

Die toksisiteit van kubusvormige anatase titaandioksied nanodeeltjies gebaseer op die pH van oplossings: 'n Gekombineerde studie met rekenaarmodellering, simulاسie en eksperimentele werk

SG (Shanaaz) Witbooi¹, S Cronjé¹, M Gulumian², V Wepener², RA Harris¹

¹Departement Fisika, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika

²Water Navorsingsgroep, Eenheid vir Omgewingswetenskap en -Bestuur, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Shanaaz Witbooi E-pos: shanaaz2811@gmail.com

The toxicity of cubic anatase titanium dioxide nanoparticles based on the solution pH: A combined study of computer modelling, simulation and experimental work: The toxicity of TiO₂ NPs were investigated, qualitatively and *in-silico*. This was done by considering the effect that simulated cuboidal TiO₂ NPs have on the production and/or release of free radicals when they are placed in acidic, basic and neutral substances. The qualitative simulation results were then verified with experimentally obtained data.

Een van die belangrikste nanodeeltjies (NDs) is titaandioksied (TiO₂), want dit kom in oorvloed in die natuur voor en het baie verskillende toepassings (Bayda et al., 2019). Dié toepassings lei tot verskeie blootstellingsmetodes en daarom het studies oor die toksisiteit van TiO₂ NDs met betrekking tot sy verskillende eienskappe belangrik geword. Een klassifikasie van toksisiteit van NDs is gebaseer op die produksie van reaktiewe suurstofspesies (RSS), want dit kan skade aan selle en weefsels in die liggaam veroorsaak (Matteis et al., 2016).

Onbedekte, kommersiële beskikbare TiO₂ NDs is eksperimenteel ontleed met behulp van X-straaldiffraksie (XRD) en transmissie-elektronmikroskopie (TEM) om die TiO₂-kristalliniteit en vorm- en grootteverspreidings, onderskeidelike bevestig. Die eksperimenteel bepaalde verspreiding is dan rekenaarmatig gesimuleer met behulp van 'n Monte-Carlo, gesimuleerde uitgloeiskema. Verskillende konsentrasies van protone (H⁺) en hidroksiele (OH⁻) in 'n wateroplossing is ook gesimuleer, wat verskillende pH-waardes van 4–10 verteenwoordig. Dit is geadsorbeer op die kubusvormige anataseverspreiding om die verandering in pH as gevolg van die teenwoordigheid van hierdie NDs te bepaal. Die bindingsenergieë vir elke sisteem is deur middel van molekulêre dinamika met behulp van 'n universele kragveld bepaal. Hierdie modelle is geverifieer deur vergelyking met die kommersiële deeltjies se pH gebaseer op pH-toetsstrokies.

Die resultate toon dat geen verandering plaasgevind het vir die pH-waardes van 4, 5, 6 en 7 nie, wat aandui dat die H⁺ wat by die sisteem gevoeg is, in die sisteem gebly het na ND-blootstelling. Vir 'n pH van 8 was 'n 60% verandering waargeneem, wat aangedui het dat 60% van die OH⁻ wat by die sisteem gevoeg is, aan die NDs gebind het wat die oorblywende oplossing meer suur gemaak het. 'n Onstabiele bindingsenergie vir 'n pH-waarde van 8 is egter waargeneem.

Deur verder te kyk na wat gebeur tussen pH-waardes 7 en 8 is bepaal dat stabiele bindings by 'n pH van 7.2 met 'n 100%-verandering gevorm word. Dit het aangedui dat al die OH⁻ wat by die sisteem gevoeg was, aan die NDs gebind het. Die pH van die oorblywende oplossing was dus beïnvloed, want dit het al die OH⁻ verloor en was dus meer neutraal. Hierdie resultaat is deur die fisiese pH-toets bevestig.

Met rekenaarsimulasies is dit dus getoon dat die pH van 'n wateroplossing direk deur die teenwoordigheid van onbedekte, kubusvormige TiO₂ NDs beïnvloed word. Verder is bepaal dat bindingsenergie as 'n beskrywer gebruik kan word, want dit is hier gebruik om vas te stel eerstens of OH⁻ of H⁺ aan die NDs sal bind en tweedens hoe stabiel hierdie bindings sal wees. Hierdie navorsing het geslaag in die doel om berekeningsmodellering en simulاسies met fisiese eksperimentering te kombineer.

Bibliografie

Bayda, S., Adeel, M., Tuccinardi, T., Cordani, M., Rizzolio, F., 2019, The History of Nanoscience and Nanotechnology: From Chemical-Physical Applications to Nanomedicine, *Molecules* 25(1), 112. <https://doi.org/10.3390/molecules25010112>.

Matteis, V.D., Cascione, M., Brunetti, V., Toma, C.C., Rin, R., 2016, Toxicity assessment of anatase and rutile titanium dioxide nanoparticles: The role of degradation in different pH conditions and light exposure, *Toxicology in Vitro* 37, 201-210. <https://doi.org/10.1016/j.tiv.2016.09.010>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 30-31 Oktober 2024, Universiteit van die Vrystaat. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Dr Ernie Langner (Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat); Dr Wynand Nel (Departement Rekenaarwetenskap en Informatika, Universiteit van die Vrystaat) en Prof Liesl van As (Departement Dierkunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat).