; Mucsi, G.; Halyag, N.; Rákhely, G. “*Structure stability and properties of nano milled cuprite and its applicability in wastewater treatment*”, Geosciences and Engineering (HU ISSN 2063-6997), Vol. 8, No. 12 (2020), pp. 238–250.

Participări la conferințe

Conferințe legate de doctorat

1. **Kata Saszet**, Zsolt Pap, Lucian Baia, Klára Hernádi “*Comparison of different FeTiO_3 containing systems based on their structural and possible photocatalytic properties*”, 6th European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes (EAAOP-6), 26-30 June 2019, Portoroz, Slovenia - *poster presentation*

2. **Kata Saszet**, Eszter Mátyás, Zsolt Czekes, Enikő- Eszter Almási, Zsolt Pap “*Comparative study on the toxic effect of synthetic nano-ilmenite and natural ilmenite mineral on *Formica pratensis**”, 8th Central European

Workshop of Myrmecology, 27-30 September 2019, Regensburg, Germany -
poster presentation

3. **Kata Saszet**, Zsolt Pap, Zsolt Czekes, Enikő-Eszter Almási, Lucian Baia “*Structural and Toxicity Studies of Synthetic and Mineral Origin Iron (II) Titanate*”, 25th International Conference on Chemistry, 24–26 October 2019, Cluj-Napoca, Romania - *oral presentation*

4. **Kata Saszet**, Enikő-Eszter Almási, Zsolt Pap, Lucian Baia “*Cuprite minerals – investigation of material properties and possible applications in chemistry*”, XXVIth International Conference on Chemistry, 30 October 2020, virtual conference – *oral presentation*

5. Simona Halmagyi, Lucian Pop, **Kata Saszet** “*Synthesis, optimization and characterization of iron oxide nanoparticles obtained by co-precipitation method*”, 9th European Young Engineers Conference, 19-21 April 2021, virtual conference – *oral presentation*

6. **Kata Saszet**, Zsolt Czekes, Lucian Baia, Enikő-Eszter Almási, Ádám Rácz, Gábor Rákhely, Klára Hernádi and Zsolt Pap “*Natural Photocatalyst: Real Alternatives to the Synthesized Ones?*”, The 5th International Conference on New Photocatalytic Materials for Environment, Energy and Sustainability (NPM-5), 24-27 May 2021, virtual conference - *oral presentation*

7. **Kata Saszet**, Enikő-Eszter Almási, Zsolt Pap, Klára Hernádi, Lucian Baia “*Cuprite minerals: material properties, changes due to processing and possible application in photocatalysis*”, European Materials Research Society (E-MRS) 2021 Spring Meeting, May 31 - June 3 2021, virtual conference – *poster presentation*

8. **Kata Saszet**, Darius Groza, Simona Halmagyi, Enikő-Eszter Almási, Zsolt Pap, Lucian Baia “*The influence of the source of magnetic particles on*

the photocatalytic properties of TiO₂/MP composites”, European Materials Research Society (E-MRS) 2021 Fall Meeting, 20-23 September 2021, virtual conference – *poster presentation*

9. **Kata Saszet**, Simona Halmagyi, Eszter Mátyás, Lucian Pop, Zsolt Czekes, Zsolt Pap, Lucian Baia “*TiO₂ P25/Fe₃O₄/ γ -Fe₂O₃ photocatalytically active nanocomposites and the ecotoxicological effects of TiO₂ P25 on the *Lasius niger* ant species*”, 12th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), 24-30 September 2021, Sant Feliu de Guixols, Spain - *oral presentation and **Augustin Mayor Prize for the best oral presentation delivered by a young scientist.***

10. **Kata Saszet**, Simona Halmagyi, Darius Groza, Enikő-Eszter Almási, Zsolt Pap, Lucian Baia “*Natural and synthetic components in TiO₂/magnetic NP composites and their photocatalytic applicability*”, 5th EuChemS Conference on Green and Sustainable Chemistry (5th EuGSC), 26-29 September 2021, virtual conference - *poster presentation*

11. **Kata Saszet**, Nikita Sharma, Zsolt Czekes, Zsolt Pap, Lucian Baia “*Photocatalytic Effect of Evonik Aeroxide P25 TiO₂ on the Trail Pheromones of Different Ant Species*”, 11th European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA11), 6-10 June 2022, Turin, Italy - *poster presentation*

Alte conferințe

12. Nikita Sharma, **Kata Saszet**, Zsolt Pap, Klára Hernádi “*Use Of Plant Extracts to Enhance the Photocatalytic Response of Bismuth Oxyhalides*”, 11th European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA11), 6-10 June 2022, Turin, Italy – *poster presentation*

13. Zsejke-Réka Tóth, Gabor Alida Timar, Alexandra Feraru, **Kata Saszet**, Dan C. Vondar, Milica Todea, Aditi Dave K., Alexandra Dreanca, Emilia Licarete, Gábor Veréb, Lucian Baia, Klára Magyar *“Effect of different shaped cerium oxide nanoparticles on wound healing”*, 30th International Conference on Chemistry, 23-26 October 2024, Cluj-Napoca, Romania – *oral presentation*

8. Bibliografie

- [1] X. Li, X. Shen, W. Jiang, Y. Xi, S. Li, Comprehensive review of emerging contaminants: Detection technologies, environmental impact, and management strategies, *Ecotoxicol Environ Saf* 278 (2024) 116420. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2024.116420>.
- [2] B. Ohtani, Photocatalysis by inorganic solid materials, in: 2011: pp. 395–430. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-385904-4.00001-9>.
- [3] A. Fujishima, K. Honda, Electrochemical Photolysis of Water at a Semiconductor Electrode, *Nature* 238 (1972) 37–38. <https://doi.org/10.1038/238037a0>.
- [4] J.A. Rengifo-Herrera, C. Pulgarin, Why five decades of massive research on heterogeneous photocatalysis, especially on TiO₂, has not yet driven to water disinfection and detoxification applications? Critical review of drawbacks and challenges, *Chemical Engineering Journal* 477 (2023) 146875. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.146875>.
- [5] T.Y. Sun, N.A. Bornhöft, K. Hungerbühler, B. Nowack, Dynamic Probabilistic Modeling of Environmental Emissions of Engineered Nanomaterials, *Environ Sci Technol* 50 (2016) 4701–4711. <https://doi.org/10.1021/acs.est.5b05828>.
- [6] T. Ayorinde, C.M. Sayes, An updated review of industrially relevant titanium dioxide and its environmental health effects, *Journal of Hazardous Materials Letters* 4 (2023) 100085. <https://doi.org/10.1016/j.hazl.2023.100085>.
- [7] J. López, A. Rey, E. Viñuelas-Zahinos, P.M. Álvarez, Preparation of a new green magnetic Fe₃O₄ @TiO₂-P25 photocatalyst for solar advanced oxidation processes in water, *J Environ Chem Eng* 11 (2023) 109999. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2023.109999>.
- [8] F. Heidarinejad, H. Kamani, A. Khtibi, Magnetic Fe-doped TiO₂@Fe₃O₄ for metronidazole degradation in aqueous solutions: Characteristics and efficacy assessment, *Heliyon* 9 (2023) e21414. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e21414>.
- [9] K. Saszet, E.E. Almási, Á. Rácz, K. Bohács, M. Todea, K. Hernádi, Z. Pap, L. Baia, Visible Light Active Natural Rutile Photocatalyst Obtained via Nano Milling, *Molecules* 30 (2025) 1600. <https://doi.org/10.3390/molecules30071600>.
- [10] Md. Sahadat Hossain, S. Ahmed, Easy and green synthesis of TiO₂ (Anatase and Rutile): Estimation of crystallite size using Scherrer equation, Williamson-Hall plot, Monshi-Scherrer Model, size-strain plot,

- Halder- Wagner Model, Results in Materials 20 (2023) 100492. <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2023.100492>.
- [11] S. Landi, I.R. Segundo, E. Freitas, M. Vasilevskiy, J. Carneiro, C.J. Tavares, Use and misuse of the Kubelka-Munk function to obtain the band gap energy from diffuse reflectance measurements, Solid State Commun 341 (2022) 114573. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114573>.
- [12] H. Zhang, D. Zeng, Z. Liu, The law of approach to saturation in ferromagnets originating from the magnetocrystalline anisotropy, J Magn Mater 322 (2010) 2375–2380. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2010.02.040>.
- [13] N. Proutsos, S. Alexandris, A. Liakatas, P. Nastos, I.X. Tsiros, PAR and UVA composition of global solar radiation at a high altitude Mediterranean forest site, Atmos Res 269 (2022) 106039. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2022.106039>.