



**CHEMIJA IR
GEOMOKSLAI**
Mokslinė konferencija

CHEMIJA IR GEOMOKSLAI

**II-OSIOS NACIONALINĖS CHEMIJOS IR
GEOMOKSLŲ KONFERENCIJOS TEZĖS**

**Konferencija skirta pažymėti
iškilių chemikų profesorių
Kazio Daukšo 120-ąsias ir
Vito Daukšo 90-ąsias
gimimo metines**

2025



Konferenciją remia

GRIDA

BIOEKSMA

multilab
INTERLUX GROUP

Organizacinis komitetas: prof. A. Kareiva, doc. Ž. Stankevičiūtė,
prof. E. Rimkus, doc. J. Gaidukevič, dr. G. Inkrataitė, prof. P. Šinkūnas

Konferencija vyko 2025 metų kovo 14 dieną VU Chemijos ir geomokslų
fakulteto Geomokslų institute (Čiurlionio g. 21, Vilnius)

Leidinį sudarė: E. Rimkus, J. Gaidukevič, G. Inkrataitė, Ž. Stankevičiūtė, P. Šinkūnas,
J. Kapilovaitė, L. Klimavičius, J. Januškevičius

eISSN: 3030-0312

© Vilniaus universitetas

Konferencijos programa

08:30 - 09:00 Dalyvių registracija.

I SESIJA

SESIJOS PIRMININKAS PROF. EGIDIJUS RIMKUS

- 09:00 - 09:10** Konferencijos atidarymas. Sveikina dekanas **prof. Aivaras Kareiva**
- 09:10 - 09:30** **Prof. Aivaras Kareiva** „Profesorius Kazys Daukšas“ (Vilniaus universitetas)
- 09:30 - 09:50** **Dr. Linas Labanauskas** „Profesorius Vitas Daukšas. Mokslininkas, Praktikas, Mokytojas“ (Fizinių ir technologijos mokslų centras)
- 09:50 - 10:10** **Prof. Arūnas Bukantis** „Klimato kaitos ypatumai Lietuvos urbanizuotose teritorijose“ (Vilniaus universitetas)
- 10:10 - 10:30** **Prof. Asta Kaušaitė-Minkštienė** „Biologiniai jutikliai: nuo analizinės chemijos iki klinikinės diagnostikos“ (Vilniaus universitetas)
- 10:30 - 11:10** Kavos pertrauka ir stendinių pranešimų sesija

II SESIJA

SESIJOS PIRMININKĖ PROF. ALDONA BEGANSKIENĖ

- 11:10 - 11:30** **Prof. Eglė Lastauskienė** „Kova ar adaptacija: mikroorganizmai antropogeninėje aplinkoje“ (Vilniaus universitetas)
- 11:30 - 11:50** **Prof. Petras Šinkūnas** „Gėlos ledynų ašaros kuriančios reljefo formas“ (Vilniaus universitetas)
- 11:50 - 12:10** **Prof. Raimundas Šiaučiūnas** „Nehidraulinių kalcio silikatų sintezė ir jų kietėjimas CO₂ aplinkoje“ (Kauno technologijos universitetas)
- 12:10 - 12:30** **Dr. Jūratė Kriaučiūnienė** „Ekstremalūs hidrologiniai reiškiniai praeityje ir ateityje“ (Lietuvos energetikos institutas)
- 12:30 - 12:50** **Prof. Rimantas Ramanauskas** „Elektrochemijos mokslo raida ir perspektyvos Lietuvoje“ (Fizinių ir technologijos mokslų centras)
- 12:50 - 14:20** Pietų pertrauka ir stendinių pranešimų sesija

III SESIJA

SESIJOS PIRMININKĖ DOC. ŽVILĖ STANKEVIČIŪTĖ

- 14:20 - 14:40** **Doc. Gražina Skridlaitė** „Fluidai, izotopai ir kitos Lietuvos kristalinių uolienu paslaptys“ (Gamtos tyrimų centras)
- 14:40 - 15:00** **Prof. Ričardas Makuška** „Paviršių dekoravimas polimerų nanosluoksniais“ (Vilniaus universitetas)
- 15:00 - 15:20** **Doc. Laurynas Jukna** „Nuotoliniai pelkių vandens lygio stebėjimai taikant palydovinius metodus“ (Vilniaus universitetas)
- 15:20 - 15:40** **Dr. Greta Inkrataitė** „Neorganiniai granato struktūros scintiliatoriai ir jų apibūdinimas“ (Vilniaus universitetas)
- 15:40 - 16:00** Apdovanojimai ir konferencijos uždarymas
- 16:00 - 18:00** Konferencijos rezultatų aptarimas

TURINYS

Pratarmė	9
ŽODINIAI PRANEŠIMAI	
Kareiva A. <i>Profesorius Kazys Daukšas</i>	11
Labanauskas L. <i>Profesorius Vitas Daukšas. Mokslininkas, Praktikas, Mokytojas</i>	12
Bukantis A., Ramanauskas E., Dringelis L., Kaveckis G., Jonkutė-Vilkė G., Klimavičius L. <i>Klimato kaitos ypatumai Lietuvos urbanizuotose teritorijose</i>	13
Kaušaitė-Minkštimienė A., Giniūnaitė A., Popov A., Ramanavičienė A. <i>Biologiniai jutikliai: nuo analizinės chemijos iki klinikinės diagnostikos</i>	14
Lastauskienė E., Kavoliūnas J., Armalytė J. <i>Kova ar adaptacija: mikroorganizmai antropogeninėje aplinkoje</i>	15
Šinkūnas P. <i>Gėlos ledynų ašaros kuriančios reljefo formos</i>	16
Šiaučiūnas R. <i>Nehidraulių kalcio silikatų sintezė ir jų kietėjimas CO₂ aplinkoje</i>	17
Kriauciūnienė J. <i>Ekstremalus hidrologiniai reiškiniai praeityje ir ateityje</i>	18
Ramanauskas R. <i>Elektrochemijos mokslo raida ir perspektyvos Lietuvoje</i>	19
Skridlaitė G., Šiliauskas L., Demina O. <i>Fluidai, izotopai ir kitos Lietuvos kristalinių uolienu paslaptys</i>	20
Makuška R. <i>Paviršių dekoravimas polimerų nanosluksniais</i>	21
Jukna L., Buslavičiūtė E., Janušaitė R. <i>Nuotoliniai pelkių vandens lygio stebėjimai taikant palydovinius metodus</i>	22
Inkrataitė G., Keil J. N., Jüstel T., Skaudžius R. <i>Neorganiniai granato struktūros scintiliatoriai ir jų apibūdinimas</i>	23
STENDINIAI PRANEŠIMAI	
1. Aliukonytė N., Šiaučiūnas R. <i>Accelerated carbonation of blended cement pastes</i>	25
2. Amber H., Vjunova K., Sukackienė Z., Vaičiūnienė J., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>Highly Active and Durable Non-Noble Metal-Based Catalysts for Electrocatalytic Hydrogen and Oxygen Production</i>	26
3. Aukštakojs R., Pauliukaitė R., Burakovaitė D., Gaidukevič J. <i>Phosphorus-Modified Reduced Graphene Oxide for Advanced Electrochemical Sensing Applications</i>	27
4. Baublytė M., Saladino M.L., Paradisi E., Leonelli C., Mortalo C., Skaudžius R. <i>Influence of Hydrothermal Synthesis Conditions on the Formation of Europium-Doped Gadolinium Phosphate Nanoparticles</i>	28
5. Bendžiūtė S., Žarkov A. <i>Radiochrominio bario chlorapatito sintezė lydytų druskų metodu</i>	29
6. Bernatavičiūtė I., Galinskaitė A., Gruškienė R., Sereikaitė J. <i>Betalainų ekstrakcijos iš burokėlių atliekų sąlygų optimizavimas</i>	30
7. Blazevic K, German N., Brasiunas B., Spundzevicius G., Kausaite-Minkstimiene A., Ramanaviciene A. <i>Application of Electrochemically Synthesized Gold Nanostructures in Glucose Biosensor Development</i>	31

8. Bubnelytė A., Vaitiekūnaitė D., Bružaitė I., Snitka V. <i>Identification endophytic microorganisms from cranberry and lingonberry fruits by surface-enhanced Raman spectroscopy</i>	32
9. Budžytė G. E., Linkaitė G., Žarkov A., Kareiva A., Grigoravičiūtė I. <i>Magnio vitlokito sintezės tirpinimo-nusodinimo metodu parametų optimizavimas</i>	33
10. Burbulytė A., Uogintė I. <i>Investigation of microplastic sorption behaviour under different environmental parameters using lignin-based nanomaterials</i>	34
11. Buslavičiūtė E., Jukna L. <i>Automated Satellite-Based Estimation of Greenhouse Gas Emission Site Types (GEST) in Peatland</i>	35
12. Černius D., Skruodienė M., Šarakovskis A., Pomjakushina E., Skaudžius R. <i>Growth of Yb:CALGO crystal by optical floating zone method</i>	36
13. Česnulevičiūtė A., Gruškienė R., Čeičytė J., Sereikaitė J. <i>Kapiliarinės elektroforezės panaudojimas nizino pernašos sistemų proteolitinio stabilumo tyrimui</i>	37
14. Dėnas N., Virbickas P., Valiūnienė A. <i>Cd²⁺ jonų koncentracijos nustatymas naudojant biologinį jutiklį, paremtą Berlyno mėlynuoju ir katalaze</i>	38
15. Dubauskas A., Pilipavičius J., Vilčiauskas L., Klimavičius V. <i>Development and investigation of in-situ NMR probe</i>	39
16. Dzvinika M., Misevičius M. <i>Lantanoidais legiruoto bario borato analizė</i>	40
17. Ežerskytė E., Butkienė G., Katelnikovas A., Klimkevičius V. <i>Aukštylįnvertė liuminescencija pasižyminčių nanodalelių kūrimas taikymui teranostikoje</i>	41
18. Gabriūnaitė I., Gruškienė R., Kavleiskaja T., Sereikaitė J. <i>β-karoteno-inulino-laktoferino dalelių sintezė</i>	42
19. Gailiūtė N., Šmilgelskas D., Sokol D. <i>Sluoksniuoti dvigubi hidroksidai: sintezės kinetikos tyrimas ir jų taikymas biomedicinoje</i>	43
20. Gedvilas A., Krupickaitė D. <i>Bendruomeniniai daržai kaip kasdienio urbanizmo apraška Plungės ir Grigiškių miestuose</i>	44
21. Giniūnaitė A., Ramanavičienė A., Kaušaitė-Minkštimienė A. <i>Paviršiaus plazmonų rezonanso imuninis jutiklis SARS-CoV-2 anti-RBD antikūnų nustatymui</i>	45
22. Griškonytė G., Žutautė I., Bukšnaitienė R., Brukštus A. <i>4-((2-benzimidazolil)tio) rezorcinolio sintezės būdų paieška</i>	46
23. Harnik A., Virkėtis R., Dapšys D., Ladika D., Merkininkaitė G., Šakirzanovas S., Malinauskas M. <i>Lazerinis spausdinimas YAG:Ce 3D mikrostruktūrų</i>	47
24. Jakubkienė V., Labalaukytė I., Schweipert M., Almes F. J. M., Tumkevičius S. <i>Pirimidino darinių su oksadiazolo ir oksatiadiazolo fragmentais sintezė ir HDAC slopinantis aktyvumas</i>	48
25. Janušauskaitė G., Misevičius M. <i>NaAlGeO₄ fosforų, legiruotų retųjų žemių jonais, liuminescencinės savybės</i>	49
26. Jasnauskas U. <i>Baltijos jūros leduotumo tyrimas</i>	50
27. Jonkus G., Levinas R., Tsyntsaru N., Cesiulis H. <i>Insights of electrochemical synthesis of copper hydr(oxides)</i>	51
28. Jonušienė S., Jonušis M., Sokol D. <i>Synthesis of potential proliferating cell nuclear antigen inhibitors</i>	52
29. Juršėnė E., Michailova L., Jureviciute S., Grigoraviciute I., Kareiva A. <i>Utilization of Waste Phosphogypsum in Bioceramic Material Development</i>	53

30. Juščenko V., Venskevičiūtė I., Kavleiskaja T. <i>Encapsulation of β-carotene by chitosan of varying molecular weights</i>	54
31. Kairytė F., Žutautė I. <i>Etilo 2-(2-(-7H-imidazo[2,1-b][1,3]tiazin-5-il)fenoksi)acetato sintezė ir modifikavimas</i>	55
32. Karčiauskaite J., Elsheikh M., Fang H. W., Mortimer M., Stankeviciute Z., Kareiva A. <i>Development of hydroxyapatite composite with clove oil for antibacterial activity</i>	56
33. Karlonas N. <i>Chemical derivatization for the analysis of sedative-hypnotic drugs by gas chromatography-mass spectrometry</i>	57
34. Kaspute G., Prentice U. <i>Sensing geraniol in essential oils using molecular imprinting techniques</i>	58
35. Kazlauskas M., Šinkūnas P. <i>Glacial meltwater dynamics of the last glaciation in southeastern Lithuania</i>	59
36. Kybartienė N., Matutytė N. <i>Kavos tirščių kiekio įtaka statybinio gipso savybėms</i>	60
37. Kleinauskas R., Eisinas A. <i>Amorfinio titano dioksido priedo įtaka mažabazių kalcio hidrosilikatų ($\text{CaO/SiO}_2 = 0,66$) susidarymui bei jų savybėms</i>	61
38. Klimavičius L., Rimkus E., Stankūnavičius G. <i>Kompleksinių kritulių kiekio ir vėjo greičio ekstremumų susidarymas ir pasikartojimas Baltijos šalyse 1950–2022 metais</i>	62
39. Kojelis J., Jūrienė L., Baranauskienė R., Maždžierienė R., Venskutonis P. R. <i>Seasonal variability in the chemical composition of essential oil and extracts from Scots pine (<i>Pinus sylvestris</i>) needles in the vicinity of Vilnius: A comparative study of hydrodistillation and supercritical CO_2 extraction</i>	63
40. Krikštaponytė A., Kaušaitė-Minkštīmienė A. <i>PtCo nanozimo taikymas kuriant amperometrinį gliukozės biologinį jutiklį</i>	64
41. Krylova V., Sutkus E. <i>Thermo-oxidative surface modification of hydrophobic PTFE substrates</i>	65
42. Kudžma D., Cichon-Pupienis A., Radzevičius S. <i>Litofacijų ir geofizikinių parametru kaita Lietuvos ordoviko geologiniame pjūvyje</i>	66
43. Kvietkauskas E., Mickus Š., Vrubliauskaitė V., Sadauskas M., Ratautas K. <i>Lazeriu indukuoto grafeno pjezorezistyvinių savybių tyrimas</i>	67
44. Laurinavičius G., Poškus V. <i>Synthesis of APTES grafted silica and its modification with AgNP</i>	68
45. Lažaunikas R., Gadeikis S. <i>Pasvalio rajono gruntų mechaninių ir dinaminių savybių įvertinimas</i>	69
46. Linkaitė G., Raišeliene R., Grigoravičiūtė I., Kareiva A. <i>Environmentally friendly synthesis of biphasic calcium phosphates: transformation of gypsum under different synthesis profiles</i>	70
47. Lukaitė E., Butkevičius M., Malachovskienė E., Paškevičius A., Dagys M., Žalnėravičius R. <i>Mediciniškai svarbių bakterinių bioplėvelių elektrogeiniškumo nustatymas</i>	71
48. Lukomskis L., Pečiulytė L. <i>Ekstruzijos būdu gautų celiuliozės diacetato ir kavos lukštų kompozicijų savybės</i>	72
49. Lukošūnas J., Dijokas U., Baniukaitienė O. <i>Bioaktyvių 3D karkasų modeliavimas kaulinio audinio inžinerijai</i>	73
50. Mačiulaitis J., Veteikis D., Skorupskas R., Mačiulytė J., Misiūnė I. <i>Žemės dangos pokyčiai agrariniame kraštovaizdyje remiantis 1946-2020 metų aerofotonuotrukų vizualine informacija</i>	74

51. Mandal P. P., Karoblis D., Kareiva A. <i>Preparation of Sm³⁺ ions doped MgAl₂O₄ by sol-gel polyacrylamide synthesis</i>	75
52. Mcglone S. V., Januškevičius J., Stankevičiūtė Ž. <i>Synthesis of modified hydroxyapatite for oral care products</i>	76
53. Milerytė U., Bukšnaitienė R., Žutautė I. <i>2-aril-4h-benzimidazo[2,1-b][1,3]tiazino darinių sintezės tyrimas</i>	77
54. Minalgaitė M., Tutlienė S., Misevičius M., Skaudžius R. <i>Application of the Czochralski method for single crystal growth</i>	78
55. Morkvėnaitė E., Ramunė Rutkaitė R. <i>Synthesis and responsive behavior of cross-linked dextrin octenylsuccinate-graft-poly(N-isopropylacrylamide) copolymers</i>	79
56. Navašinskaitė G., Sokol D., Klydžiūtė G., Kareiva A. <i>Mg/Al sluoksniuotų dvigubų hidroksidų (SDH) sintezė ir savybių nustatymas</i>	80
57. Navitski I., Žukauskas Š., Ramanavičius S., Ručinskienė A., Svirbutavičius E., Ramanavičius A. <i>Applicability of MXene heavy metal sensor detection in real world water samples</i>	81
58. Omelchenko T., Sapauskiene M., Zahorodna V., Gogotsi O., Ramanaviciene A., Popov A. <i>Preparation and functionalization of gold nanorods for bioconjugation applications</i>	82
59. Orintaitė A., Kaušaitė-Minkštimienė A. <i>NiPdPt nanozimo taikymas kuriant pirmos kartos amperometrinių jutiklių skirtą gliukozės koncentracijos nustatymui</i>	83
60. Paškevičiūtė M., Šinkūnas P. <i>Ledyno pakraščio fluvio-glacialinės sedimentacijos zonų ypatybės Rytų Lietuvoje</i>	84
61. Paulauskaitė M., Žutautė I. <i>2-Alkenilimidazolų elektrofilinės ciklizacijos reakcijų tyrimas</i>	85
62. Petraška V., Žutautė I., Brukštus A. <i>Dvifunkcinių Hsp90 šaperono slopiklių, turinčių rezorcinolio ir benzimidazolo fragmentus, sintezė ir aktyvumo tyrimas</i>	86
63. Petrulevičius J., Daškevičienė M., Bubnienė G., Jankauskas V., Juška G., Getautis V. <i>Elektronų pernaša pasižyminčių (9-fluoreniliden)malononitrilo darinių sintezė ir savybių tyrimas</i>	87
64. Pylskaja P., Žutautė I. <i>4-(7H-imidazo[2,1-b][1,3]tiazin-5-il)anilino sintezė ir modifikavimas</i>	88
65. Plaušinitis D., Vaicekauskaitė E. <i>3D spausdinimo technologijoje naudojamų plastikų sąveika su vandens terpe: QCM ir elektrocheminiai tyrimai</i>	89
66. Popovas U., Žutautė I. <i>Ketvirtoje padėtyje cikliniais aminais ir amidais modifikuotų 6-chlorrezorcinolių sintezė</i>	90
67. Pupienis D., Brazdžiūnas P. <i>Pietryčių Baltijos jūros bangų režimas: vizualinių stebėjimų ir WAM modelio lyginamoji analizė</i>	91
68. Radzevičius N, Trioška E, Orentas E. <i>Plačiai funkcionalizuojamų modulinė supramolekulinių kavitandų sintezė</i>	92
69. Raišeliene R., Linkaitė G., Astramskas S., Kareiva A., Grigoravičiūtė I. <i>Skirtingos morfologinės sudėties magnio vitlokito granulių sintezė, ištyrimas bei tarpinių fazijų identifikavimas</i>	93
70. Reikertas A., Mačiulevičiūtė–Turlienė N. <i>Kapinių kaip miesto žaliųjų erdvių daugiakriterinis vertinimas: Vilniaus miesto savivaldybės atvejis</i>	94

71. Ričkutė N., Inkraitė G. <i>Cr³⁺ doped YAG and YLuAG synthesis and insight of luminescence properties</i>	95
72. Rimkutė G., Melkūnaitė G., Gaidukevič J. <i>Investigation of Exfoliated Graphite-(SCN)_n Composites and Their Application in Serotonin Sensors</i>	96
73. Rudaitytė G., Čiuladienė A. <i>Vario rašalų ant popieriaus stabilizavimas</i>	97
74. Rudnickaitė E. <i>Tarp mineralogijos, kristalografijos ir chemijos - doc. dr. Veros Kotovič 100-ąsias gimimo metines pasitinkant</i>	98
75. Sergejevaitė G., Žurauskas J., Kreiza G., Orentas E. <i>Karbazolo fragmentų turinčių mėlynų OLED spinduolių sintezė</i>	99
76. Stadulis J., Katelnikovas A., Žarkov A. <i>Mn⁵⁺ jonais legiruoto Sr₅(PO₄)₃F sintezė ir optinių savybių tyrimai</i>	100
77. Steponaitytė L., Šiaučiūnas R. <i>Influence of Al₂O₃ on the crystallinity of 1.13 nm tobermorite</i>	101
78. Stonkus T., Uogintė I., Byčenkienė S. <i>Distribution of Microplastic Particles in the Air of Lithuanian Schools Premises and Their Chemical and Physical Properties</i>	102
79. Šernaitė A., Inkraitė G., Skaudžius R. <i>Importance of drying speed and shrinkage coefficient in the synthesis of crack-free silica xerogels via the sol-gel method</i>	103
80. Šukys J., Kilpys J. <i>Klimato indeksų panaudojimas Lietuvos klimato pokyčių apibūdinimui</i>	104
81. Tamulienė J., Šarlauskas J. <i>Nitroaromatinių junginių su fluoro grupėmis stabilumo ir energetinių savybių tyrimas kvantinės chemijos metodais</i>	105
82. Trambitski Y., Kizinievič O., Kizinievič V. <i>A sustainable approach to modifying the structure and hygroscopic performance of unfired clay materials</i>	106
83. Ulevičienė V., Balčiūnaitė A., Upskuvienė D., Dobele G., Volperts A., Plavniece A., Zhurinsh A., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>Synthesis and Characterization of Biomass-Derived Carbon Catalysts for Hydrazine Oxidation</i>	107
84. Užupytė A., Šačkus A., Arbačiauskienė E. <i>Efficient two-step synthesis of novel imidazopyrazolooxazepines</i>	108
85. Vaickūnas P., Žurauskas J., Stankevičius V., Raišys S., Kazlauskas K., Orentas E. <i>Synthesis of Phenothiazine Derivatives Exhibiting Very Long Room Temperature Phosphorescence</i>	109
86. Vaitiekūnaitė U., Masevičius V. <i>Fenilboronio rūgštys nukleorūgščių analizėje</i>	110
87. Vaitkus M., Tautkus S., Kaminskas D. <i>Integruotas Plungės miesto komunalinių nuotekų išleistuvo ir Mažosios Sruojos upelio nuosėdų geocheminis vertinimas</i>	111
88. Valančius Z., Prichockienė E. <i>Baltų tekstūrinių dažų gamyba, užpildu naudojant gamybos atliekas</i>	112
89. Valeckytė G., Sukackienė Z., Vaičiūnienė J., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>Ni-Mo-W katalizatoriai vandenilio generavimui</i>	113
90. Vazgelevičiūtė U., Gaidamavičienė G., Žalga A. <i>Investigating the Impact of Sr²⁺ Substitution on the Structural Properties and Phase Transition Behavior of La₂Mo₂O₉</i>	114
91. Verbickas T., Januškevičius J., Stankevičiūtė Ž. <i>Silver doped calcium phosphate synthesized for antibacterial soap by precipitation method</i>	115

92. Virkėtis R., Klimkevičius V., Merkininkaitė G., Šakirzanovas S. <i>Modifikuoto heksagoninio boro nitrido keraminių 3D fotokatalizatorių gamyba naudojant stereolitografiją ir pirolizę</i>	116
93. Vyšniauskienė V., Stankūnavičius G. <i>Terminių anomalijų Rytinėje Baltijos regiono dalyje sąsajos su atmosferos cirkuliacija</i>	117
94. Vištorskaja D., Katelnikovas A., Kareiva A. <i>Naujų granato struktūros liuminoforų sintezė ir jų savybių tyrimas</i>	118
95. Volkova A. <i>Oro drėgmės dinamika rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje</i>	119
96. Vrubliauskaitė V., Ežerskytė E., Klimkevičius V. <i>Sintezės sąlygų įtaka aukštynverte liuminescencija pasižyminčių nanodalelių savybėms</i>	120
97. Zambžickaitė G., Mikoliūnaitė L. <i>Magnetinių nanodalelių modifikavimas biomolekulių SERS tyrimams</i>	121
98. Zubrickaitė D., Bronušienė A., Ancutienė I. <i>Aplinkai draugiška alavo sulfido sluoksnių sintezė ir iškaitinimo efektas</i>	122
99. Židonis S. <i>Daugiapolarumo paradigmos formalūs modeliai cheminių elementų atomų funkcijoms</i>	123
100. Žižiūnaitė G., Valinčius G., Valiūnienė A., Gabriūnaitė I. <i>Paviršiuje imobilizuotų membranų sąveikos su α-hemolizinu dinamikos tyrimas greitosios Furjė transformacijos elektrocheminio impedanso spektroskopijos metodu</i>	124
101. Žvirzdinė G., Bogužaitė R., Ratautaitė V., Ramanavičius A. <i>Molekulių įspaudais modifikuoto polipirolo formavimas ir analizė</i>	125

Pratarmė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakultetas antrą kartą rengia nacionalinę mokslinę konferenciją „Chemija ir geomokslai“. Konferencija „Chemija ir geomokslai 2024“ buvo skirta garsaus geologijos profesoriaus Juozo Paškevičiaus 100-osioms gimimo metinėms paminėti. Ir renginys buvo labai sėkmingas. Fakulteto mokslininkai pristatė naujausius mokslinius tyrimus, vykdomus Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos ir Geomokslų institutuose. Kadangi renginys buvo įdomus, dalyvavo konferencijoje didelis kiekis dalyvių, visi vieningai nutarėme, kad konferencija turi būti tęstinė, kasmetinė, vienijanti ne tik chemikus su geomokslų atstovais, vienijanti ne tik mūsų fakulteto mokslininkus. Šiais metais mūsų pradėta konferencija tampa tikrai respublikine konferencija. Kviestinius pranešimus skaitys Kauno technologijos universiteto, Fizinių ir technologijos mokslų centro, Vilniaus universiteto kitų fakultetų mokslininkai. Konferencijos devizu tampa posakis „Be atminties nebūna ateities“. Antroji konferencija „Chemija ir geomokslai 2025“ yra dedikuota žymių Lietuvos chemikų prof. Kazio Daukšo 120-osioms ir akademiko prof. Vito Daukšo 90-osioms gimimo metinėms paminėti.

*Prof. Aivaras Kareiva
VU Chemijos ir geomokslų fakulteto dekanas*

The image features a light beige background with decorative geometric elements. In the top right corner, there is a cluster of small, faint triangles connected by thin lines, some with small dots at their vertices. In the bottom left and bottom right corners, there are larger, overlapping geometric shapes in various shades of orange and yellow, including triangles and polygons, creating a layered, abstract effect.

ŽODINIAI PRANEŠIMAI

Profesorius Kazys Daukšas

Aivaras Kareiva

Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Prof. Kazys Daukšas gimė 1905 m. vasario 25 d. Sakalų kaime, Pakruojo rajone. Baigęs Šiaulių valstybinę gimnaziją (nuo 1996 m. – Šiaulių Juliaus Janonio gimnazija), K. Daukšas 1925 m. įstojo į Lietuvos universitetą (Matematikos-gamtos fakulteto Fizikos-chemijos skyrių). 1936 m. prof. K. Daukšas Vytauto Didžiojo universiteto Matematikos-gamtos fakultete apgynė disertaciją „Šarminių metalų osmatai“ daktaro laipsniui gauti. Ši disertacija yra pirmasis neorganinės chemijos krypties mokslinis traktatas Lietuvoje. Profesorius K. Daukšas 1937-38 m. stažavosi Graco technikos universitete Austrijoje. Grįžęs iš tyrimų Austrijoje, K. Daukšas pradėjo pedagoginę veiklą, skaitė neorganinės chemijos ir analizinės chemijos kursus. 1939 m. baigė habilitaciją, o Vytauto Didžiojo universitetas K. Daukšui suteikė privatdocento vardą.



Profesorius Kazys Daukšas (1905-1985)

1940 m. K. Daukšas persikėlė į Vilnių ir buvo paskirtas Vilniaus universiteto Neorganinės chemijos katedros (vėliau Neorganinės ir analizinės chemijos katedros) vedėju. Tais pačiais metais Vilniaus universitetas suteikė K. Daukšai profesoriaus vardą. 1945–1946 m. buvo pirmasis Vilniaus pedagoginio universiteto Chemijos fakulteto dekanas ir Chemijos katedros vedėjas. 1945–1956 m. K. Daukšas buvo Lietuvos mokslų akademijos Chemijos ir cheminės technologijos instituto direktoriumi. K. Daukšas 1958–1982 m. buvo Lietuvos chemikų draugijos pirmininkas. Vadovaujant profesoriui K. Daukšui, VU Chemijos fakultete apginta 11 daktaro disertacijų. Vienas arba kartu su bendraautoriais išleido 7 skirtingus vadovėlius chemijos studentams (14 leidimų; virš 40000 egz.). Be to, jis buvo pirmasis autorius, išleidęs „Chemijos terminų žodyną“ lietuvių kalba. 1981 m., 41 metus vadovavęs Neorganinės ir analizinės chemijos katedrai, prof. K. Daukšas išėjo į pensiją ir buvo paskirtas Vilniaus universitete profesoriumi-konsultantu. 1985 m. gruodžio 18 d. mirė sulaukęs 80 metų.

Vilniaus universiteto chemikų patriarchas profesorius Kazys Daukšas buvo išskirtinai žinomas universiteto dėstytojas ir aktyvus mokslininkas. Iki pat gyvenimo pabaigos jis buvo kupinas energijos ir naujų idėjų. Be meilės chemijai, profesorius Kazys Daukšas ypač domėjosi visuomenės problemomis. Be jokios abejonės, jis buvo ir atmintyje tebėra žymiausias ir populiariausias Chemijos fakulteto profesorius.

Profesorius Vitas Daukšas.
Mokslininkas, Praktikas, Mokytojas

Linas Labanauskas

Fizinių ir technologijos mokslų centras

Trumpai minimos prof. V. Daukšo svarbiausios gyvenimo datos, asmenybės bruožai, pagrindinės mokslinės, pedagoginės ir praktinės veiklos kryptys momentai ir kontekstas, įvairiose srityse pasiekti rezultatai.

Klimato kaitos ypatumai Lietuvos urbanizuotose teritorijose

Arūnas Bukantis¹, Evaldas Ramanauskas², Liucijus Dringelis², Giedrius Kaveckis², Gintė Jonkutė-Vilkė², Laurynas Klimavičius¹

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas,

²Kauno technologijos universiteto Architektūros ir statybos institutas

Pasaulyje šiltnamio efektą sukeliančių dujų (ŠESD) emisija nuolat didėja dėl energijos gamybai daugiausia naudojamo iškastinio kuro, netvaraus energijos vartojimo buityje ir pramonėje, žemėnaudos keitimo ir vartotojiško gyvenimo būdo. Pastatų sektoriui šiuo metu tenka apie 37 % pirminės energijos suvartojimo pasaulyje ir su energijos gamyba susijusių CO₂ emisijų. Urbanizuotos teritorijos išsiskiria itin dideliu pažeidžiamumu, nes čia klimato kaitos poveikis gali stipriai pabranginti pagrindines miestų paslaugas, pragyvenimą ir pakenkti žmonių sveikatingumui. Tuo pat metu miestai yra svarbiausiais klimato kaitos veiksnys, nes juose vykdoma žmonių veikla yra pagrindinis ŠESD šaltinis. Apskaičiuota, kad miestai yra atsakingi už 75 % pasaulinių CO₂ emisijų. Palyginti su kaimiškuoju kraštovaizdžiu, tankiai užstatytos miesto teritorijos tampa šilumos salomis, kuriose gyventojams tenka didesnė nei foninė šilumos apkrova, ypač vasaros periodais, kai įsivyrąja anticikloninė cirkuliacija ir susilpnėja oro apykaita tarp miesto centro ir užmiesčio. Kadangi prognozuojama, kad karščio bangų dažnis, trukmė ir intensyvumas ateityje didės, miesto gyventojų šilumos streso problema tik dar labiau paaštrės.

Šio tyrimo tikslas – nustatyti įvairaus užstatymo tipų (morfotipų) urbanizuotų teritorijų mikroklimato ypatumus, kuriais remiantis vėliau bus pateikti pasiūlymai gyvenamųjų vietovių urbanistinės plėtros reguliavimui, kryptingam urbanistinės struktūros, viešųjų erdvių formavimui ir kitoms priemonėms, kurios ateityje padėtų sušvelninti neigiamas klimato kaitos pasekmes. Mikroklimato tyrimai buvo atliekami Lietuvos didžiųjų miestų (Vilniaus ir Kauno) urbanizuotose teritorijose 2023–2024 m. gegužės rugsėjo mėnesiais. Matavimams naudotos mobilios meteorologijos stotys, kurios buvo išdėstomos įvairių morfotipų miestų kvartaluose, o jų matavimų rezultatai lyginami su užmiesčio meteorologijos stočių rodmenimis. Taip pat tyrimuose panaudoti Vilniaus universiteto stacionarios automatinės meteorologijos stoties matavimų rezultatai (2022-2023 m.).

Buvo išskirti šie miestų užstatymo morfotipai: 1 – aukštybinis užstatymas, 2 – perimetrinis užstatymas, 3 – laisvo planavimo užstatymas, 4 – kompaktiškas mažaaukštis sodybinis užstatymas, 5 – ekstensyvus sodybinis užstatymas, 6 – mišrus užstatymas, 7 – pramonės ir inžinerinės infrastruktūros užstatymas, 8 – atskirai stovintys pastatai, 9 – želdynai ir miestų miškai. Didžiausi oro temperatūros nuokrypiai, palyginti su užmiesčiu, nustatyti 1, 4, 2 ir 8 morfotipuose (+1,4–2,4 °C). Santykinis oro drėgnis visuose morfotipuose buvo mažesnis nei užmiestyje 1–7 %, labiausiai jis sumažėjo 1, 6 ir 8 morfotipuose. Vėjo greitis miestų teritorijose pasikeitė nevienodai: palyginti su užmiesčiu, 10–30 % stipresnis vėjas nustatytas 1, 5 ir 8 morfotipuose, o kituose – 2–5 kartus silpnesnis. Taip pat nustatyta, kad Vilniaus mieste, palyginti su užmiesčiu, karščio bangos, kai maksimali paros oro temperatūra ≥ 30 °C, yra ilgesnės trukmės ir intensyvesnės. Tyrimas atliktas įgyvendinant LMT remiamą projektą S-MIP-23-62 „Lietuvos gyvenamųjų vietovių urbanistinės aplinkos formavimas įvertinant šalies klimato kaitos prognozes“.

Biologiniai jutikliai: nuo analizinės chemijos iki klinikinės diagnostikos

Asta Kaušaitė-Minkštimienė, Aistė Giniūnaitė, Anton Popov, Almira Ramanavičienė

NanoTechnas – Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Labai svarbi analizinės chemijos ir klinikinės diagnostikos užduotis yra tikslus ir labai jautrus įvairių analizių kiekio nustatymas, kurio atlikti taikant įprastinius cheminės analizės metodus dažnai nėra įmanoma dėl didelės trukdančių medžiagų įvairovės tiriamuose mėginiuose. Naujas žingsnis tokių mėginių analizėje buvo žengtas 1962 m. Clark'ui ir Lyons'ui sukūrus ir aprašius pirmąjį biologinį jutiklį (BJ) – analitinį prietaisą, kuriame, kad nustatyti tam tikros analitės kiekį panaudojami gyvi organizmai, biologinės molekulės ar jas imituojančios dirbtinės medžiagos. Nuo šio BJ, skirto gliukozės kiekio nustatymui, publikavimo, BJ kūrimo sritis išgyvena eksponentinį augimą. Šiuo metu BJ plačiai taikomi įvairiose srityse, nuo aplinkosaugos, maisto ir gėrimų kokybės kontrolės, farmacijos iki klinikinės diagnostikos, siekiant nustatyti įvairių ligų biožymenis ar ligas sukeliančius virusus ir mikroorganizmus. BJ integravimas į klinikinę diagnostiką leidžia atlikti neinvazinius, greitus ir tikslius tyrimus, suteikiančius galimybę diagnozuoti ligą ankstyvoje stadijoje, stebėti ligos eigą ar taikyti personalizuoto gydymo strategijas.

Vieni iš plačiausiai tyrinėjamų BJ yra paviršiaus plazmonų rezonanso (PPR) imuniniai jutikliai, kurie pastaraisiais metais tapo puikia alternatyva tradiciniams antikūno-antigeno sąveika pagrįstiems bioanalizės metodams. Lyginant su jais, svarbi PPR imuninių jutiklių ypatybė yra ta, kad analizė yra atliekama realiuoju laiku, o jai atlikti nėra būtinos žymės. PPR imuniniai jutikliai yra labai jautrūs, todėl galima aptikti labai mažas analizių koncentracijas santykinai mažame mėginio tūryje. Be to, dėka didelio atrankumo analizei, PPR imuniniais jutikliais galima aptikti ir kiekybiškai įvertinti analites daug pašalinių medžiagų turinčiuose mėginiuose be daug laiko reikalaujančio mėginio paruošimo. Analizė atliekama per kelias minutes, o sėkmingai parinkus antikūno-antigeno komplekso disociacijos sąlygas galima atlikti daugkartinę analizę. Tačiau, nors tiesioginės detekcijos formatas yra labai patrauklus, paprastai jis nėra tinkamas mažos molekulinės masės, taip pat santykinai didelės molekulinės masės analizių, kai jų koncentracija yra pikomolių eilės ar mažesnė, analizei. Siekiant išvengti šio trūkumo, PPR imuninių jutiklių kūrimui išnaudojamos nanotechnologijos – jutiklio lusto paviršius modifikuodamas įvairiomis nanomedžiagomis arba nanomedžiagos naudojamos didelės masės žymėmis, o analizė atliekama netiesioginiu detekcijos formatu. Šiame pranešime bus pristatytas PPR imuninių jutiklių veikimo principas, taikymas kliniškai svarbių analizių analizei bei jautrio didinimo strategija didelės masės žymėmis panaudojant aukso nanodaleles, magnetines aukso nanodaleles bei kvantinius taškus.

Kova ar adaptacija: mikroorganizmai antropogeninėje aplinkoje

Eglė Lastauskienė, Justinas Kavoliūnas, Julija Armalytė

Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biomokslų institutas

Akvakultūra yra vienas sparčiausiai augančių maisto sektorių Centrinėje, Šiaurės ir Rytų Europoje. Siekiant atitikti pramonės poreikius žuvis auginamos didelio tankio sąlygomis, ir gėlo vandens žuvų ūkiai keičia ne tik žvejybos tvenkinių biologinę įvairovę, tačiau šie pokyčiai gali turėti įtakos ir besikeičiantiems aplinkiniams vandens telkiniams. Todėl yra būtinos atsargumo priemonės ekosistemoms apsaugoti ir jų tvarumui išlaikyti. Pagrindinis šio tyrimo tikslas – įvertinti intensyvios žuvininkystės įtaką pačių žuvininkystės tvenkinių ir aplinkinių vandens ekosistemų būklei, taip pat įvertinti teršalų ir atsparumo antibiotikams genų pernešimo tiek į aplinką, tiek į žmogų galimybę.

Sedimentų mėginiai ir žuvų žarnyno mikrobiomų mėginiai 2019 metų rugsėjį ir 2020 metų vasarą buvo surinkti 3 Lietuvos vietose: Žuvininkystės tvenkiniuose, Simno ežere prieš srovę nuo žuvininkystės tvenkinių ir Dusios ežere – pasroviui nuo žuvininkystės tvenkinių. Mėginiuose buvo išmatuotas sunkiųjų metalų ir antibiotikų likučių kiekis. Genominė DNR buvo išskirta iš mėginių naudojant Zymo-BIOMICSTM DNA Miniprep Kit remiantis gamintojo rekomendacijomis. Bakterijų populiacijos sudėtis buvo nustatyta naujos kartos sekvenavimu (NGS), nuskaitant bakterijų 16S rRNR geno amplikonus. V3 – V4 16S rRNR sritys buvo pasirinktos sekos nustatymui, nes jos gali aptikti tiek bakterijų, tiek archėjų taksonus su didele skiriamąja geba. NGS atliktas Novogene Bioinformatics Technology Co., Ltd. (Pekinas, Kinija).

Žuvininkystės ūkių sedimentuose buvo nustatytos padidėjusios sunkiųjų metalų koncentracijos. Tirtuose mėginiuose nebuvo identifikuoti ir veterinarinių antibiotikų likučiai. Iš ištirtų atsparumo antibiotikams genų, aminoglikozidų ir b-laktamų atsparumą lemiančių veiksnių buvimas, taip pat integronų buvimas, gali kelti susirūpinimą dėl galimo perdavimo žmonėms. Mikrobiomo beta įvairovės analizės rezultatai parodė skirtumus tarp visų tvenkinių nuosėdų mikrobiotos sudėties ir įėjimo taškų, laikomų švaria zona.

Finansavimas: Šis tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos dotacijos (Nr. S-SIT-20-6) lėšomis.

Padėka: Autoriai dėkoja Modestui Ružauskui, Vaidotui Valskiui, Vilmantui Gėgžnai, Justinui Kavoliūnui už mėginių surinkimą ir duomenų analizę bei Radvilei Drevinskaitei, Karinai Kasperovičiūtei, Karolinai Sabaitei ir Ievai Ščerbai už puikią techninę pagalbą.

Gėlos ledynų ašaros kuriančios reljefo formas

Petras Šinkūnas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Šiame darbe pristatomos ilgamečių tyrimų įžvalgos apie ledynų tirpsmo vandens srautų suklostytų (fliuvioglacialinių) nuosėdų struktūros ir tekstūros ypatybes ir jų sąsajas su Žemės paviršiaus formavimosi procesais buvusių kontinentinių apledėjimų srityse.

Nuosėdų sluoksniai yra prieinami tik natūraliose atodangose ir karjeruose, kurių vieta laikui bėgant kinta, todėl ilgalaikiai stebėjimai leidžia atskleisti sudėtingus sedimentacijos sąlygų dėsningumus. Tokiu būdu, atliekant sedimentologinius tyrimus, kaupiami duomenys sukuria erdvinį paviršiaus formų sandaros vaizdą, kuriame nuosėdų struktūrinės ir tekstūrinės detalės bei jų kaita vaidina svarbų vaidmenį interpretuojant reljefą formavusius nuosėdų klostymo procesus.

Ligšiolinės fliuvioglacialinių nuosėdų sedimentacijos sąlygų interpretacijomis grįstos genetinės klasifikacijos buvo orientuotos į specifinių sedimentologinių ir morfologinių požymių nustatymą, leidžiantį identifikuoti morfologiškai išreikštų skirtingos kilmės nuosėdų tipus. Tačiau, daugėjant tyrimų, netrukus buvo įvertinta ir fliuvioglacialinių nuosėdų telkinių sandaros kompleksškumo supratimo svarba. Tokiu būdu nuo fliuvioglacialinių nuosėdų telkinių genetinio tipo nustatymo, kuris reiškė lokalaus nuosėdų komplekso sedimentacijos sąlygų aiškinimą, buvo pereita prie kompleksiškesnių sedimentologinių modelių kūrimo, apimančių procesų, vykusių platesnėje sedimentacijos aplinkoje, įvairovę. Kadangi fliuvioglacialinių nuosėdų sedimentacijos pobūdį lemia daugybė veiksnių, tokių kaip ledynų tirpsmo vandens srautų dinamika, erdvinis santykis su ledynu, pernešamos nuotrupinės medžiagos kiekis ir pobūdis, sedimentacijos vietos morfologija bei klimato pokyčiai, nuosėdų struktūrinuose ir tekstūriniuose požymiuose užfiksuota informacija yra daugiareikšmė. Dėl šios priežasties ji šifruojama ir aiškinama atsižvelgiant į jos kompleksškumą. Kitas svarbus veiksnys yra tai, kad tie patys procesai vyksta įvairiose ledyninėse ir prieledyninėse aplinkose, todėl sedimentacijos modelių kūrimui svarbu nustatyti erdvinį tiriamų nuosėdų sluoksnių santykį. Tai nėra vienareikšmis uždavinys, atsižvelgiant į aplinkos dinamiškumą bei kaitą, susijusią su klimato pokyčiais.

Kuriant sedimentologinius modelius, geomorfologinė informacija paprastai yra lengviausiai prieinama. Tačiau ji dažnai tėra forma be turinio, jei nėra galimybės gauti sedimentologinių ar bent jau geologinės sandaros duomenų. Todėl fliuvioglacialinių nuosėdų sedimentacijos tyrimai reikalauja daugiapakopio požiūrio, jungiančio geomorfologinius, sedimentologinius ir stratigrafinius duomenis, siekiant tiksliau suprasti ledyninių ir prieledyninių aplinkų raidos procesus, ypač aiškinant buvusias sedimentacijos sąlygas didesniuose fliuvioglacialinių nuosėdų išplitimo plotuose.

Šie tyrimai ne tik padeda rekonstruoti praeities aplinkas ir klimato kaitos poveikį, bet ir suteikia vertingų įžvalgų apie dabartinių ledyninių bei prieledyninių procesų eigą. O tai prisideda prie tikslesnių prognozių, vertinant būsimus klimato kaitos padarinius ir jų poveikį geomorfologiniams procesams.

Nehidraulinių kalčio silikatų sintezė ir jų kietėjimas CO₂ aplinkoje

Raimundas Šiaučiūnas

Kauno technologijos universitetas, Silikatų technologijos katedra

Portlandcemenčio (PC), pagrindinės betonų sudedamosios dalies, gamyba yra susijusi su didžiule CO₂ emisija – 2023 m. ji sudarė 2,4 mlrd. tonų. Pasaulinė cemento gamyba išaugo nuo 1,6 mlrd. tonų 2000 m. iki 4,4 mlrd. tonų 2022 m., o tai reiškia ~5% metinį augimą dėl didėjančio gyventojų skaičiaus, urbanizacijos ir infrastruktūros plėtros. Cemento gamyba priklauso labiausiai klimato kaitą įtakojančių veiksnių „juodajam sąrašui“, nes generuoja ~7% pasaulinės CO₂ emisijos.

Rankinitas Ca₃Si₂O₇ yra vienas iš žemabazių kalčio silikatų, kuris gali būti naudojamas kaip alternatyvioji rišamoji medžiaga. Kadangi jo CaO/SiO₂ molinis santykis yra kone dvigubai mažesnis nei PC, tai gamybai reikia mažiau karbonatinių uolienuų. Rankinitas sintetinamas ~200 °C žemesnėje temperatūroje, nei PC klinkeris, todėl kuro bei energijos sąnaudos yra gerokai mažesnės. Be to, rankinito gamybą galima vykdyti iš tų pačių žaliavų kaip ir PC klinkerio, o esamos gamybos technologinės linijos yra tinkamos ir gali būti naudojamos be esminių pakeitimų.

Darbe nustatytos optimalios rankinito sintezės sąlygos iš vietinių žaliavų – opokos ir klinties: mišinio molinis santykis CaO/SiO₂ = 1,5, degimo temperatūra 1250 °C, trukmė 45 min. Produkto sudėtyje vyrauja rankinitas su nedideliu pseudovolastonito, akermanito ir bredigito priemaišų kiekiu. Iš rankinito rišamosios medžiagos mišinių su smėliu galima gaminti ~45 MPa stiprio gniuždant betoną, kietinant tokiomis sąlygomis: 24 val. 45 °C esant 15 bar CO₂ slėgiui, kai rišklio / smėlio = 1:3, vandens / rišklio = 0,25, presuojant 12,5 MPa slėgiu.

Tačiau reikia pažymėti, kad nepaisant ~200 °C žemesnės rankinito sintezės temperatūros, nei PC klinkerio, ji vis tiek išlieka gana aukšta – ~1250 °C. Vienas iš būdų išvengti kalcinavimo etapo – gaminant CO₂ aplinkoje kietėjančius betonus vietoj bevandenių kalčio silikatų kaip riškį naudoti hidroterminiu būdu susintetintus kalčio hidrosilikatus. Nustatyta, kad švarų, be kitų junginių priemaišų, kilchoanito [Ca₆(SiO₄)(Si₃O₁₀)] ir α-C₂SH [Ca₂(HSiO₄)(OH)] mišinį geriausia sintetinti šiomis sąlygomis: molinis santykis CaO/SiO₂ = 1,5, sočių vandens garų temperatūra 200 °C, izoterminio išlaikymo trukmė – 8 val., nemišant suspensijos. Iš šios rišamosios medžiagos ir smėlio mišinio (santykis 1 : 3), kietinant 15 bar slėgio CO₂ aplinkoje, galima gaminti 20–25 MPa stiprio (vidutinio stiprumo klasės) betonus. Taip pat išanalizuota betono bandinių mineralinė sudėtis bei morfologija ir nustatyta, kad jų stiprumą nulemia karbonizacijos metu susidarę kalцитas bei polimerizuotas SiO₂ gelis.

Ekstremalūs hidrologiniai reiškiniai praeityje ir ateityje

Jūratė Kriaučiūnienė

Lietuvos energetikos institutas

Pagrindiniai ekstremalūs hidrologiniai reiškiniai Lietuvoje yra upių pavasario potvyniai, vasaros ir rudens sezonų poplūdžiai, hidrologinės sausros bei išdžiūstančios upės. Tyrimo tikslas yra įvertinti ekstremalių hidrologinių reiškinų kaitos dėsningumus pagal daugiamečius duomenis ir atlikti šių hidrologinių reiškinų prognozę pagal naujausius klimato scenarijus taikant hidrologinį modeliavimą.

Įvertinus potvynių kaitos dėsningumus praeityje pagal daugumos vandens matavimo stočių duomenis nustatyti reikšmingi neigiami pavasario potvynių maksimalių debitų (Q_{max}) trendai, o daugumos upių vasaros ir rudens sezonų poplūdžių Q_{max} trendai buvo nereikšmingi. Ateityje prognozuojama pavasario potvynių maksimalių debitų mažėjimo tendencija, tačiau atskirais metais išlieka tikėtini ekstremalūs potvyniai. Prognozuojami vidutiniai maksimalūs šiltojo sezono poplūdžių debitai didėja, kartu daugėja ir ekstremalių debitų pasikartojimo atvejų.

Hidrologinių sausrų pasiskirstymas pagal trukmę ir stiprumą Lietuvos hidrologiniuose rajonuose nėra tolygus. Didžiausios hidrologinės sausros nustatytos 1961-1977 m., 2000-2007 m. ir 2018-2020 m. Ilgiausia hidrologinė sausra užfiksuota Pietryčių hidrologiniame rajone (1971-1974 m. truko 42 mėnesius), tačiau daugiausiai sausringų mėnesių šiltuoju metų laikotarpiu nustatyta Vidurio ir Vakarų hidrologiniuose rajonuose. Hidrologinių sausrų didėjimo tendencija prognozuojama šimtmečio pabaigoje.

Išdžiūstančių upių problema plačiai paplitusi visame pasaulyje, ne išimtis ir Lietuva. Dauguma išdžiūstančių upių pagal daugiamečius hidrologinius duomenis nustatyta Vidurio Lietuvos hidrologiniame regione. Tokių upių buvimą lemia tokie veiksniai kaip baseino plotas, nuolydis ir dirvožemio tipas.

Elektrochemijos mokslo raida ir perspektyvos Lietuvoje

Rimantas Ramanauskas

Fizinių ir technologijos mokslų centras

Lietuva gali pagrįstai didžiuotis, kad elektrochemijos mokslo ištakos šalyje siejamos su pasaulinio garso elektrolizės teorijos kūrėjo T. Grotuso vardu. Ji buvo pasiūlyta 1806 m. ir, kai kurių žymių mokslininkų nuomone, galėjo būti verta Nobelio premijos, jei tuo metu tokia būtų buvusi įsteigta. Tačiau turėjo praeiti 100 metų, kol Lietuvoje prasidėjo kiti rimti elektrocheminiai tyrimai ir jie buvo susiję su V. Čepinskio vardu. Deja, prieš Antrąjį pasaulinį karą buvo padėti tik elektrochemijos mokslo plėtros pagrindai. 1945 metais J. Matulio iniciatyva įsteigiamas Lietuvos Mokslų Akademijos Chemijos ir cheminės technologijos institutas. Jei pradiniam veiklos etape buvo vykdomi moksliniai tyrimai nukreipti į Lietuvoje randamų naudingų iškasenų, gruntinių vandenų ar analogiškų objektų studijas, tai J. Matulio iniciatyva susikoncentruota į elektrolitinių metalų dangų nusodinimo studijas. Buvo vykdomi fundamentinio bei taikomojo pobūdžio darbai, besibaigiantys metalų elektronusodinimo technologijų parengimu ir jų įdiegimu pramonėje. Svariausi elektrochemijos mokslo pasiekimai Lietuvoje XX a. buvo pasiekti būtent šioje srityje.

Ne mažiau svarbus veiksnys buvo ir J. Matulio įkurta Fizikinės chemijos katedra Vilniaus universiteto Chemijos fakultete, kuri išlaiko aukštą mokslinį ir pedagoginį lygį, tapo produktyviu kvalifikuotų elektrochemikų rengimo centru.

Lietuvai atgavus nepriklausomybę šalyje buvo nustatytos naujos mokslinių tyrimų kryptys, orientuotos į integraciją į pasaulinį chemijos mokslą. Kokybiniai pokyčiai mokslinių tyrimų objektų ir mokslinės produkcijos srityje įvyko per paskutinį XX a. dešimtmetį. J. Matulio inicijuoti tyrimai išsiplėtė į tokias sritis kaip autokatalitinė metalų redukcija, bioelektrochemija, spektroelektrochemija ir elektrocheminė medžiagotyra.

Elektrocheminės technologijos vaidina lemiamą vaidmenį pereinant prie atsinaujinančiosios energijos ir tvarių medžiagų sistemų, todėl pastaruoju laikotarpiu Lietuvos elektrochemikai didelį dėmesį skiria energijos elektrocheminės konversijos problemų sprendimui bei elektroanalizinių sistemų kūrimui. Naujos katalitiškai aktyvios medžiagos, tinkančioms energijos kaupimui, kuro elementams ar vandens elektrolitiniams skaidymams yra dabartinių mokslinių tyrimų objektais. Kita šiuo metu vykdomu perspektyvių tyrimų sritis yra susijusi su elektrocheminių biojutiklių technologijų kūrimu.

Fluidai, izotopai ir kitos Lietuvos kristalinių uolienų paslaptys

Gražina Skridlaitė^{1,2}, Laurynas Šiliauskas¹, Olga Demina¹

¹ *Gamtos tyrimų centras, Geologijos ir geografijos institutas*

² *Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Geomokslų institutas*

Prekambro laikotarpio Lietuvos kristalinis pamatas, slūgsantis nuo 200 m (pietų Lietuvoje) iki 2000 m (Vakarų Lietuvoje) gylyje, pradėtas tirti jau XX-o amžiaus pirmoje pusėje, kada buvo iškelti pirmieji uolienų kerno gabaliukai. Remiantis geofiziniais ir aprašomaisiais uolienų duomenimis buvo sukurti pirmieji žemėlapiai, parašytos ataskaitos. Paskutiniajame XX a. dešimtmetyje prasidėjo modernūs kristalinių uolienų tyrimai, naudojant įvairių izotopų santykius, uolienų ir mineralų chemiją, temperatūros ir slėgio parametrų modeliavimą, fluidų sudėtį ir t.t.

Uolienų amžius – viena svarbiausių uolienos kilmės ir evoliucijos charakteristikų. Patikimiausiu iki šiol laikomas U-Pb metodas cirkonų, monacitų, titanitų ir kt. mineraluose. Per daugiau kaip du dešimtmečius sukaupti, patikimais metodais nustatyti ("tradiciniu", antrinių jonų masės spektroskopijos) U-Pb amžių duomenys buvo panaudoti tarptautinei senųjų Kolumbijos ir Rodinijos super-kontinentų rekonstrukcijai. Juos papildžius Sm-Nd, Rb-Sr izotopų ir geocheminių tyrimų rezultatais Vidurio Lietuvos domenas (štambi prekambrinė geologinė struktūra) buvo "pratęstas" per Baltijos jūrą į centrinę Švediją. Nauju metodu (LA ICP-MS) Varėnos geležies rūdos telkinyje buvo datuoti badeleito ir monacito mineralai, kurių amžius apie 1,7 mlrd. m. Tai vienas iš aprūdėjimo etapų, susijęs su retųjų žemės elementų prinešimu.

Varėnos geležies rūdos telkinyje ir aplinkinėse uolienose pradėti fluidų (aukštatemperatūrinių tirpalų) kilmės, sudėties ir gebėjimo tirpinti, pernešti ir kaupti strateginių ir ypač svarbių žaliavų elementus. Mezoproterozojiniuose (prieš 1,5 mlrd. metų) susidariusiuose granitoiduose Pietų Lietuvoje esančius rūdinius elementus pernešė ir sukaupe vėliau veikę fluidai, ką patvirtino LA ICP-MS metodu datuoti U-Pb santykiai titanitų mineraluose.

Paviršių dekoravimas polimerų nanosluoksniais

Ričardas Makuška

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Labai plačiai naudojamos polimerinės dangos, gaunamos užnešus dažus ar lakus, kurios apsaugo dengiamus paviršius nuo neigiamo aplinkos poveikio (korozija, puvimas ir pan.) ir dažniausiai pagerina estetinį vaizdą. Polimerinių dangų storis paprastai siekia šimtus mikronų, kartais – dešimtis mikronų. Ant paviršių galima suformuoti ir apie 10000 kartų plonesnius polimerinius sluoksnius, keletą ar keliolika nanometrų storio, tačiau jų paskirtis jau kita – suteikti paviršiams tam tikras pageidautinas savybes, sakoma – paviršius dekoruoti. Dekoruoju paviršius, galima padidinti jų hidrofiliškumą, biosuderinamumą, pagerinti lubrikacines savybes, sumažinti sąveikas su baltyminėmis medžiagomis ir pan. Tokia paviršiaus savybių kontrolė ypač svarbi biomedicinos srityje. Paviršiaus savybes dažniausiai keičia polimerų monosluoksniai, kurių adsorbcija paviršiuje vyksta dėl vandenilinių ryšių, elektrostatinių sąveikų ar susidarant valentiniams ryšiams.

Pranešime aptariama statistinių, gradientinių ir diblokinių šepetinių kopolimerų, turinčių polietilenoksido arba fosforilcholino segmentų, suteikiančių lubrikacines ir sterinės apsaugos savybes, sintezė RAFT metodu, tokių kopolimerų ir jų sorbuotų sluoksnių ypatybės. Šie kopolimerai taip pat turi katijoninių arba katecholinių grupių, kurių dėka šie kopolimerų gali prisitvirtinti prie įvairios kilmės paviršių. Aptariama adsorbcijos dinamika, adsorbuotų sluoksnių struktūra, stabilumas ir atsparumas nusitrynimui. Išryškintas diblokinių kopolimerų, kurių viename bloke yra fosforilcholino segmentų, o kitame – katecholinių grupių, perspektyvumas dekoruojant įvairius paviršius, siekiant suteikti jiems ilgalaikes lubrikacijos ir baltymų atstūmimo savybes vandeninėje aplinkoje.

Nuotoliniai pelkių vandens lygio stebėjimai taikant palydovinius metodus

Laurynas Jukna, Elzė Buslavičiūtė, Rasa Janušaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Pastaraisiais dešimtmečiais pripažįstama, kad degradavusių ir pažeistų pelkių atkūrimas yra svarbus klimato kaitos švelninimo elementas, todėl vis dažniau inicijuojami jų atkūrimo projektai, kuriuose pirmenybė teikiama hidrologinio režimo atkūrimui. Žemės stebėjimo palydovai, pagrįsti aktyviais bei pasyviais mikrobangų ir pasyviais optiniais jutikliais, suteikia galimybes stebėti vandens lygio dinamiką per laiko ir erdvės dimensijų pjūvius. Didelį proveržį pelkių vandens lygio nuotoliniuose stebėjimuose leido pasiekti į optinius pasyvių jutiklių duomenis orientuota trapezoidinių modelių koncepcija bei jos pagrindu sukurtas Optinis Trapezoidinis Modelis (OPTRAM). OPTRAM modelis grindžiamas fizikiniais ryšiais tarp dirvožemio drėgmės ir trumpabangės infraraudonosios spinduliuotės atspindžio. Skačiuojant OPTRAM rodiklį, drėgmei jautrus transformuotas trumpabangio infraraudonojo spektro atspindys (STR) derinamas su pasirinktu vegetacijos rodikliu (dažniausiai normalizuoto skirtumo augalijos rodikliu (NDVI)). Projektuojant juos į dvidimensę erdvę suformuojamas trapezoidas, kur didžiausios STR reikšmės išilgai augalinės dangos gradiento brėžia „drėgmės briauną“ ir atitinka pikselius, kuriuose drėgmės kiekis yra didžiausias, o mažiausios STR reikšmės išilgai augalinės dangos gradiento brėžia „sausąją briauną“, kuri atitinka mažiausia drėgme pasižyminčius pikselius. Tačiau OPTRAM modeliui būdinga jautrumo atmosferos sąlygoms problema, limituojanti jo taikymą santykinai aukšto debesuotumo zonose. Šiai problemai spręsti adaptavome trapezoidinių modelių koncepciją atmosferos sąlygoms nejautriems sintetinės apertūros radaro (SAR) duomenims ir sukūrėme SAR TRapezoidinį Modelį (SARTRAM). SARTRAM metodas grindžiamas SAR grįžtamosios sklaidos signalo jautrumu drėgmei ir paaiškinamas per dielektrinės konstantos skirtumą tarp vandens (~80) ir dirvožemio dalelių (~4). Transformuoti SAR signalai taip pat gali būti naudojami augalinės dangos savybėms vertinti. Remdamiesi šiomis prielaidomis, kaip dirvožemio drėgmės rodiklį naudojame „Sentinel-1“ signalo grįžtamosios sklaidos vertes σ^0 . Tyrimo metu SARTRAM ištestuotas su σ_{VV}^0 , ir σ_{VH}^0 poliarizacijos duomenimis. Kaip augmenijos kiekio rodiklį naudojome radaro vegetacinį indeksą (RVI). Gauti rezultatai parodė, kad tradicinis OPTRAM lyginant su SARTRAM pasižymi aukštesnėmis koreliacijos su vandens lygio duomenimis vertėmis. Vis dėl to, SARTRAM pritaikius slenkančio lango duomenų filtrą, koreliacijos koeficientai išaugo vidutiniškai iki 16 %. Didžiausia vidutinė SARTRAM R vertė ($R = 0,65$) pasiekta su VH poliarizacija, paskaičiuota geriausiai pelkės ribose su vandens lygiu koreliuojančiam pikseliui. SARTRAM geriausiai vandens lygį prognozavo vasarą, tačiau santykinai gerus rezultatus parodė taikant jį ir sezoninei bei metinei vandens lygio stebėsenai, pranokdamas tradicinius SAR grįžtamąją sklaidą grindžiamus metodus. SARTRAM gebėjimas teikti nuolatinius, nuo oro sąlygų nepriklausomus duomenis, išryškina jo potencialą, kurį dar labiau padidina galimos metodo vystymo perspektyvos, taikant papildomus duomenų filtravimo ir korekcijos metodus..

Neorganiniai granato struktūros scintiliatoriai ir jų apibūdinimas

Greta Inkrataitė¹, Jan-Niklas Keil², Thomas Jüstel², Ramūnas Skaudžius¹

¹ Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

² Miunsterio taikomųjų mokslų universiteto Cheminės inžinerijos institutas

Viena iš sričių, kurioje stebima sparti technologijų pažanga, yra susijusi su elektromagnetinės spinduliuotės naudojimu, kitaip tariant, tai medžiagos ar sistemos, kurios sąveikauja su šviesa. Šviesos technologijomis paremti detektoriai plačiausiai naudojami prietaisuose, skirtuose medicininiam žmogaus kūno vaizdavimui ir tyrimui, pavyzdžiui kompiuterinėje tomografijoje (CT). Šiuose prietaisuose naudojamų detektorių veikimo principas yra pagrįstas didelės energijos, tokios kaip gama ar rentgeno spinduliai, konvertavimu į matomą šviesą. Medžiagos, kurios konvertuoja didelės energijos spinduliuotę į matomą šviesą, yra vadinamos scintiliatoriais.

Siekiant gaminti aukštos kokybės detektorius, pirmiausiai, reikia gerinti juose esančių scintiliatorių savybes. Detektorių, tiksliau, jų sudėtyje esančių scintiliatorių, tobulinimas, leistų gauti tikslesnę, kokybiškesnę ir patikimesnę informaciją analizės metu. Granato struktūrą turintys neorganiniai oksidai yra laikomi beveik idealia scintiliatorių matrica. Daug dėmesio skiriama itrio aliuminio ir lutecio aliuminio granatams, legiruotiems ceriu arba prazeodimiu (YAG:Ce(Pr); LuAG:Ce(Pr)), kurie pasižymi visomis scintiliatorias reikalingomis savybėmis, tačiau jiems labai svarbi kiek įmanoma trumpesnė gesimo trukmė. Šiuo metu tai yra vienas iš scintiliatorių kokybę ribojančių parametru, kuris itin aktualus. Kuo trumpesnė gesimo trukmė, tuo daugiau signalų gali būti užfiksuota per tą patį laiko tarpą. Dėl šios priežasties, atliekant tyrimus detektoriai galėtų sugeneruoti kokybiškesnį, patikimesnį ir didesnės skiriamosios gebos vaizdą.

Nors granatuose, kurie yra legiruoti Ce^{3+} ar Pr^{3+} jonais, jau minėta gesimo trukmė yra santykinai trumpa, tačiau šią savybę vis dar siekiama gerinti. Vienas iš būdų, kaip tą galima padaryti – pakeisti junginio elementinę sudėtį. Junginius galima legiruoti pakeičiant vienus jonus kitais, taip pakoreguojant struktūrinės, morfologinės ir liuminescencinės savybes. Pastaruoju metu daugėja tyrimų, kuriais įrodoma, kad boro jona turi teigiamą įtaką granato liuminescencinėms savybėms. Boro rūgštis, kuri yra naudojama kaip sintezės pirmtakas, turi žemą lydymosi temperatūrą (170 °C), todėl ji veikia ne tik kaip B^{3+} jonų šaltinis, bet tuo pačiu ir kaip fliusas. Ši dviguba boro rūgšties savybė leidžia ne tik pagerinti granatų emisijos ir sužadavimo intensyvumą, padidinti kvantinės išieigos vertes, tačiau tuo pačiu ir sumažinti junginių gesimo trukmę.

Atsižvelgiant į gesimo trukmės vertes, šiame darbe buvo sintetunami ne tik boru, ceriu, bet ir prazeodimiu legiruoti granatai, o visiems junginiams buvo tiriamos scintiliatoriams svarbios liuminescencinės, struktūrinės ir morfologinės savybės. Sintetunami miltelių formos mėginiai yra tinkamiausi tiriant įvairias savybes, tačiau tokios formos medžiagas sunku pritaikyti praktiškai. Dėl šios priežasties papildomai buvo sintetamos analizuojamų granatų keramikos ir plonos dangos ant kvarco bei safyro padėklų.

Padėka. Tyrimų atlikimas finansuotas Vokietijos akademinė mainų tarnybos (DAAD).

The image features a light beige background with decorative geometric elements. In the top right corner, there are several small, faint triangles connected by thin lines, some with small dots at their vertices. In the bottom left and bottom right corners, there are larger, overlapping geometric shapes, primarily triangles and polygons, in various shades of orange and yellow, creating a layered, abstract effect.

STENDINIAI PRANEŠIMAI

1

Accelerated carbonation of blended cement pastes

Neda Aliukonytė, Raimundas Šiaučiūnas

Kaunas University of Technology, Faculty of Chemical Technology, Department of Silicate Technology

The production of hydraulic binders, the most important component of concrete, is associated with high energy consumption and huge CO₂ emissions. The most widely used solutions in the world, such as clinker additives, alternative fuels, energy cost optimization, and engineering innovations, are not enough to lead greenhouse gas emissions close to zero. Therefore, the utilization and development of alternative binders with a lower CO₂ footprint than Ordinary Portland cement (OPC) is one of the major challenges for the building material industry and the scientific community.

The aim of this work is to investigate the possibility of replacing a part of OPC in CO₂-hardening blended cement pastes with bypass dust. Raw materials used: SCHWENK CEM I 42.5 R and Akmenes Cementas AB bypass dust. With a force of 12.5 kN samples were compressed into OPC : bypass dust mixtures, in which 0; 10; 20; 30 and 40 % of OPC was replaced by bypass dust.. They were cured in a reactor filled with 99,9% pure CO₂ gas at temperature of 25, 35, 45 and 55 °C, under a pressure of 12,5 bar, and the holding time was 24 h. The compressive strength of the samples, the amount of bound CO₂, and the mineralogical composition using XRD and STA methods were determined.

XRD and STA results showed that portlandite, potassium chloride and spurite, which are present in the bypass dust, reacts completely under the conditions mentioned above. Calcite and hatrurite is formed and alite remains.

In samples containing 25% bypass dust, aragonite is formed within 24 h at a temperature of 35 °C and a CO₂ pressure of 12.5 bar. The presence of this compound accounts for the reduced strength observed in the samples. Additionally, at a temperature of 55 °C and a CO₂ pressure of 12,5 bar, aragonite is identified in samples composed of 20% and 25% bypass dust along with ordinary OPC.

Bypass dust can substitute up to 20% of OPC in the preparation of CO₂ curing blended cement pastes in the temperature interval of 25–45 °C. At a temperature of 55 °C and a pressure of 12,5 bar, this substitution is limited to 15%. It is important to note that bypass dust is not an inert additive, as certain compounds within it engage in reactions with moist CO₂ gas during the carbonation process.

2

Highly Active and Durable Non-Noble Metal-Based Catalysts for Electrocatalytic Hydrogen and Oxygen Production

Huma Amber¹, Karina Vjunova², Zita Sukackienė¹, Jūratė Vaičiūnienė¹, Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė¹, Eugenijus Norkus¹

¹Department of Catalysis, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Sauletekio Ave. 3, Vilnius, Lithuania

²Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko str. 24, Vilnius, Lithuania

To address environmental pollution and the energy crisis, it is crucial to develop efficient, economical, and stable non-noble metal-based electrocatalysts for water splitting, aiming to produce renewable energy sources H₂ and O₂. At present, the fabrication of electrocatalytic electrode materials with high performance at low cost under mild conditions is a challenging task. To address this challenge, a straightforward electroless plating method is employed for the deposition of CoFe, CoFeMn, and CoFeMo coatings on nickel foam. Morpholine borane was utilised as the reducing agent. The characterisation of the surface morphology, structure and composition of the resulting coatings was performed using a range of analytical methods, including scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD) and inductively coupled plasma optical emission spectroscopy (ICP-OES). The electrocatalytic performance of the catalytic materials for the hydrogen evolution reaction (HER) and the oxygen evolution reaction (OER) was evaluated using linear sweep voltammetry (LSV) in 1 M KOH solution.

CoFe, CoFeMn and CoFeMo coatings deposited on nickel foam are found to be compact and crack-free, with typical globular morphology. Electrochemical measurements revealed that CoFeMn and CoFeMo coatings resulted in lower overpotential values of 135.8 and 149.6 mV, respectively, for the HER to obtain a current density of 20 mA cm⁻² as compared with the CoFe coating, which exhibited an overpotential of 243.9 mV. For the OER, it was found that the CoFe coating exhibited superior performance with an overpotential value of 331.7 mV and was able to achieve a current density of 40 mA cm⁻², in comparison to the CoFeMo and CoFeMn coatings, which exhibited overpotential values of 368.4 and 385.1 mV, respectively. To summarise, the present study proposes a novel technique for the economical development of catalysts for green hydrogen production through water splitting.

3

Phosphorus-Modified Reduced Graphene Oxide for Advanced Electrochemical Sensing Applications

Rūta Aukštakoitytė¹, Rasa Pauliukaitė^{1,2}, Dovilė Burakovaitė¹, Justina Gaidukevič^{1,2}

¹ Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry

² Center for Physical Sciences and Technology, Department of Nanoengineering

Dopamine (DA) is an important neurotransmitter, which abnormal levels in human blood are associated with neurological diseases such as schizophrenia, depression, Parkinson's, and Alzheimer's diseases. Uric acid (UA), a byproduct of purine metabolism, is associated with conditions like kidney stones, diabetes, coronary heart disease, and hypertension. Consequently, the accurate detection and measurement of DA and UA are essential for scientific research and disease prevention. However, DA and UA possess close oxidation potentials on traditional electrodes, leading to overlapping peaks in electrochemical measurements. Therefore, the electrode modification with graphene-based materials could be a key strategy to improve the selectivity and sensitivity of simultaneous detection of DA and UA. This study aims to synthesize phosphorus-modified reduced graphene oxide (P-rGO) samples and investigate their electrochemical performance in the determination of DA and UA. The P-rGO samples were prepared by one-pot hydrothermal treatment of GO in the presence of H₃PO₄ (10 and 20 wt.%). The reaction was carried out in a Teflon-lined stainless-steel autoclave at 180°C for 12 hours. Characterization was performed using scanning electron microscopy (SEM), Brunauer-Emmett-Teller (BET) analysis, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), and Raman spectroscopies. Cyclic voltammetry (CV) and differential pulse voltammetry (DPV) measurements were performed to analyse the electrochemical behaviour of P-rGO samples toward the detection of DA and UA. XPS confirmed the successful incorporation of P-containing functionalities (such as C-P=O and PO_x) within the P-rGO samples. SEM images revealed wrinkled graphene layers in the P-rGO samples, reflecting structural modifications obtained by hydrothermal treatment and incorporation of P-species. N₂ adsorption-desorption curves confirmed the mesoporous nature of the prepared materials. The results of CV and DPV demonstrated well-separated oxidative peaks of DA and UA confirming a successful simultaneous detection of analytes. The enhanced sensitivity toward the detection of DA and UA was observed with a higher content of P in the P-rGO structure.

4

Influence of Hydrothermal Synthesis Conditions on the Formation of Europium-Doped Gadolinium Phosphate Nanoparticles

Monika Baublytė¹, Maria Luisa Saladino^{2,3}, Enrico Paradisi⁴, Cristina Leonelli⁴, Cecilia Mortalo⁵, Ramūnas Skaudžius¹

¹*Department of Inorganic Chemistry, Vilnius University*

²*Department of Biological, Chemical and Pharmaceutical Sciences and Technologies (STEBICEF), University of Palermo*

³*Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per i Processi Chimico Fisici*

⁴*Department of Engineering "Enzo Ferrari", University of Modena and Reggio Emilia*

⁵*Institute of Condensed Matter Chemistry and Technologies for Energy National Research Council of Italy (CNR-ICMATE)*

This study investigates the formation of europium-doped gadolinium phosphate (GdPO₄:Eu) nanoparticles during hydrothermal synthesis. The research focuses on analysing different synthesis parameters and their influence on nanoparticle structure and morphology.

During synthesis, pinewood cubes were impregnated with ammonium dihydrogen phosphate (NH₄H₂PO₄) solution under vacuum conditions for 24 hours, followed by the addition of gadolinium nitrate (Gd(NO₃)₃) solution. The mixture was subjected to hydrothermal treatment at 110 °C for 18 hours in an autoclave.

The resulting solution was centrifuged, and the separated nanoparticles were examined using transmission electron microscopy (TEM), while crystallinity was evaluated by X-ray diffraction (XRD). Nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy was employed to analyse the composition of the residual solution. The results revealed that the particle sizes estimated using the Scherrer equation (40–45 nm) did not match TEM observations, where many of the particles appeared as large single crystals. This discrepancy is attributed to the fact that the Scherrer equation measures only the crystallite domain size rather than the entire nanoparticle, and additional factors such as lattice strain and defects may influence the calculations.

Furthermore, NMR spectral analysis indicated significant transformations of organic compounds during synthesis. The increase in aromatic compounds alongside the decrease in carbohydrate signals suggests lignin preservation and the degradation of hemicellulose and cellulose. These findings provide valuable insights into the interaction between organic and inorganic components in hydrothermal synthesis and help optimize synthesis parameters to achieve desired nanoparticle properties.

This study contributes to the advancement of nanotechnology by improving the understanding of the impact of organic materials on nanoparticle formation and structural properties. The insights gained may be crucial in the development of bio-ceramic materials with tailored functionalities.

5

Radiochrominio bario chlorapatito sintezė lydytų druskų metodu

Simona Bendžiūtė, Aleksej Žarkov

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Pastaruoju metu optinės medžiagos ir jų liuminescencinės savybės yra itin aktuali tema. Egzistuoja tokios neorganinės medžiagos, kurioms būdingas radiochrominis/fotochrominis efektas - grįžtamasis spalvos pokytis dėl medžiagoje susidariusių defektų, lemiančių skirtingus absorbcijos spektrus. Tokio tipo defektai atsiranda medžiagą apšvietus ultravioletine spinduliuote arba Rentgeno spinduliais. Dėl fotochrominio reiškimo atsiradimui palankios kristalinės sandaros apatito tipo junginiai yra vieni iš dominuojančių moksliniuose tyrimuose. Vienas iš tokių junginių - bario chlorapatitas ($Ba_5(PO_4)_3Cl$), kurio keramiką paveikus Rentgeno spinduliuote, stebimas spalvos pokytis, išliekantis tam tikrą laiko tarpą. Tokios medžiagos perspektyvios informacinių technologijų, medicinos, karo pramonės sričių plėtojimui bei kasdieniniame gyvenime.

Šis tyrimas fokusuojasi į $Ba_5(PO_4)_3Cl$ sintezės sąlygų įtaką radiochrominio efekto intensyvumui bei pakitusios spalvos išsilaikymui. Pirmąją tyrimų dalį sudaro sintezės sąlygų optimizavimas, atsižvelgiant į sintezės temperatūrą. Kitame tyrimų etape stebimi spalvos pokyčiai laiko atžvilgiu. Sintezės produktų fazinis grynumas bei kristalinė struktūra analizuota pasitelkiant Rentgeno spindulių difrakciją (XRD). Morfologinės savybės stebėtos naudojant skenuojantį elektronų mikroskopą (SEM).

6

Betalainų ekstrakcijos iš burokėlių atliekų sąlygų optimizavimas

Indrė Bernatavičiūtė, Aistė Galinskaitė, Rūta Gruškienė, Jolanta Sereikaitė

Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas

Dabartinėje vartotojiškoje visuomenėje augalinių medžiagų atliekos sulaukė gana didelio dėmesio dėl antrinio panaudojimo. Viena iš galimybių – atliekas pritaikyti kaip natūralių pigmentų išskyrimo šaltinį. Vieni iš tokių pigmentų yra betalainai – pigmentai, daugiausiai išgaunami iš raudonųjų burokėlių *Beta vulgaris* ir yra natūrali alternatyva sintetiniams raudoniems dažams. Šie pigmentai sėkmingai naudojami maisto, kosmetikos bei tekstilės pramonėse pirmiausia dėl savo natūralių ir netoksiškų bei hidrofiliųjų savybių ir ryškios raudonos spalvos. Taip pat jie pasižymi antimikrobinėmis, antivirusinėmis, antioksidacinėmis savybėmis, padeda palaikyti normalų kraujospūdį, smegenų veiklą bei kitas sveikatai reikalingas funkcijas. Betalainai yra betalamo rūgšties dariniai ir gali būti skirstomi į dvi grupes: raudonai violetinius betacianinus ir geltonus betaksantinus. Tai hidrofiliiniai junginiai, kurie daugiausiai kaupiami augalų epidermio audinių vakuolėse, sintetinančiose šiuos pigmentus. Norint iš ląstelių vakuolių išgauti kuo daugiau produkto, reikalingos optimalios ekstrahavimo sąlygos bei metodai. Mechaninis audinių ardymas, apimantis ląstelių sienelių medžiagos ir kitų ląstelių komponentų sunaikinimą, sudaro sąlygas pigmento išsiskyrimui, o atitinkamų tirpiklių naudojimas palengvina pigmentų difuziją į tirpalą.

Šio darbo tikslas – optimizuoti bei palyginti betalainų ekstrakcijos sąlygas iš *Cylindra* (pailgų) bei *Kahira* (apvalių) burokėlių atliekų. Pirmiausia burokėliai švariai nuplaunami, sutarkuojami ir gautos išspaudos liofilizuojamos. Siekiant optimizuoti ekstrakcijos sąlygas, leidžiančias gauti kuo didesnį betalainų kiekį, tiriami skirtingi ekstrakcijos tirpikliai (vanduo, 20, 50, 80 % etanolis ir 0,44 arba 0,88 % askorbo rūgšties vandeninis tirpalas), skirtingas liofilizuotų miltelių santykis su tirpikliu (1:20 arba 1:50, (w/v)). Taip pat išbandyti trys ekstrakcijos būdai: 1) vertikalus sukimasis, kuris atliekamas 30, 60 ar 120 minučių 60 aps./min. greičiu, 2) veikimas ultragarsiniu dezintegratoriumi 10 ar 20 minučių, bei 3) homogenizavimas skirtinguose greičio diapazonuose – 10000 arba 16000 aps./min. veikiant 1 arba 2 minutes. Ekstrakcijos efektyvumas įvertinamas pagal spektrofotometriškai nustatytą bendrą betalainų kiekį.

Lyginant dvi burokėlių veisles buvo gauti skirtingi rezultatai. Geriausios sąlygos betalainams išskirti iš *Cylindra* burokėlių buvo atliekant vertikalus sukimąsi 1 valandą naudojant 0,88% askorbo rūgštį ar 20% etanolį santykiu 1:20. Tačiau *Kahira* veislės burokėliai pasižymėjo didesne betalainų išeiga atliekant ekstrakciją homogenizatoriumi 2 minutes kai veikiama 10000 aps./min. greičiu.

7

Application of Electrochemically Synthesized Gold Nanostructures in Glucose Biosensor Development

Katazyna Blazevic¹, Natalija German², Benediktas Brasiunas¹, Gytis Spundzevicius¹, Asta Kausaite-Minkstimiene¹, Almira Ramanaviciene¹

¹*NanoTechnas - Center of Nanotechnology and Materials Science, Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University*

²*Department of Immunology and Bioelectrochemistry, State Research Institute Centre for Innovative Medicine*

Diabetes mellitus, a chronic metabolic disease commonly known as diabetes, has become one of the most significant health problems in the world. This disease is characterized by persistently high glucose concentration in the blood. Thus, sensitive, selective, fast, and user-friendly analytical tools are required (Min et al., 2025). One of the most advanced techniques for detecting glucose is electrochemical biosensors. Breakthroughs in nanoscience and nanotechnology significantly influence various scientific fields, including bioanalytical chemistry (Li et al., 2014). Gold nanostructures have attracted great interest due to their remarkable physical and chemical properties. Gold nanostructures (AuNSs) can improve the performance of glucose biosensors due to their excellent electrical conductivity and increased electron transfer rate, biocompatibility, stability, large surface area and proper enzyme immobilization (Sakalauskiene et al., 2022).

In our studies, we developed an electrochemical glucose biosensor based on a graphite rod electrode premodified with electrochemically deposited gold nanostructures (AuNS) and immobilized glucose oxidase. The influence of the constant potential values and hydrogen tetrachloroaurate(III) concentration on the morphology of the electrochemically deposited AuNSs was investigated. The performance of developed glucose biosensors was tested in the presence of soluble red-ox mediator. It was determined that the analytical signal of the glucose biosensor in the presence of soluble red-ox mediator was higher using an electrode premodified with AuNSs if compared with an electrode premodified with 13 nm gold nanoparticles or an unmodified one. Our research suggests that the AuNS-based biosensors could lead to more sensitive glucose determination, which is highly beneficial for diabetes monitoring and management.

Acknowledgment. This research has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. S-MIP-24-7.

References

- Li, N., Zhao, P., & Astruc, D. (2014). Anisotropic gold nanoparticles: Synthesis, properties, applications, and toxicity. *Angewandte Reviews*, 53(7), 1756–1789.
- Min, S., Geng, H., He, Y., & Xu, T. (2025). Minimally and non-invasive glucose monitoring: The road toward commercialization. *Sensors & Diagnostics*, 4(1), 1-27.
- Sakalauskiene, L., Popov, A., Kausaite-Minkstimiene, A., Ramanavicius, A., & Ramanaviciene, A. (2022). The impact of glucose oxidase immobilization on dendritic gold nanostructures on the performance of glucose biosensors. *Biosensors and Bioelectronics*, 210, 1–14.

8

Identification endophytic microorganisms from cranberry and lingonberry fruits by surface-enhanced Raman spectroscopy

Asta Bubnelytė¹, Dorotėja Vaitiekūnaitė², Ingrida Bružaitė¹, Valentinas Snitka³

¹ *Department of Chemistry and Bioengineering, Faculty of Fundamental Sciences, Vilnius Gediminas Technical University, Lithuania*

² *Lithuanian Research Centre for Agriculture and Forestry, Laboratory of Forest Plant Biotechnology, Institute of Forestry, Lithuania*

³ *Research Center for Microsystems and Nanotechnology, Kaunas University of Technology, Lithuania*

Endophytes are typically defined as microorganisms that inhabit the plant endosphere asymptotically. They play specific roles in plant growth promotion and protection. Endophytic microbes may help with nutrient acquisition, produce growth-enhancing hormones and fungicides.

Cranberry and lingonberry fruits are consumed worldwide. They are also widely studied for their bioactive compounds. However, their endomicrobiota is not well studied, especially endophytes contained in the berries.

Surface-Enhanced Raman Scattering Spectroscopy (SERS) is widely used for the detection of biomolecules - metabolites, nucleic acids, proteins. Also can be used for the identification of microorganisms, cell characterization and determining information about the cell wall or intracellular metabolites and molecules.

The aim of this study was to isolate endophytic microorganisms from wild-grown cranberries (*Vaccinium oxycoccus*) and lingonberries (*Vaccinium vitis-idaea*) and to identify their molecular composition using SERS.

In this study five microorganisms were isolated from cranberry fruit and one microorganism from lingonberry fruit: *Staphylococcus hominis*, *Staphylococcus caprae*, *Bacillus cereus*, *Bacillus stratosphericus* and *Bacillus xiamenensis*.

9

Magnio vitlokito sintezės tirpinimo-nusodinimo metodu parametru optimizavimas

Gabrielė Eglė Budžytė, Greta Linkaitė, Aleksej Žarkov, Aivaras Kareiva, Inga Grigoravičiūtė

Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Vilniaus universitetas

Kalcio fosfatai (KF) – medžiagos, priklausančios keraminių biomedžiagų klasei, gali būti naudojami kaulų regeneracijoje. KF pasižymi puikiomis biologinėmis savybėmis, skatina osteogenezę, yra panašios cheminės sudėties, struktūros kaip ir neorganinė natūralaus kaulo dalis. Magnio vitlokitas (Mg-WH , $\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$) yra KF, kuriame kalcis iš dalies pakeistas magniu, ir šis mineralas randamas žmogaus organizme. Sintetinio Mg-WH panaudojimas medicinoje yra ribotas, labiausiai dėl sunkumų, susijusių su šios medžiagos sinteze. Palyginti su plačiai klinikoje naudojamais hidroksiapatitu ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) ar trikalcio fosfatu ($\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$), Mg-WH išsiskiria didesniu atsparumu korozijai, vaidina svarbų vaidmenį kaulų defektų gijime, skatina osteogeninę diferenciaciją. Puikios sintetinio Mg-WH biologinės savybės, kartu su galimybe valdyti jo sintezės procesą, leidžia kurti medžiagas su optimizuotomis mechaninėmis, cheminėmis ir biologinėmis savybėmis, todėl Mg-WH tampa perspektyvia alternatyva tradicinėms biomedžiagoms. Amorfinis kalcio fosfatas (ACP), turintis nekristalinę struktūrą ir dėl to ypač reaktyvus, yra svarbus KF šeimos narys, galintis būti naudojamas pirmtaku kitų fosfato grupės medžiagų, tokių kaip Mg-WH, sintezei.

Šiame tyrime atlikta Mg-WH sintezė, pirmtaku panaudojant ACP. Terpėje, sudarytoje iš $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$, $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ bei $\text{Mg}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ tirpalų mišinio ($\text{pH} = 5,98$), vyksta ACP tirpimas, galiausiai nusėdant Mg-WH. Tyrime nagrinėjamas įvairių sintezės parametru, tokių kaip reakcijos trukmė, Mg jonų koncentracija ir terpės sudėtis, poveikis sintetinamų produktų sudėčiai. Susintetintų mėginių kristališkumas, fazinis grynumas, morfologija darbe įvertinti naudojant XRD, FTIR, bei SEM.

10

Investigation of microplastic sorption behaviour under different environmental parameters using lignin-based nanomaterials

Austėja Burbulytė, Ieva Uogintė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research

Anthropogenic human activity and consumerism cause various plastic waste to be found in the environment. Based on their size, plastics can be classified into five major categories. One of these is microplastics, which have hazardous effects on the environment (Nguyen et al., 2023). Most of these particles are found in water, while others are present in soil and the atmosphere (Gao et al., 2022). Additionally, microplastic particles can affect animals, plants, and humans. Their impact is due to specific properties such as small size (ranging from 1 μm to 5 mm), the ability to attract other toxic pollutants, and their potential to migrate through the food chain (Pham et al., 2021). Given the environmental risks associated with microplastics, it is crucial to explore safe, efficient, and sustainable methods for their removal. One potential approach is the application of the sorption process.

This study investigates the influence of different system parameters to the sorption efficiency. The study examines the dependence on time, pH, and the amounts of sorbent and sorbate. The study object is polyethylene granule with a diameter of 2 mm. Sorption efficiency dependence on time performed over time intervals ranging from 3 to 240 minutes. Other experiments were carried out in 15 min and 60 min, when one parameter changes other parameters is constant. pH investigated from 3 to 9 using HCl and NaOH. Sorbent amount investigated from 5 mg to 20 mg, meanwhile sorbate amount investigated from 5 mg to 15 mg. After sorption the sorption efficiency of lignin, lignin-magnetite was calculated.

The results indicate that the sorption efficiency of lignin and lignin-magnetite increases with time, from 3 to 240 minutes. Lignin exhibited approximately four times higher sorption efficiency compared to lignin-magnetite. The pH-dependent analysis revealed that sorption was most favourable at a neutral pH from 5 to 7. The maximum adsorption efficiency for both materials after 15 min achieved when the sorbent amount where 15 mg. While after 60 min the maximum sorption efficiency achieved when sorbent amount where 5 mg and decreases uniformly until 20 mg. Meanwhile preliminary results of sorbate amount showed that after 15 min lignin maximum sorption efficiency is in the interval from 7 mg to 11 mg, while lignin-magnetite highest sorption efficiency is near 11 mg.

References:

- Gao, W., Zhang, Y., Mo, A., Jiang, J., Liang, Y., Cao, X., & He, D. (2022). Removal of microplastics in water: Technology progress and green strategies. *Green Analytical Chemistry*, 3, 100042.
- Nguyen, L. H., Nguyen, B. S., Le, D. T., Alomara, T. S., AlMasoud, N., Ghotekar, S., Oza, R., Raizada, P., Singh, P., & Nguyen, V. H. (2023). A concept for the biotechnological minimizing of emerging plastics, micro- and nano-plastics pollutants from the environment: A review. *Environmental Research*, 216(1), 114342.
- Pham, T. H., Do, H. T., Phan Thi, L. A., Singh, P., Raizada, P., Chi-Sheng Wu, J., & Nguyen, V. H. (2021). Global challenges in microplastics: From fundamental understanding to advanced degradations toward sustainable strategies. *Chemosphere*, 267, 129275.

11

Automated Satellite-Based Estimation of Greenhouse Gas Emission Site Types (GEST) in Peatlands

Elzė Buslavičiūtė, Laurynas Jukna

Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

In recent years, there has been an increase in peatland restoration projects worldwide. One of the main goals of restoring peatlands is to revive their ability to store carbon. The Greenhouse Gas Emission Site Type (GEST) approach provides an alternative method for assessing greenhouse gas (GHG) emissions in peatlands. This method classifies emission site types based on a combination of plant species, which indicate long-term water table depth, peat type, and nutrient status.

Despite its proven utility, peatlands are typically classified on-site, and no machine-learning methods have yet been applied to GEST classification. This study aimed to evaluate the potential of remote sensing-based machine learning models for predicting GEST classes in restored Lithuanian peatlands.

We trained models using data from four Lithuanian peatlands (Amalvas, Plinkšiai, Pūščia, and Sachara), incorporating eight generalized GEST classes. Random Forest (RF) and Artificial Neural Network (ANN) models were used to predict GEST based on eight SAR and optical remote sensing indices and bands (NDVI, NDWI, SWIR, VSDI, VV, VH, RVI, and DpRVlc). To address the class imbalance, we applied different techniques, including B-SMOTE for the RF model and a focal loss function for the ANN model. Feature importance analysis indicated a higher contribution of optical indices compared to SAR. Overall, RF handled class imbalance better than ANN, achieving an F1-score of 0.73 for multiclass classification and 0.9 for binary forest vs. non-forest classification.

12

Growth of Yb:CALGO crystal by optical floating zone method

Domantas Černius¹, Monika Skruodienė^{2,3}, Anatolijs Šarakovskis³, Ekaterina Pomjakushina⁴, Ramūnas Skaudžius¹

¹ *Department of Inorganic Chemistry, Vilnius University*

² *Department of Chemical Engineering and Technology, Center for Physical Sciences and Technology*

³ *Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

⁴ *Laboratory for Multiscale Materials Experiments, Paul Scherrer Institut, Switzerland*

The broad and smooth emission bandwidth of ytterbium-doped calcium gadolinium aluminum oxide (Yb:CaGdAlO₄; Yb:CALGO) crystals makes them essential for developing high-power and ultrashort pulse laser technologies. Yb:CALGO is a good material because of exceptionally broad gain bandwidth. This allows to amplify ultrashort, femtosecond pulses. The high thermal conductivity of Yb:CALGO also guarantees efficient heat dissipation during high-power operation, preserving performance stability. Because of these characteristics, Yb:CALGO crystals are perfect for industrial operations requiring a high degree of power and precision, as well as scientific research and medical applications.

Yb:CALGO powder was synthesized from corresponding metal nitrates using the sol-gel method. The phase purity of the powder samples was confirmed using X-ray diffraction (XRD) analysis. The powder was pressed into rods and then used to grow the crystal by the optical floating zone (OFZ) method. Scanning electron microscopy (SEM) images were taken to determine the morphology of the crystal. SEM images revealed defects on the crystal cut surface. On the other hand, it showed a homogenous element distribution. ICP-OES measurement showed that both the powder and the single-crystal had correct stoichiometry, indicating that the melting process did not alter it. The luminescence properties were also investigated, demonstrating the typical emission and excitation spectrum corresponding to ytterbium electron transitions.

This study demonstrated that the OFZ method is suitable for growing Yb:CALGO crystals. However, the crystal exhibited some defects, making it unsuitable for practical use as a laser core. This highlights the need for further research to optimize the crystal growth process.

13

Kapiliarinės elektroforezės panaudojimas nizino pernašos sistemų proteolitinio stabilumo tyrimui

Agnė Česnulevičiūtė, Rūta Gruškienė, Justė Čeičytė, Jolanta Sereikaitė

Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas

Nizinas – mažas peptidas, kurio molekulinė masė 3,5kDa, gaunamas iš *Lactococcus lactis*. Šis peptidas sulaukė didelio dėmesio dėl savo plataus antimikrobinio poveikio prieš gram-teigiamas bakterijas. Jis yra geras kandidatas maisto pramonėje, vaistams bei sveikatos reikmėms, tačiau nizino taikymas gali būti apsunkintas dėl jo jautrumo tokiems aplinkos veiksniams kaip pH, temperatūros svyravimai bei proteolitinis skilimas. Norint išvengti nizino jautrumo aplinkos veiksniams, pasitelkiamas įkapsuliavimas – biologiškai aktyvių medžiagų įterpimas į apsauginės medžiagos matricą, ar apgaubimas jos apvalkalu.

Kapiliarinė zonų elektroforezė (KZE) tai metodas, skirtas molekulėms atskirti pagal jų dydį ir krūvį, veikiant elektriniam laukui. Ji pasižymi greita analize, mažu mėginių poreikiu ir didele skiriamąja geba, todėl yra plačiai naudojama biologinių mišinių, fermentinių reakcijų ir baltymų degradacijos procesų tyrimams.

Šio tyrimo tikslas buvo paruošti nizino pernašos sistemas naudojant skirtingus biopolimerus kaip apsaugines medžiagas, ir pasitelkus KZE palyginti sistemose esančio nizino atsparumą proteolizei.

Nizino kapsuliavimui buvo naudojami keturi skirtingi biopolimerai: fukoidanas, pektinai su žemu ir aukštu esterifikacijos laipsniu bei pektino rūgštis. Kapsuliavimas atliekamas kompleksavimo būdu, visuose dalelių mėginiuose galutinė tiek nizino, tiek biopolimerų koncentracija siekia 0,4 mg/ml, o pH vertė svyruoja tarp 4 ir 6. Nizino mėginių proteolitiniam stabilumui įvertinti pasirinktos trys skirtingos proteazės, kurių kiekvienai būdingos specifinės optimalios pH vertės ir skilimo savybės: proteazė XIII iš *Aspergillus saitoi*, proteazė iš *Rhizopus chinensis* bei papainas, gaunamas iš papajos latekso. Tyrimai atliekami tiek su tiek laisvo, tiek biopolimeruose įkapsuliuoto nizino tirpalais. Hidrolizės produktų palyginimui taikomas kapiliarinės zonų elektroforezės (KZE) metodas. Elektroferogramų palyginimas, analizuojant degradacijos produktams priskiriamų susidariusių smailių plotus, leidžia įvertinti nizino stabilumą.

Tyrimas parodė, jog nizino įterpimas į polimero matricą pagerina jo proteolitinį stabilumą. Taip pat KZE tyrimo metu nustatyta, kad nizino kapsuliavimui naudojamas fukoidanas, lyginant su pektiniais, nepriklausomai nuo jų esterifikacijos laipsnio, suteikia geresnę apsaugą prieš tyrimui naudotas proteazes.

14

Cd²⁺ jonų koncentracijos nustatymas naudojant biologinį jutiklį, paremtą Berlyno mėlynuoju ir katalaze

Narvydas Dėnas^{1,2}, Povilas Virbickas¹, Aušra Valiūnienė^{1,2}

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras*

Cd²⁺ jonai yra toksiški žmogui ir visai gyvenamajai gamtai. Natūralūs procesai, tokie kaip uolienuų irimas ir antropogeninė veikla (pvz., metalurgija) gali padidinti Cd²⁺ jonų koncentraciją virš leistinų ribų paviršiniame, geriamajame, gruntiniame vandenyje ir dirvožemyje. Dėl šių priežasčių, Cd²⁺ jonų koncentracijos tyrimai yra svarbūs siekiant apsaugoti žmones ir ekosistemą nuo toksiško Cd²⁺ jonų poveikio. Šiame darbe buvo gaminamas ir tiriamas Berlyno mėlynojo ir katalazės pagrindu veikiantis jutiklis, galintis nustatyti Cd²⁺ koncentracijas mėginyje.

Tyrimai atliekami naudojant 3-jų elektrodų sistemą susidedančią iš: fluoru legiruoto alavo oksido stiklo plokštelės, padengtos Berlyno mėlynuoju ir katalaze, darbinio elektrodo, palyginamojo Ag|AgCl, KCl_{sat.} elektrodo ir platinos plokštelės pagalbinio elektrodo. Chronoamperometriniai ir elektrocheminio impedanso spektroskopijos (EIS) tyrimai buvo atliekami naudojant 0,2V potencialų skirtumą. Tuo tarpu, atliekant ciklinės voltamperometrijos matavimus, potencialas buvo skleidžiamas intervale nuo 0 V iki 0,45 V. Visi matavimai buvo atliekami 10 mmol/L K₂HPO₄, pH 4,5 buferiniame tirpale, iš pradžių į jį pridedant vandenilio peroksido, tada reikalingą kiekį 2M CdSO₄ tirpalo.

Buvo gauta, kad Cd²⁺ jonų koncentraciją galima nustatyti tiek amperometrijos, tiek ciklinės voltamperometrijos, tiek EIS metodais, tačiau jų tiesinių intervalų ribos skiriasi. Amperometriniu metodu buvo gautas plačiausias tiesinės koncentracijos intervalas – nuo 10 mM iki 127 mM, su koreliacijos koeficiento kvadrato verte 0,983. EIS metodu gautas siauresnis intervalas – nuo 64,5 mM iki 261 mM, o koreliacijos koeficiento kvadratas sumažėjo iki 0,980. Prasčiausiomis savybėmis Cd²⁺ jonų koncentracijos nustatymui pasižymėjo CV metodas, kurį naudojant buvo gautas tiesinės koncentracijos intervalas nuo 8,3 mM iki 48,8 mM, o šio metodo tiesinės koreliacijos koeficientas buvo 0,978.

15

Development and investigation of in-situ NMR probe

Aurimas Dubauskas¹, Jurgis Pilipavičius^{2,3}, Linas Vilčiauskas^{2,3}, Vytautas Klimavičius¹

¹ Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University

² Institute of Chemistry, Vilnius University

³ Center for Physical Sciences and Technology (FTMC)

Transition towards sustainable and renewable energy requires development of energy storage technologies such as Na-ion based batteries. Promising sodium ion batteries (SIB) are aqueous NASICON (Na Super Ionic CONductor) based batteries. NASICON materials feature a stable three-dimensional crystal structure, good ionic conductivity, and thermal stability. NASICON can be used as anodes, cathodes, solid electrolytes, or electrode coating materials in battery development. To efficiently and successfully use these technologies, it is necessary to understand the chemical processes that limit the effective usage time of the batteries. Solid-state Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy is a powerful method that can assist in the study of these processes. NMR spectroscopy is already used in battery research, but most of the applied methods are ex-situ experiments, during which the batteries are disassembled, and the environment of the materials under study is altered. To avoid this, in-situ NMR methods can be applied, where measurements are carried out without disassembling the electrochemical device.

The aim of this study was to modify the commercial 5 mm wideline NMR probe that 11 mm *in-situ* cell would be compatible, tune the NMR probe to ³¹P and ²³Na resonances and test its performance using an aqueous NASICON based battery.

In this study two NMR probe setups with distinct electrical circuits for impedance matching were created: shunt inductive and series capacitive matching circuits. Three additional channels were introduced for charging and discharging (cycling) the battery. Nutation curves and spectra were registered for the purpose of NMR probe setups comparison. Shunt inductive NMR probe setup was tested by measuring ³¹P spectra of aqueous NASICON based battery during charge–discharge cycling. Registered working electrode spectra of time dependent voltage showed when parasitic competing oxygen evolution reaction becomes significant. By examining NTP (NaTi₂(PO₄)₃) ³¹P spectra of different cell configurations, and by comparing nutation curves of different NMR probe setups adequate NMR probe and cell configurations were determined for aqueous NASICON battery in-situ research.

16

Lantanoidais legiruoto bario borato analizė

Marius Dzvinka, Martynas Misevičius

Vilniaus Universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

β -bario boratas turi platų pritaikymą lazeriuose dėl savo netiesinių optinių savybių. Šiame darbe bus nagrinėjamos lantanoidais legiruoto β -bario borato optinės savybės.

Mėginių sintezė buvo vykdoma kietafazių reakcijų metodu. Prieš sintezę stochiometriniai kiekiai reagentų (boro rūgštis, bario karbonatas, lantanoidų oksidai arba nitratai) buvo kruopščiai sumaišomi agatinėje grūstuvėje su keliais mililitrais acetono (acetonas palengvina mišinio homogenizavimą). Šie mišiniai kaitinami ore 800 °C temperatūroje du kartus.

Gauti milteliai visų pirma buvo ištirti rentgeno spindulių difraktometru, jog būtų galima įvertinti mėginių fazinį grynumą. Mėginiai su daugiau nei 8% lantanoido turėjo α -bario borato fazės priemaišų. Šios priemaišos kiekis nepriklausė nuo naudojamo lantanoido, tik nuo jo koncentracijos. Esant mažesnėms lantanoido koncentracijoms priemaišinių fazių smailių nebuvo pastebėta. Naudojantis gautomis difraktogramomis buvo patikslintas β -bario borato kristalinės gardelės modelis Rytveldo (Rietveld) metodu. Mėginių fotoluminescencinės savybės buvo ištirtos spektrofluorimetru. Europiu (III) legiruoti mėginiai pasižymėjo įprasta liuminescencija raudonojoje šviesos spektro srityje – intensyviausia emisijos smailė ties 702 nm bangos ilgiu (sužadinta 393 nm bangos ilgiu).

17

Aukštynverte liuminescencija pasižyminčių nanodalelių kūrimas taikymui teranostikoje

Eglė Ežerskytė^{1,2}, Greta Butkienė², Artūras Katelnikovas¹, Vaidas Klimkevičius^{1,2}

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Nacionalinio vėžio instituto Biomedicininės fizikos laboratorija*

Šio tyrimo tikslas – sukurti aukštynverte liuminescencija pasižyminčius daugiafunkcinius nanožymeklius, kurie galėtų būti pritaikomi vėžio teranostikoje (diagnostikoje ir terapijoje). Terminio konusodinimo metodu buvo susintetintos įvairiais lantanoidų jonais legiruotos branduolio-dvigubo lukšto NaGdF₄ nanodalelės. Jų struktūrinės savybės ištirtos Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM) ir dinaminės šviesos sklaidos (DLS) metodais, o optinės charakteristikos įvertintos naudojant Edinburgh Instruments FLS980 modulinį spektrofluorimetą.

Struktūrinė analizė parodė, kad susintetintos nanodalelės yra monodispersiškos, jų ilgis yra ~45 nm, plotis ~27 nm, o kristalinė struktūra – heksagoninė. Spektroskopiniai tyrimai atskleidė, kad šiuos junginius galima sužadinti tiek artimąja ultravioletine (NUV), tiek artimąja infraraudonąja (NIR) spinduliuote, o jų emisija – daugiaspalvė (emisijos smailės išsidėsčiusios ne tik regimojoje, bet ir NUV bei NIR srityse). Šių nanodalelių daugiaspalvė liuminescencija teranostikoje galėtų būti taikoma įvairiai: biovaizdinimui (emisijos smailės regimojoje ir NIR srityse), fotodinaminei terapijai (emisijos smailės regimojoje srityje) ir net medicininių preparatų, prijungtų prie nanodalelių paviršiaus, tiksliniam atpalaidavimui (emisijos smailės NUV srityje). Be to, branduolio-dvigubo lukšto nanodalelės pasižymėjo puikiu optiniu ir koloidiniu stabilumu tiek organinėje, tiek vandeninėje terpėje, ir buvo biosuderinamos – pasižymėjo labai mažu toksiškumu.

Dėl išvardintų priežasčių šios nanodalelės gali reikšmingai prisidėti tobulinant vėžinių susirgimų diagnostikos tikslumą ir įvairių terapijos metodų efektyvų taikymą.

β-karoteno-inulino-laktoferino dalelių sintezė

Inga Gabriūnaitė^{1,2}, Rūta Gruškienė¹, Tatjana Kavleiskaja², Jolanta Sereikaitė¹

¹ *Gedimino technikos universiteto Fundamentinių mokslų fakulteto Molekulinės biotechnologijos laboratorija,*

² *Vilniaus universiteto, Chemijos ir geomokslų fakulteto, Chemijos institutas,*

β-karotenas (CAR) yra lipofilinė, raudonos spalvos organinė medžiaga, randama įvairiuose vaisiuose ir daržovėse. Tai labiausiai paplitęs augaluose randamas karotenoidas, žmogaus organizme jis virsta vitaminu A. Todėl tai yra labai svarbi maistinė medžiaga, nes gali užkirsti kelią vėžiui ar su amžiumi susijusiam regėjimo silpnėjimui. Tačiau šiais laikais žmonės vartoja nepakankamai vaisių ir daržovių, dėl to yra padidėjusi rizika įvairių ligų atsiradimui. CAR ir kitas maistines medžiagas būtų galima įtraukti į kitų, dažniau vartojamų maisto produktų sudėtį, tačiau CAR yra nestabilus kambario temperatūroje ir šviesoje, be to, jis netirpus vandenyje. Todėl CAR padengimas įvairiomis medžiagomis galėtų būti priimtinas sprendimas CAR kokybei pagerinti. Šio tyrimo metu siūlome padengti CAR polisacharidais ir baltymais, ypač inulinu ir laktoferinu. Šios medžiagos turėtų ne tik pagerinti CAR stabilumą, bet ir tirpumą vandenyje bei pagerinti įkapsuliuoto CAR savybes, derinant naujas inulino ir laktoferino savybes.

Inulinas yra labai gerai žinomas prebiotikas, turintis saldų skonį. Jis gali pagerinti žarnyno sveikatą ir užkirsti kelią diabetui, nes nedidina cukraus kiekio kraujyje. Laktoferinas yra geležį surišantis glikoproteinas, randamas žinduolių piene. Jis turi antibakterinių ir priešgrybelinių savybių.

CAR buvo kompleksuojamas su inulinu, lėtai į karštą inulino tirpalą vandenyje pridėdant CAR tirpalo acetone ir po to acetoną išgarinant. Tada į CAR ir inulino tirpalą buvo lašinamas laktoferinas, pH reguliuojamas iki 4 arba 8 ir purtoma per naktį. Po to buvo atlikti dinaminės šviesos sklaidos matavimai ir nustatytas antioksidacinis aktyvumas bei dalelių stabilumas.

Apibendrinant, buvo pagamintos CAR-inulino-laktoferino dalelės, nustatyta optimali inulino ir laktoferino koncentracija. Iš padidėjusio CAR stabilumo galima daryti išvadą, kad CAR-inulino-laktoferino daleles galima pritaikyti įterpimui į kitus maisto produktus, taip pagerinat jų maistinę vertę.

Padėka. Šis tyrimas finansuotas Lietuvos mokslų tarybos projekto S-PD-24-55 lėšomis.

19

Sluoksniuoti dvigubi hidroksidai: sintezės kinetikos tyrimas ir jų taikymas biomedicinoje

Neringa Gailiūtė, Deimantas Šmilgelskas, Denis Sokol

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Sluoksniuoti dvigubi hidroksidai (SDH) yra sluoksniuotų junginių klasė, kuri dar žinoma kaip anijoniniai moliai arba hidrotalcito tipo junginiai. Pastaruoju metu SDH junginiai sulaukė daug dėmesio dėl jų daugiafunkcinės struktūros, sąlyginai lengvos sintezės, mažo toksiškumo, gero biologinio suderinamumo ir plataus spektro potencialių panaudojimų. SDH pasižymi dideliu paviršiaus plotu bei galimybe į tarp sluoksnius įterpti įvairias organinės ir neorganinės kilmės anijonines medžiagas. Šios modifikacijos leidžia į SDH žiūrėti kaip į potencialias vaistų pernašos sistemas, su galimybe įterpti vaistų molekules į tarp sluoksnių ir kontroliuoti jų išsiskyrimą organizme. Tokia sistema potencialiai galėtų padėti mažai tirpių ar nestabilių vaistų išsiskyrimui bei sumažinti reikalingą vaisto dozę. Norint sukurti efektyvią SDH vaistų pernašos sistemą, pirmaisiai reikia rasti optimalias SDH sintezės ir tarp sluoksnyje esančių anijonų įterpimo/pakeitimo sąlygas.

Šio mokslinio darbo vienas iš tikslų – ištirti bendrojo nusodinimo metodu gaunamus SDH junginius, surandant optimaliausias sintezės sąlygas. SDH susidarymui didelę įtaką turi pH vertė, kurioje atliekama junginio sintezė. Netinkamas tirpalo pH gali lemti ne tik blogą SDH grynumą ar jo nesiformavimą, bet ir papildomų priemaišų susidarymą. Bendrojo nusodinimo metodu skirtinguose pH intervaluose (nuo 8 iki 12 ±0.2) atliktos $Zn_2Al_1-CO_3$, $Mg_2Al_1-CO_3$, $Cu_2Al_1-CO_3$ ir $Ni_2Fe_1-CO_3$ SDH sintezės. Reakcijos atliktos naudojant atitinkamus metalų nitratų tirpalus ir skirtingas bazes, priklausomai nuo norimo sintezės pH. Susidarę kristalai filtruojami, praplaunami vandeniui iki neutralaus pH bei džiovinami krosnyje 80°C temperatūroje 24 val.

Gautų SDH kristalinė struktūra ir morfologinės savybės buvo tiriamos Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) ir skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) metodais. Iš gautų XRD duomenų nustatytos optimaliausios pH vertės SDH sintezei: $Zn_2Al_1-CO_3$ – pH~10-12, $Mg_2Al_1-CO_3$ – pH~10-12, $Cu_2Al_1-CO_3$ – pH~8-9 ir $Ni_2Fe_1-CO_3$ – pH~9-10.

20

Bendruomeniniai daržai kaip kasdienio urbanizmo apraiška Plungės ir Grigiškių miestuose

Adomas Gedvilas, Dovilė Krupickaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Bendruomeninė daržininkystė yra viena iš neformalių veiklų Lietuvos ir pasaulio miestuose. Neformalios veiklos dažnai atsiduria už miesto planavimo ribų, todėl daug įvairių miestų planavimo koncepcijų yra skirtos neformaliems reiškiniams: jų skatinimui ir įtraukimui į miesto planavimo politiką. Viena iš jų – kasdienis urbanizmas. Tiek kasdienis urbanizmas, tiek bendruomeniniai daržai Lietuvoje plačiau nenagrinėti, todėl šio darbo tikslas yra atskleisti bendruomeninius daržus kaip kasdienio urbanizmo apraišką Plungės ir Grigiškių miestuose. Tikslui pasiekti atlikta literatūros, statistinė, kartografinė, teisinių dokumentų, lauko tyrimo duomenų analizė bei 4 interviu su vietos valdžios atstovais.

Nustatyta, jog kasdienio urbanizmo samprata apjungia du požiūrius į urbanizmą: urbanizmą kaip reiškinį ir urbanizmą kaip planavimo idėją, kadangi ji ne tik pabrėžia kasdienybės svarbą mieste, bet ir pateikia įrankius skirtus jos įprasminimui miesto planavime. Vienas iš tokių įrankių – kasdienės erdvės apibrėžimas, kuris nurodo viešojo kasdienio gyvenimo vyksmo vietą. Neformalūs bendruomeniniai daržai taip pat gali būti laikomi kasdiene erdve, kadangi jie pasižymi įvairiais gyventojų socialiniais ryšiais, tuo pačiu jie parodo gyventojų kūrybiškumą pertvarkant miesto aplinką pagal savo poreikius. Neformalūs bendruomeniniai daržai Plungėje ir Grigiškėse pradėjo kurtis sovietmečiu. Jų atsiradimą galime sieti su naujų miesto gyventojų iš kaimo vietovių atsineštu identitetu bei nepatenkinamu gyventojų aprūpinimu maisto produktais. Bendruomeniniai daržai atsirado ir išliko įvairiose miestų periferinėse vietose, kurios nebuvo transformuotos dėl įvairių politinių ir socioekonominių, planavimo ar techninės infrastruktūros bei gamtinių apribojimų nulemtų priežasčių, todėl abiejuose miestuose jie nėra reglamentuoti, nefiksuoti miesto planavimo dokumentuose, tačiau požiūris į juos skiriasi. Plungėje bendruomeninė daržininkystė nėra matoma kaip savaime egzistuoti galintis reiškinys. Tuo tarpu Grigiškėse ji vertinama pozityviai, kadangi ji atspindi gyventojų kūrybiškumą ir saviraišką. Tai lemia, jog jų raidos perspektyvos skiriasi. Plungėje bendruomeniniams daržams kyla pavojaus po truputį nykti, kadangi didžioji dalis jų plyti ant urbanizuotų ar numatomų urbanizuoti žemės plotų. Šiame mieste į bendruomeninę daržininkystę nėra žiūrimą per kasdienio urbanizmo prizmę, ji suvokiama kaip galimas institucionalizuoti reiškinys. Didžioji dalis Grigiškių neformaliųjų bendruomeninių daržų turi geresnę perspektyvą išlikti miesto audinyje, kadangi didelė dalis jų plyti ant želdynų paskirties žemės, seniūnija juos palaiko. Tuo pačiu yra pastebimas didėjantis Vilniaus miesto savivaldybės dėmesys bendruomeninei daržininkystei, kuris atsiskleidžia per siekį bendruomeninius daržus įtraukti į viešųjų erdvių projektus ar skatinant bendruomenines organizacijas užsiimti tokia veikla. Visi šie minėti aspektai Plungėje ir Grigiškėse turi būti vertinami atsižvelgiant į senstančių bendruomeninių daržų naudotojų kontekstą.

21

Paviršiaus plazmonų rezonanso imuninis jutiklis SARS-CoV-2 anti-RBD antikūnų nustatymui

Agnė Giniūnaitė, Almira Ramanavičienė, Asta Kaušaitė-Minkštimienė

NanoTechnas – Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

2019 m. pabaigoje Uhane kilęs SARS-CoV-2 virusas sukėlė pasaulinę koronaviruso pandemiją. Norint įvertinti įgytą imunitetą šiam virusui, reikalingos diagnostikos priemonės, kuriomis būtų galima greitai, veiksmingai ir tiksliai nustatyti antikūnus prieš šį virusą. SARS-CoV-2 struktūra susideda iš keturių pagrindinių baltymų: smaigalio (S-baltymas), apvalkalo, membranos ir nukleokapsidės. S-baltymo struktūroje yra trumpas imunogeninis fragmentas, vadinamas receptorių surišančiu domenu (RBD) (SARS-CoV-2-RBD), kuris atlieka lemiamą vaidmenį inicijuojant infekciją. Tarp įvairių tyrimo metodų, paviršiaus plazmonų rezonanso (PPR) imuniniai jutikliai yra plačiai naudojami įvairių virusų bei bakterinių patogenų aptikimui ir yra perspektyvūs antikūnų prieš SARS-CoV-2 viruso baltymus kiekybiniam nustatymui. Patraukliausi yra tiesioginės detekcijos formatu veikiantys PPR imuniniai jutikliai, nes jiems nėra reikalingas žymių naudojimas. Tačiau jų jautris dažnai yra nepakankamas. Norint jį padidinti, dažnai taikomas netiesioginės detekcijos formatus ir signalo stiprinimas naudojant nanomedžiagas kaip didelės masės žymes. Nors šiam tikslui gali būti naudojamos įvairios nanomedžiagos, pavyzdžiui, anglies nanovamzdėliai, magnetinės nanodalelės ar kvantiniai taškai, dažniausiai naudojamos tauriųjų metalų nanodalelės, ypač aukso (AuND). Dėl gerokai didesnės masės, palyginti su įprastomis molekulėmis, nanomedžiagos sukelia daug didesnę lūžio rodiklio pokytį, o dėl to gerokai padidėja imuninio jutiklio analizinis signalas ir jautris.

Šiame darbe bus pristatytas PPR imuninis jutiklis, skirtas kiekybinei antikūnų prieš SARS-CoV-2-RBD (anti-RBD) analizei. Imuninis jutiklis, veikiantis tiesioginės detekcijos formatu, galėjo nustatyti anti-RBD koncentraciją nuo 0,27 iki 66,60 nmol/l, LOD buvo 0,27 nmol/l, o LOQ – 0,47 nmol/l. Taikant netiesioginio detekcijos formato sluoksniuotą metodą bei biotintų antrinių antikūnų prieš IgG ir streptavidinu modifikuotų AuND konjugatus, imuninis jutiklis galėjo aptikti anti-RBD antikūnus 0,043 – 10,66 nmol/l koncentracijos diapazone, LOD buvo 0,043 nmol/l, o LOQ – 0,057 nmol/l. Jis taip pat pasižymėjo geru analizinio signalo pakartojamumu, atkuriamumu ir stabilumu. Imuninio jutiklio tinkamumas realių mėginių analizei buvo patvirtintas nustatant anti-RBD kiekį žmogaus serumo mėginiuose.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-22-46.

22

4-((2-benzimidazolil)tio)rezorcinolio sintezės būdų paieška

Gabija Griškonytė, Ieva Žutautė, Rita Bukšnaitienė, Algirdas Brukštus

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Hsp90 – tai šiluminio šoko baltymas, kurio slopinimas turi daug potencialo vėžinių susirgimų gydyme. Hsp90 brandina, aktyvina ir stabilizuoja daugiau nei 400 klientų baltymų, taip pat jis svarbus tokiuose procesuose kaip ląstelių ciklo kontrolė, baltymų sulankstymas ir degradacija. Įvairios ligos tarp jų ir vėžys yra siejamos su šio baltymo stabilumu ir per didelę ekspresiją, kuri įtakoja vėžio vystymąsi. Tyrimų metu pastebėti skirtumai tarp Hsp90 normaliose ląstelėse ir vėžinėse ląstelėse padarė jį tiksliniu šaperoniniu baltymu vėžio gydyme. Su įvairiais Hsp90 slopikliais yra atlikta klinikinių tyrimų, tačiau kol kas nei vienas iš junginių nebuvo patvirtintas kaip monoterapinis vaistas. Šio darbo metu siekiama susintetinti 4-((2-benzimidazolil)tio)rezorcinolius, kurie galėtų būti potencialūs Hsp90 slopikliai ir prisidėtų kovoje prieš vėžį.

Siekiant iširti benzimidazolo įtaką rezorcinolinio slopinimo efektyvumui, buvo nuspręsta šiuos fragmentus sujungti tiesiogiai, per sierą bei tiometileninį tiltelį. Šiam tikslui pasiekti pradiniu junginiu buvo pasirinktas 2,4-dihidroksibenzaldehidas. Norint išvengti šalutinių reakcijų, rezorcinolio hirdoksigrupės buvo apsaugotos įvedant metoksipakaitus. Tiesioginiam sujungimui pasiekti aldehidas buvo kondensuojamas su diaminobenzenu. Tuo tarpu tiometileniniui tilteliui gauti, benzaldehidas buvo redukuotas iki alkoholio, paskui įvedant gerai nueinančią grupę. Tuo tarpu fragmentų sujungimas per sierą buvo atliekamas Ulmanno reakcijos pagalba iš atitinkamo jodbenzeno ir tiobenzimidazolo. Reakcijų sąlygos buvo optimizuotos su analogiškais lengvai prieinamais rezorcinoliniais dariniais.

Lazerinis spausdinimas YAG:Ce 3D mikrostruktūrų

Artūr Harnik¹, Robertas Virkėtis², Dominikas Dapšys¹, Dimitra Ladika¹, Greta Merkininkaitė², Simas Šakirzanovas², Mangirdas Malinauskas²

¹Vilniaus universiteto, Fizikos fakulteto, Lazerinių tyrimų centras

²Vilniaus universiteto, Chemijos ir geomokslų fakulteto, Chemijos institutas

Itrio aliuminio granatas (YAG) yra naudojamas kaip lazerio aktyvioji terpė jau daugiau nei 60 metų. Czochralskio monokristalų sintezės metodas yra naudojamas kaip pagrindinis YAG monokristalų gamybos būdas. Nors polikristalinis YAG turi daugiau sintezės metodų, skirtų jo gamybai, nė vienas iš jų nėra tinkamas sudėtingų 3D YAG mikrostruktūrų gamybai. Šiame darbe siekiama įrodyti, kad naudojant dviejų fotonų polimerizacijos lazerinio rašymo 3D spausdinimą galima gauti liuminescencinės polikristalinės 3D YAG:Ce mikrostruktūros po kalcinavimo etapo.

YAG ir YAG:Ce pirmtakų 3D struktūros buvo atspausdintos su Nanofactory (UAB Femtika) femtosekundinio lazerio braižymo litografinė sistema naudojant dvi-fotonės polimerizacijos 3D spausdinimo metodą tam, kad pasiekti didesnę raišką. 3D mikrostruktūroms gaminti buvo naudojamas 517 nm bangos ilgio ir 144 fs impulse trukmės lazeris. Norint iširti ir nustatyti optimaliausius šiai medžiagai gamybos parametrus, keičiant ekspozicijos galią (intensyvumą) ir braižymo laiką (skenavimo greitį), buvo atspausdintos 3D rąstų konstrukcijų matricos. Po gamybos, polimerizuoti YAG / YAG:Ce pirmtakų mėginiai buvo panardinti į etanolį, kad ištirpinti nepolimerizuotą dervą. Po to mėginiai pirmiausia buvo kaitinami 800 °C temperatūroje, kad būtų pašalintos visos organinės medžiagos, o vėliau - 1600 °C temperatūroje, kad būtų gautas grynas YAG / YAG:Ce. Pirmajam kaitinimo etapui reikalinga temperatūra buvo nustatyta termogravimetrinės analizės metodu. Kalcinuotų YAG/YAG:Ce mėginių grynumas taip pat buvo įvertintas naudojant monokristalinės rentgeno spinduliuotės difrakcijos (SC-XRD) analizės metodą. Tai buvo padaryta gavus rentgeno spindulių difrakcijos duomenis – Debye-Scherrer žiedus ir tuos duomenis integruojant su Bruker Apex 3 programinę įrangą. Galiausiai buvo atlikti YAG:Ce liuminescencijos matavimai, parodantys Ce koncentracijos priklausomybę nuo liuminescencijos intensyvumo.

Padėka. Šis tyrimas atliktas pagal Lietuvos Respublikos švietimo, mokslo ir sporto ministerijos programą „Universitetų meistriškumo iniciatyva“ ("Universities Excellence Initiative") pagal sutartį su Lietuvos mokslo taryba (projekto Nr. S-A-UEI-23-6) ir finansuotas Vilniaus universiteto Mokslo skatinimo fondo (projekto Nr. MSF-JM-10/2024).

Pirimidino darinių su oksadiazolo ir oksatiadiazolo fragmentais sintezė ir HDAC slopinantis aktyvumas

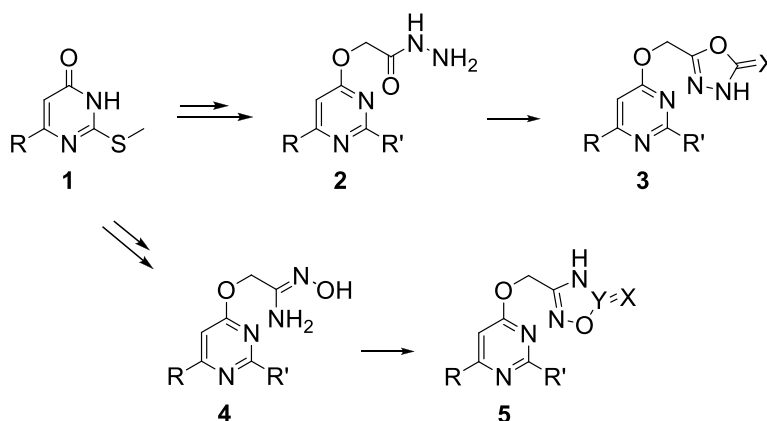
Virginija Jakubkienė¹, Ieva Labalaukytė¹, Markus Schweipert², Franz-Josef Meyer-Almes², Sigitas Tumkevičius¹

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

²Darmštato (Vokietija) Taikomųjų mokslų universiteto Cheminės inžinerijos ir biotechnologijų katedra

Histonų deacetilazės (HDAC) yra fermentų grupė, kuri reguliuoja genų ekspresiją, pašalindama acetilgrupę iš lizino liekanų histonuose. Pagal savo struktūrą HDAC skirstomos į 18 izoformų. Tyrimais įrodyta, kad histonų deacetilazių slopinimas gali sumažinti ar net sustabdyti ląstelių dalijimosi ciklą ir taip mažinti vėžinių ląstelių proliferaciją. Šiuo metu žinomi penki HDAC slopikliai, naudojami vėžinių susirgimų gydymui, o trys iš jų – vorinostatas, belinostatas ir panobinostatas – yra hidroksamo rūgšties grupę (–CONHOH) turintys junginiai. Tokio tipo HDAC slopikliai vadinami hidroksamatais, o jų aktyvumas pagrįstas sugebėjimu sudaryti chelatus su Zn²⁺ jonais. Tačiau hidroksamato grupė gali koordinuotis ir su kitais divalenciais katijonais, todėl tokie slopikliai nėra selektyvūs, be to, yra duomenų ir apie jų mutageniškumą. Dėl šių priežasčių paskutiniaisiais metais HDAC slopiklių paieška nukrypo į junginius, kuriuose cinką surišančia grupe būtų ne hidroksamo rūgšties liekana. Šiuo požiūriu oksadiazolo ir oksatiadiazolo ciklai sulaukia susidomėjimo kaip perspektyvūs galintys cinką surišti struktūriniai fragmentai. Iš kitos pusės, dėl savo gebėjimo sąveikauti su hidrofobine fermento kišene pirimidino žiedas yra puikus HDAC slopiklių struktūros komponentas.

Šio darbo tikslas buvo susintetinti naujus pirimidino darinius su 1,3,4-oksadiazolo, 1,2,4-oksadiazolo ir 1,2,3,5-oksatiadiazolo ciklais HDAC4 ir HDAC8 izoformas slopinančio aktyvumo tyrimams.



Pirimidino ir 1,3,4-oksadiazolo dariniai **3** sintetinti iš atitinkamų 4(3*H*)-pirimidinonų **1** per tarpinius hidrazidus **2**, o pirimidino ir 1,2,4-oksadiazolo bei 1,2,3,5-oksatiadiazolo dariniai **5** – per tarpinius amidoksimus **4**. Slopinamojo aktyvumo prieš HDAC4 ir HDAC8 izoformas tyrimas parodė, kad kai kurie susintetinti junginiai gali būti perspektyvūs kandidatai tolesnėje nehidroksamatinio tipo HDAC inhibitorių paieškoje.

25

NaAlGeO₄ fosforų, legiruotų retųjų žemių jonais, liuminescencinės savybės

Gabija Janušauskaitė¹, Martynas Misevičius^{1,2}

¹ Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

² Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras

Liuminescencinės medžiagos paprastai susideda iš matricos, kuri užtikrina tinkamą kristalinę struktūrą bei energijos pernašą, ir aktyvatoriaus, kuris atsakingas už šviesos emisiją. Retųjų žemių jonai dažnai naudojami kaip aktyvatoriai dėl savo specifinių 4f elektronų liuminescencinių savybių, kurios leidžia efektyviai sugerti ir skleisti šviesą. Germanatai sulaukė dėmesio kaip perspektyvios matricos dėl aukšto cheminio ir terminio stabilumo, žemos sintezės temperatūros ir efektyvaus aktyvatorių įterpimo. Nepaisant išsamių tyrimų apie įvairius germanatų pagrindu sukurtus fosforus, NaAlGeO₄ liuminescencinės savybės išlieka mažai ištirtos. Šio tyrimo tikslas – ištirti Dy³⁺, Eu³⁺, Pr³⁺, Sm³⁺ ir Tb³⁺ legiruotų NaAlGeO₄ fosforų liuminescencines savybes. Analizuojant jų sužadavimo ir emisijos spektrus, gesimo trukmes ir kvantinius našumus, siekiama įvertinti jų efektyvumą kaip fosforines medžiagas, tinkamas šviesos technologijoms.

NaAlGeO₄ fosforai susintetinti kietafazių reakcijų metodu, legiruojant skirtingomis retųjų žemių jonų koncentracijomis. Gauti mėginiai charakterizuojami taikant rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) metodą ir fotoluminescencijos (PL) matavimus. XRD analizė parodė, kad mėginiai su legiruojamųjų jonų koncentracija iki 1 % yra vienfaziai, tačiau didesnė koncentracija sukelia priemaišinių fazių smailių atsiradimą, kurios stiprėja didėjant koncentracijai. Fotoluminescencijos matavimai atskleidė skirtingas emisijos savybes kiekvienam legiruojančiam jonui: raudoną emisiją skleidė Eu³⁺, geltoną Dy³⁺, oranžinę Pr³⁺, oranžinę-raudoną Sm³⁺ ir žalią Tb³⁺.

Retųjų žemių jonais legiruotas NaAlGeO₄ pasižymi perspektyviomis liuminescencinėmis savybėmis, todėl gali būti tinkamas naudoti šviesą spinduliuojančiuose įrenginiuose ir ilgai švytinčiose medžiagose. Galimybė reguliuoti emisijos bangos ilgį keičiant legiravimo koncentracijas pabrėžia šios matricos universalumą būsimiems taikymams.

Baltijos jūros leduotumo tyrimas

Ugnius Jasnauskas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Leduošanas Baltijos jūroje yra itin reikšmingas rodiklis, kuris leidžia stebėti klimato kaitos poveikį ir prognozuoti ateities tendencijas. Baltijos jūra yra unikalus vandens telkinys dėl savo geografinės padėties ir specifinių ekologinių sąlygų, todėl jūros ledo dangos kaita turi tiesioginį poveikį tiek regiono aplinkai, tiek vietos gyventojams. Baltijos jūros ekologinė būklė tiesiogiai priklauso nuo klimato sąlygų, todėl leduotumo tyrimai padeda įvertinti, kaip keičiasi jūros ekosistema ir kokios yra galimos pasekmės regionui. Pavyzdžiui, ledo danga veikia jūros temperatūrą, druskingumą, deguonies koncentraciją ir biologinę įvairovę. Be to, ledo dangos pokyčiai gali turėti įtakos žuvų populiacijoms, jų migracijai ir veisimosi vietoms, o tai savo ruožtu veikia žvejybos pramonę ir regiono ekonomiką. Leduošanas tiesiogiai susijęs ir su laivyba Baltijos jūroje žiemos mėnesiais, mažėjantys ledo plotai gerokai palengvina šiaurinių jūros uostų pasiekiamumą. Dėl to yra svarbu iširti, kaip keitėsi leduotumas per paskutinius 300 metų.

Nuo XVIII a. buvo renkami duomenys apie ledo dangos plotus Baltijos jūroje, jie netiesiogiai pateigia daugiau informacijos, padedančios suprasti apie klimato kaitos dinamiką, procesus ir sudaro galimybes atlikti ilgalaikes analizes. Leduošanas papildo ir pratęsia klimatinį archyvą duomenimis iš XVIII amžiaus ir tokiu būdu leidžia daugiau sužinoti apie XVIII a. klimatinės sąlygas bei suprasti klimato kaitos mechanizmus ir jų poveikį šiaurės Europai. Pavyzdžiui, analizuojant duomenis galima nustatyti, ar esama tendencija rodo spartų klimato atšilimą, ar tik trumpalaikius svyravimus.

Tyrimas remiasi statistine duomenų, gautų iš Suomijos meteorologijos instituto svetainės, analize. Duomenys apima 1782 – 2024 m. periodą, duomenų patikimumas skirtingas įvairiais amžiais. XVIII – XIX a. leduotumo duomenys buvo gaunami daugiausiai remiantis laivų stebėjimais, XX a. pabaigoje – XXI a. – palydovinėmis nuotraukomis ar kitomis pažangiomis technologijomis.

Nagrinėjant, kaip kito ledo dangos plotai Baltijos jūroje 1782 – 2024 m. periodu, galima teigti, kad ledo danga pastebimai mažėjo nuo XIX a. pabaigos, o XX a. pabaigoje – XXI a. pradžioje – itin sparčiai. Didžiąją viso stebėjimų laikotarpio dalį vidutinis dešimtmečio leduotumas viršijo 200 tūkst. km², tačiau paskutinio dešimtmečio (2015-2024 m.) vidutinis ledo dangos plotas siekė vos pusę tiek – 100 tūkst. km², ko niekada nebuvo užfiksuota anksčiau. Didžiausias dešimtmečio vidurkis buvo fiksuotas XIX a. pradžioje (1805-1814 m.), kuomet vidutiniškai leduotumas kasmet siekė beveik 300 tūkst. km². Didžiausio leduotumo laikotarpis buvo XVIII a. antra pusė – XIX a. pirma pusė, mažiausio – XXI a. Pastaraisiais dešimtmečiais klimato kaita tapo itin aktuali problema, smarkiai veikianti visą žemės planetą, tačiau labiausiai klimato atšilimas veikia šiaurines ir vidutines platumas. Žiemos tapo gerokai švelnesnės, to geriausias pavyzdys – mažėjantys sniego dangos plotai šiaurės pusrutulyje bei vis rečiau užšalantys arba visai neužšalantys vandens telkiniai.

27

Insights of electrochemical synthesis of copper hydr(oxides)

Gintautas Jonkus¹, Ramunas Levinas^{1,2}, Natalia Tsyntsaru^{1,3}, Henrikas Cesiulis¹

¹*Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences*

²*Center for Physical Sciences and Technology, State Research Institute*

³*Moldova State University, Institute of Applied Physics*

Metal hydr(oxides) exhibit significant potential in various scientific areas, from organic catalysis, carbon dioxide reduction to energy storage. In our study we have synthesized copper hydroxide ($\text{Cu}(\text{OH})_2$), Copper(I) oxide (Cu_2O) and Copper(II) oxide (CuO) thin films on both porous and non-porous copper electrodes using cyclic voltammetry and observed different current tendencies and potential shifts. We have characterized synthesis process using electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and noted regions in which copper hydr(oxides) are produced and regions in which electrode shows capacitive behaviour. X-ray diffraction has been used to determine the phases of synthesized thin films, we have observed that increasing of upper vertex potential does favour CuO formation and we have noted that on the porous copper electrode we have obtained single CuO phase at more anodic potential than on film. Scanning electron microscopy has been used to investigate morphology of synthesised nanostructures and to determine the size of crystallites, the smallest crystallites were obtained at 0.65V at both porous and non-porous electrodes the size of crystallites: 10.9nm on the foil and 9.1nm on foam.

Synthesis of potential proliferating cell nuclear antigen inhibitors

Simona Jonušienė¹, Mantas Jonušis², Denis Sokol¹

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Vilniaus universiteto Gyvybės mokslų centro Biochemijos instituto Bioorganinių junginių chemijos laboratorija*

According to WHO (World Health Organization) various types of cancer is the second leading cause of death globally. Despite the fact that cancer has no universal cure, it has many targets for possible treatment. In 2023 City of Hope National Medical Center published preclinical research on a targeted chemotherapy using novel small molecule - AOH1996 that appears to suppress tumor growth without causing adverse effects.

Our group of scientists developed new synthesis pathway for obtaining *N*-(2-((2-(3-methoxyphenoxy)phenyl)amino)-2-oxoethyl)-1-naphthamide (AOH-1996) in sub kilogram quantities. New method is superior to previously published in scientific literature because of easily accessible materials and classic techniques are used which allows to significantly reduce production cost while maintaining product quality. In addition, our method does not use chromatographic purification, which further reduces production costs.

Synthesis starts from mono methylation of resorcinol with dimethyl sulfate in anisole as a solvent. Obtained 3-methoxyphenol is converted to substituted diphenyl ether by Ullmann reaction with 2-chloronitrobenzene. Nitro derivative is reduced with hydrazine hydrate and Raney nickel as a catalyst. Further, reaction with chloroacetyl chloride and sodium azide followed by reduction with hydrogen gas and palladium on carbon catalyst gives glycine derivative. Finally, reaction with alpha naphthoic acid chloroanhydride gives desired AOH-1996.

Moreover, we have synthesized series of compounds similar to AOH-1996 in the expectation that they will also behave as proliferating cell nuclear antigen inhibitors. Synthesized series includes: *N* substituted glycine derivatives, triazoles formed from intermediate azide and various terminal acetylenes, compounds with other than naphthoyl substituents, attached strained heterocycles such as aziridine and azetidione, nitrogen mustards, etc.

To conclude, our group has developed new, efficient and chromatography free synthesis pathway for AOH-1996 and created series of structurally similar compounds for near future studies on cancer cell lines.

29

Utilization of Waste Phosphogypsum in Bioceramic Material Development

Elzbieta Jursene, Laura Michailova, Simona Jureviciute, Inga Grigoraviciute, Aivaras Kareiva

Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Phosphogypsum, a by-product formed during phosphoric acid production from apatites at the "Lifosa" factory in Kėdainiai, Lithuania, has accumulated in massive quantities. Despite being classified as non-hazardous, its chemical composition varies depending on the source of the phosphate raw material. Globally, phosphogypsum has been explored for use in fertilizers, construction materials, and even mushroom cultivation. This study aims to reassess and characterize phosphogypsum waste from various locations within the factory dump using a range of physico-chemical methods. Based on the findings, we propose its utilization as a precursor for synthesizing high-quality, low-cost calcium hydroxyapatite ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) for artificial bone implants.

30

Encapsulation of β -carotene by chitosan of varying molecular weights

Viktorija Juščenko, Ieva Venskevičiūtė, Tatjana Kavleiskaja

Department of Polymer Chemistry, Institute of Chemistry, Vilnius University

The encapsulation of natural antioxidants is a significant research area due to its broad potential applications in the food and pharmaceutical industries. Encapsulation provides a protective barrier that shields antioxidants from degradation caused by environmental factors, enhancing their stability and efficacy over time. This approach enables the integration of antioxidants into various products, including foods, beverages, dietary supplements, cosmetics, and pharmaceuticals.

Our study focuses on the encapsulation of natural carotenoids using modified chitosans. Chitosans of different molecular weights (10, 90, and 111 kDa) and degrees of acetylation (DA) (90% and 68%) were investigated to determine the optimal conditions for carotenoid complexation.

β -Carotene/chitosan aggregates were prepared by adding β -carotene, dissolved in an organic solvent (such as ethanol or DMSO), to an aqueous chitosan solution, followed by the removal of the organic solvent via evaporation or dialysis. The physicochemical properties of the resulting complexes were analyzed using Fourier transform infrared and Raman spectroscopy, $^1\text{H-NMR}$ spectroscopy, differential scanning calorimetry, and dynamic light scattering for particle size evaluation. Encapsulation efficiency and stability constants were also determined. In addition, radical scavenging activity was assessed using the DPPH free radical scavenging assay.

β -Carotene/chitosan prepared using DMSO with commercial chitosan (DA 90.5%, molecular weight 89 kDa) demonstrated the highest encapsulation efficiency. Meanwhile, the association constants obtained in water from solubility isotherms were 10,700 and 9,800 L mol^{-1} for complexes formed using ethanol and DMSO, respectively. Moreover, the complexes exhibited free radical scavenging activity against DPPH radicals. Interestingly, the complexes containing the lowest molecular weight chitosan (10 kDa) demonstrated the highest antioxidant activity; however, these complexes did not necessarily contain the highest concentration of encapsulated carotenoid molecules.

31

Etilo 2-(2-(-7*H*-imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-5-il)fenoksi)acetato sintezė ir modifikavimas

Fausta Kairytė, Ieva Žutautė

Vilniaus Universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto, Chemijos institutas, Naugarduko g 24., Vilnius, Lietuva

Plačiai žinomi sveikatos sutrikimai, tokie kaip Alzheimerio, Parkinsono liga, II tipo diabetas yra neurodegeneracinės ligos, sukeltos dėl fibrilinių agregatų formavimosi, kitaip vadinamų amiloidais. Amiloidai yra baltymai, kurie negali atlikti savo funkcijos, ir kaupiasi organizmo audiniuose kaip netirpūs dariniai, taip sukeldami anksčiau minėtas ligas. Paieška junginių, kurie slopintų amiloidinių struktūrų susidarymą yra labai svarbi. Buvo pastebėta, jog mažamolekuliniai junginiai, savo struktūroje turintys imidazolo žiedą, yra perspektyvūs amiloidų agregacijos modulatoriai. Naujausių tyrimų metu buvo nustatyta, kad imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino struktūrinį skeletą turintys junginiai pasižymi minėtomis savybėmis.

Siekiant ištirti 5-arilimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino pakaitų įtaką alfa-sinukleino agregacijai, buvo nuspręsta susintetinti etilo 2-(2-(-7*H*-imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-5-il)fenoksi)acetatą. Šis junginys buvo sintetintas iš atitinkamo 2-alkinilimidazolo atliekant ciklizacijos reakciją. Norint praplėsti tiriamų junginių imtį, susintetinto esterio grupė modifikuota pasirinktais aminais.

Development of hydroxyapatite composite with clove oil for antibacterial activity

Justina Karčiauskaite^{1,*}, Maab Elsheikh¹, Hsu-Wei Fang², Monika Mortimer³, Zivile Stankeviciute¹, Aivaras Kareiva¹

¹ *Institute of Chemistry, Vilnius University,*

² *High-Value Biomaterials Research and Commercialization Center, National Taipei University of Technology*

³ *Laboratory of Environmental Toxicology, National Institute of Chemical Physics and Biophysics*

Researchers have been interested in calcium hydroxyapatite [CHA: $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$] due to its similarity to human bone and its bioactivity. This study aimed to develop a new challenge by enhancing the bioactivity of CHA by introducing clove oil to its composition. The main component of clove essential oil is eugenol (2-methoxy-4-(2-propenyl) phenol; 4-($\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2$) C_6H_3 -2-(OCH_3) OH), which is present in concentrations of 85%–95%. Clove is a significant source of phenolic compounds, including flavonoids, hydroxybenzoic acids, hydroxycinnamic acids, and hydroxyphenyl propens, with eugenol being its main bioactive compound. The phenolic compounds have a variety of biological actions, such as antibacterial, and antioxidant properties. Many CHA bioceramic samples struggle to effectively prevent bacterial colonization, which can lead to potential post-surgical infections. Moreover, inconsistent pore structure: some pore structure within bioceramics often lacks uniformity and interconnectivity. This can hinder tissue integration and regeneration, impeding the CHA's overall functionality. Addressing these challenges is crucial to advancing the field of CHA bioceramics and improving their overall effectiveness in medical applications. CHA composites were synthesized by precipitation method. Characterization of synthesis products was performed using scanning electron microscopy (SEM), Brunauer-Emmett-Teller (BET) analysis, X-ray diffraction (XRD) analysis, thermogravimetric (TGA) analysis and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). Antibacterial properties of synthesized composites are under investigation.

33

Chemical derivatization for the analysis of sedative-hypnotic drugs by gas chromatography-mass spectrometry

Nerijus Karlonas

The State Forensic Medicine Service, Toxicology Laboratory

Although sedative-hypnotic drugs can be determined by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) without derivatization, several problems are usually encountered for the trace-level analysis. Losses of the analytes and peak tailing due to adsorption in the GC inlet device and/or an interaction of the analytes with active sites on the walls of the capillary column can be observed.

Consequently, for most GC-MS methods derivatization of sedative-hypnotic drugs improves spectral determination/definition and reduces thermal degradation on-column. Thus, derivatization by different reagents: mixtures of N-methyl-N-(trimethylsilyl)trifluoroacetamide (MSTFA), N,O-bis(trimethylsilyl)trifluoroacetamide (BSTFA), N-tert-butyltrimethylsilyl-N-methyltrifluoroacetamide (MTBSTFA) in acetonitrile and ethyl acetate were investigated. The derivatization procedure was optimized to obtain the highest sensitivity and repeatability of the derivatives. The greatest peak areas of analytes were achieved by silylation using 100 μ L of a mixture of MTBSTFA, acetonitrile, and ethyl acetate (at 20:40:40 v/v/v). A slightly lower sensitivity was observed after silylation by MSTFA if compared with BSTFA. Moreover, during silylation by MSTFA or BSTFA, many problems arose at the derivatization step because both reagents are very sensitive to humidity, and insufficient repeatability of MSTFA and BSTFA derivatives was observed.

In the next research step, the derivatization temperature and time were optimized. The derivatization conditions including temperature, which was fixed at 60, 70, 80, 85, 90, and 100 °C, and the duration of the reaction, defined at 20, 25, 30, 35, and 40 min were tested. The optimal conditions are presented in bold. During the optimization of the derivatization temperature, the peak areas of analytes kept increasing with the temperature increase until the maximum peak area was reached at 85 °C. After this point, an increase in temperature resulted in a decrease in the peak areas of some analytes.

The silylation efficiency of the analytes was tested as a function of time. The highest peak areas were achieved when the reaction was carried out for 30 min, and after that increasing reaction time resulted in a decrease in the peak areas of some analytes. An increase in reaction time from 25 to 30 min did not affect the peak areas of most analytes.

In conclusion, the derivatization time and temperature for a mixture of MTBSTFA, acetonitrile, and ethyl acetate (at 20:40:40 v/v/v) at 85 °C for 30 min were selected as the optimal derivatization condition for quantification of the analytes by GC-MS.

34

Sensing geraniol in essential oils using molecular imprinting techniques

Greta Kaspute^{1,2}, Urte Prentice^{1,2,3,4}

¹State Research Institute Centre for Innovative Medicine

²Department of Nanotechnology, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology

³Department of Physical Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

⁴Department of Mechatronics, Robotics and Digital Manufacturing, Faculty of Mechanics, Vilnius Gediminas Technical University

Geraniol, a monoterpenoid alcohol and a key bioactive compound, is widely found in essential oils. Its molecular structure, featuring a hydroxyl group and an unsaturated hydrocarbon chain, contributes to its characteristic floral aroma and diverse biological activities, including antimicrobial, anti-inflammatory, and antioxidant properties (Maćzka et al., 2020). Due to its significant therapeutic potential and extensive use in pharmaceuticals, perfumery and food industries, precise detection and quantification of geraniol are crucial, especially at trace concentrations. However, the complexity of essential oil matrices presents analytical challenges, necessitating highly selective and sensitive detection methods.

Molecularly imprinted polymers (MIPs) offer a robust solution by mimicking natural molecular recognition processes to create selective binding sites tailored to geraniol's molecular structure. MIPs demonstrate exceptional selectivity, stability, and durability under extreme environmental conditions, such as high temperatures, pH variations, and the presence of organic solvents or interfering compounds (Kaspute et al., 2024). When integrated into advanced sensor platforms, including electrochemical and surface-enhanced sensing systems, MIPs significantly improve geraniol detection's sensitivity, selectivity, and reproducibility. Advances in nanotechnology, such as particle imprinting, further enhance the performance of MIP-based sensors, enabling ultralow detection limits.

This study represents the first step toward developing a molecularly imprinted sensor for the selective detection of geraniol. In this initial phase, polymer layers with imprinted geraniol molecules were successfully formed, demonstrating the feasibility of using pyrrole-based MIPs for essential oil analysis. These imprinted layers provide the foundation for subsequent research focused on optimizing detection mechanisms and evaluating the sensor's performance in real-world applications. By advancing MIP-based sensor technology, this work aims to significantly enhance geraniol detection's accuracy, reliability, and efficiency in complex oil matrices, ultimately benefiting quality control and authentication processes in therapeutic and commercial contexts.

References

Kaspute, G., Ramanavicius, A., & Prentice, U. (2024). Molecular Imprinting Technology for Advanced Delivery of Essential Oils. *Polymers*, 16(17), Article 17.

Maćzka, W., Wińska, K., & Grabarczyk, M. (2020). One Hundred Faces of Geraniol. *Molecules*, 25(14), 3303.

Glacial meltwater dynamics of the last glaciation in southeastern Lithuania

Markas Kazlauskas, Petras Šinkūnas

Department of Geology and Mineralogy, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

This study investigates the dynamics of glacial meltwater flows in Southeastern Lithuania through a combination of sedimentological, geomorphological, and spatial analyses. Fieldwork, including six sedimentological excavations, was conducted to characterize depositional structures and infer paleoflow directions. High-resolution LiDAR-derived Digital Elevation Models (DEMs) were integrated with geological and geomorphological mapping to analyze landform orientation, flow paths, and erosional patterns.

Results highlight the significant role of glacial meltwater activity in shaping the landscape, particularly in the formation of wave-shaped landforms. Sedimentological data reveal a combination of dune and antidune sedimentation, with trough and planar cross-stratification indicating high-energy glaciofluvial processes. DEM analysis suggests two primary meltwater flow directions – one from the north, associated with subglacial outburst floods, and another from the east, responsible for scabland-like erosion patterns. While previous geomorphological mapping suggested an aeolian origin for some landforms, this study provides evidence supporting a dominant glaciofluvial influence.

These findings contribute to a more detailed reconstruction of the post-glacial environment in SE Lithuania, emphasizing the complex interplay between glacial meltwater dynamics and sediment deposition. The study highlights the importance of integrating sedimentological and geomorphological analyses with modern remote sensing techniques, such as updated Digital Elevation Models (DEMs), to refine interpretations of past glacial landscapes and enhance understanding of the complex processes driving glacial meltwater dynamics. This study was carried out in partnership with geologists from Nicolaus Copernicus University.

Kavos tirščių kiekio įtaka statybinio gipso savybėms

Nora Kybartienė, Neringa Matutytė

Kauno technologijos universiteto Cheminės technologijos fakultetas

Kavos pupelių suvartojimas kasmet vis auga, o tai lemia didesnę kavos atliekų (kavos tirščių) susidarymą. Vidutiniškai iš 1000 kg kavos pupelių, susidaro 650 kg kavos tirščių. Didžioji dalis šių atliekų kartu su kitomis buitinėmis atliekomis patenka į sąvartynus ir irdamos išskiria šiltnamio efektą sukeliančias dujas, tokias kaip metanas ir anglies dioksidas. Tad vis labiau ieškoma įvairių šių atliekų panaudojimo būdų. Kavos tirščius naudoja maisto pramonėje, kosmetikoje, trąšų gamyboje. Statybų pramonėje gaminant plytas, betoną, galima dalį smėlio pakeisti kavos tirščiais. Tačiau tyrimų, kuriuose būtų nagrinėjamas kavos tirščių panaudojimas gipsinių rišamųjų medžiagų gamyboje, yra labai nedaug.

Šio darbo tikslas – nustatyti kavos tirščių kiekio įtaką statybinio gipso fizikinėms-mechaninėms savybėms. Tyrime naudotas statybinis gipsas ir Arabika kavos tirščiai. Kavos tirščiai išdžiovinti 50 ± 2 °C temperatūroje ir prasijoti pro 1 mm sietą. Medžiagos analizuotos Rentgeno spindulių difrakcinės (XRD), Rentgeno spindulių fluorescencinės (XRF), Vienalaikės terminės analizės (VTA) ir Furje transformacinės infraraudonųjų spindulių spektrinės (FTIR) analizės metodais. Paruošti gipso ir kavos tirščių mišiniai, kuriuose priedo buvo 0, 5, 10, 15 ir 20 %. Vandens ir kietos medžiagos santykis (V/K) keistas nuo 0,5 iki 0,9. Tirtos mišinių fizikinės-mechaninės savybės, tokios kaip rišimosi trukmė, tankis, vandens absorbcija ir stipris gniuždant.

Gauti rezultatai parodė, kad mišiniuose didinant kavos tirščių kiekį nuo 0 iki 20 %, reikalingas V/K santykis normalios konsistencijos tešla gauti padidėja nuo 0,5 iki 0,9. Didėjant priedo kiekiui mišinyje, rišimosi pradžia pailgėja nuo 12 iki 30 min. Sausų bandinių tankis sumažėjo nuo 1200 iki 800 kg/m³, bandinių vandens absorbcija padidėja nuo 18 iki 50 %. Bandinių, kuriuose buvo iki 10 % kavos tirščių, stipris gniuždant po 7 parų kietėjimo buvo didesnis nei 2 MPa. Nustatyta, kad kai mišinyje yra iki 10 % kavos tirščių, galima gauti gerų savybių gipsinę rišamąją medžiagą.

Amorfinio titano dioksido priedo įtaka mažabazių kalcio hidrosilikatų ($\text{CaO/SiO}_2 = 0,66$) susidarymui bei jų savybėms

Ričardas Kleinauskas, Anatolijus Eisinis

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno Technologijos Universitetas

Dėl savo unikalios struktūros, optinių savybių bei terminio atsparumo, titanitas (CaSiTiO_5) yra plačiai naudojamas keraminių glazūrų ir pigmentų gamyboje. Titanitas yra biologiškai suderinamas ir chemiškai inertiškas kūno skysčių aplinkoje, todėl yra taikomas biomedicinoje kaip alternatyva kalcio fosfatams ir silikatams. Taip pat dėl gebos į savo kristalinę struktūrą įsiterpti įvairių metalų kaip aktinidų jonus, yra vykdomi jo, kaip radioaktyvių medžiagų stabilizatoriaus tyrimai.

Titanito gamyboje dažniausiai naudojami kietafazis arba zolių gelių metodai. Kietafazinio sukepimo trūkumai yra procesui reikalinga itin aukšta temperatūra bei tarpinių/šalutinių produktų ilgas egzistavimo intervalas. Zolių gelių metodo taikomumas yra ribojamas didelės pradinės žaliavų savikainos bei sudėtingo koloidinių tirpalų paruošimo. Remiantis aptartų sintezių trūkumais, nuspręsta amorfinį titano dioksidą susintetinti naudojant zolių gelių metodą ir šį priedą įterpti į $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ sistemą, ją apdorojant hidrotermiškai. Tikėtina, kad, skirtingai nuo kristalinių fazių, amorfinis TiO_2 gali įsiterpti į kalcio hidrosilikatų struktūrą.

Šio tyrimo tikslas - nustatyti amorfinio TiO_2 priedo kiekio ir hidroterminio išlaikymo trukmės įtaką mažabazių ($\text{CaO/SiO}_2 = 0,66$) kalcio hidrosilikatų susidarymui ir terminiams virsmams.

Į girolito stechiometriją atitinkančius mišinius įdėta nuo 5 iki 20 % TiO_2 priedo pagal masę. Paruošti bandiniai sumaišyti su vandeniu ($V/K = 10$), ir hidrotermiškai apdoroti 200 °C temperatūroje 4, 8, 24 ir 72 val, suspensijų nemaišant. Pradinės žaliavos ir sintezės produktai apibūdinti RSDA ir VTA metodais.

Ištirta, kad hidroterminės sintezės metu TiO_2 priedas nedaro įtakos naujų kristalinių fazių susidarymui visomis tirtomis sąlygomis, tačiau jo kiekis keičia kalcio hidrosilikatų persikristalizavimo greitį. Po 24 val sintezės, produktuose vyrauja girolitas ir Z-fazė, kuri, sistemoje esant 10-15 % priedo, pilnai persikristalizuoja į girolitą. Tuo tarpu sistemoje su 20 % priedo yra identifikuojami Z-fazės pėdsakai, rodantys sulėtėjusį persikristalizavimo procesą. Po 72 val izoterminio išlaikymo Z-fazė pilnai persikristalizuoja į girolitą, tačiau jam priskiriamų difrakcinių maksimumų intensyvumas mažėja didėjant priedo kiekiui. Priedo įsiterpimą į kalcio hidrosilikatus patvirtina VTA. Sistemų su priedu terminėse kreivėse nėra amorfinio TiO_2 kristalizacijai į anatazą (~450 °C) ar rutilą (~600-700 °C) būdingų efektų. 830-860 °C intervale stebimas kalcio hidrosilikatų sistemai nebūdingas egzoterminis dupletas. Atlikus 900 °C temperatūroje apdorotų produktų RSDA, šio dupletu terminiai efektai priskirti volastonito (CaSiO_3) (840 °C) ir titanito (860 °C) susidarymui.

Kompleksinių kritulių kiekio ir vėjo greičio ekstremumų susidarymas ir pasikartojimas Baltijos šalyse 1950–2022 metais

Laurynas Klimavičius, Egidijus Rimkus, Gintautas Stankūnavičius

Vilniaus Universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Dėl klimato kaitos pastaraisiais dešimtmečiais išaugo įvairių orų ir klimato ekstremumų pasikartojimas bei intensyvumas. Visgi nustatyta, kad didesnis neigiamas poveikis infrastruktūrai, gamtinei aplinkai, ekonomikai ir kitoms sritims bei pavojus žmonių gyvybėms sukeliamas kai keli ekstremumai fiksuojami tuo pat metu ir susidaro kompleksiniai klimato įvykiai. Vieni iš jų – kompleksiniai kritulių kiekio ir vėjo greičio ekstremumai (KKVE) tiriami šiame darbe. Pagrindinis šio darbo tikslas – įvertinti KKVE pasikartojimą bei jų susidarymą lemiančius procesus Baltijos šalyse 1950–2022 metų laikotarpiu.

Darbe tirta teritorija nuo 53.5° iki 59.5° š. pl. ir nuo 20.0° iki 28.5° r. ilg. KKVE išskyrimui panaudoti ERA5 reanalizės paros kritulių kiekio (P) bei maksimalaus vėjo greičio (w_{max}) duomenys, kurių gardelės dydis – 0,25 × 0,25°. Siekiant nustatyti KKVE kiekvienai tyrimo teritorijos gardelei apskaičiuotos viso 73 metų tyrimo laikotarpio 98-to percentilio P ir w_{max} reikšmės. Šis kompleksinis ekstremumas išskirtas, jei abiejų kintamųjų vertės viršijo 98-to percentilio reikšmes tą pačią dieną toje pačioje gardelėje. Tyrimo metu taip pat nustatyti intensyviausi KKVE. Tokie ekstremumai išskirti kai tiek P , tiek w_{max} tame pačiame tyrimo teritorijos taške viršijo 99,9-to percentilio vertes. KKVE susidarymą lemiančios sinoptinės sąlygos įvertintos pasitelkus Hess'o–Brezowsk'io cirkuliacijos tipų klasifikaciją bei įvairias sinoptinę informaciją teikiančias duomenų bazines. Darbe tiriamų kompleksinių ekstremumų susidarymą lėmusios sąlygos nustatytos tik tomis dienomis, kai jie gauti daugiau nei 20 % tyrimo teritorijos gardelių. KKVE atskirai įvertinti skirtingais metų laikais bei šaltuoju (spalį–kovą) ir šiltuoju (balandį–gegužę) laikotarpiais.

Per tyrimo laikotarpį dažniausiai (10–11 kartų per dešimtmetį) KKVE pasikartojo vakarų Lietuvoje, priešvėjiniuose Žemaičių aukštumos šlaituose. Daugiausiai, 43,5 % visų kompleksinių ekstremumų gauta rudenį, rugsėjo–lapkričio mėnesiais. Nustatyta, kad per tyrimo laikotarpį KKVE skaičius išaugo visais metų laikais, didžiausi pokyčiai gauti vasarą. Visgi pasitelkus Mann'o–Kendall'o testą gauta, kad daugeliu atvejų pokyčiai nėra statistiškai reikšmingi (kai $p < 0,05$). Nustatyta, kad šaltuoju ir šiltuoju laikotarpiu KKVE susidarymą lemia skirtingos sinoptinės sąlygos. Šaltuoju laikotarpiu KKVE sietini su stipria zonine (vakarų) pernaša bei greitai besivystančiomis frontinėmis bangomis gilių Atlanto ciklonų pietinėje periferijoje. Šiltuoju laikotarpiu KKVE susidarymą lemia tyrimo teritoriją pasiekiantys pietiniai ciklonai. Būtent pietiniai ciklonai lėmė ir pačių intensyviausių KKVE susidarymą. Visi didžiausiu intensyvumu pasižymėję kompleksiniai ekstremumai gauti antroje vasaros pusėje bei rugsėjo mėnesio pradžioje.

Seasonal variability in the chemical composition of essential oil and extracts from Scots pine (*Pinus sylvestris*) needles in the vicinity of Vilnius: A comparative study of hydrodistillation and supercritical CO₂ extraction

Jokūbas Kojelis^{1,2}, Laura Jūrienė², Renata Baranauskienė², Ramutė Maždžierienė², Petras Rimantas Venskutonis²

¹Vilnius Lyceum

²Department of Food Science and Technology, Kaunas University of Technology

Efficient utilization of forest by-felling products is the key goal in sustainable forestry. While the remaining biomass is increasingly used as a biofuel, conifer needles constituting around 20 % of tree's organic matter are often classified as forestry waste. The former, indeed, is particularly rich in bioactive odorous phytochemicals, terpenes and terpenoids, which are synthesized variably throughout the year due to the changing external stress and plant growth cycles. As in Northern Europe one of the most commercially important forest-forming tree species is Scots pine (*Pinus sylvestris*), this study explores the optimized use of its foliage regarding seasonality.

This study investigates the seasonal changes in volatile compounds extracted from pine needles collected from the same trees in the vicinity of Vilnius over six sampling periods between February and December 2024. Different extraction techniques were applied to obtain volatile constituents. Essential oils (EOs) were extracted via 3-hour hydrodistillation using a Clevenger-type apparatus, while the resulting water extract was freeze-dried. A novel supercritical fluid extraction (SFE) method utilizing carbon dioxide (40 °C, 15 MPa) was employed to obtain lipophilic extracts, and extraction efficiency was evaluated through kinetic curve analysis. The chemical composition of volatile compounds of lipophilic extracts was analysed using GC×GC-TOF/MS with headspace solid-phase microextraction (HS-SPME). Additionally, GC-FID was used to characterize the composition of EOs.

The highest yield of essential oils was obtained in February (0.5 %), while water-soluble freeze-dried extracts peaked in April (1.4 g / 100 ml hydrolat). Lipophilic fractions were best extracted in February (4.2% yield) likewise. α -Pinene dominated the essential oil profile, with the highest amount in December (27.40%) and the lowest in August (19.43%), whereas the one of lipophilic fractions was more versatile: aside from February (19.92 %) and August (14.42 %), when the main volatile was α -Pinene, bornyl acetate was predominant in April (11.77%) and June (10.06%), while in October and December the most prevalent were δ -carene (11.56 %) and β -caryophyllene (9.33 %), respectively. The content of δ -cadinene in both cases was variable throughout the year. A peak in secondary plant metabolites in June was linked to pine pollination. As one of the greatest yields and distributions of the main active volatile components of essential oils and lipophilic fractions were identified in February, this research suggests collecting pine needles in late winter.

PtCo nanozimo taikymas kuriant amperometrinį gliukozės biologinį jutiklį

Aistė Krikštaponytė, Asta Kaušaitė-Minkštimienė

NanoTechnas – Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Gliukozės koncentracijos nustatymas yra labai svarbus diabetu sergantiems asmenims. Stebėdami gliukozės koncentracija šie asmenys gali priimti pagrįstus sprendimus dėl vaistų vartojimo, dietos ir gyvenimo būdo, taip sumažinant diabeto sukiamų komplikacijų riziką. Gliukozės koncentracijos nustatymui yra daugybė būdų, tačiau amperometriniai biologiniai jutikliai, kurių veikimas dažniausiai pagrįstas imobilizuotos gliukozės oksidazės katalizuojama gliukozės oksidacija molekulinio deguonimi, yra dažniausias tyrimų objektas dėl savo itin paprasto veikimo principo. Be to, jie yra labai jautrūs ir atrankūs gliukozei, pasižymi nedidele atsako trukme, nereikalauja papildomo mėginio paruošimo. Biologinių jutiklių kūrime bei tobulinime, siekiant padidinti jų jautrį ir atrankumą, sumažinti trukdančių medžiagų poveikį analiziniam signalui, naujas galimybes atveria nanomedžiagos. Šiuo metu didelio mokslininkų dėmesio sulaukia nanozimai – nanomedžiagos imituojančios fermentų katalizinį veikimą. Skirtingai nei natūralūs fermentai, jie yra atsparūs denatūracijai ir yra mažiau jautrūs aplinkos pokyčiams, tokiems kaip temperatūra ar pH. Nanozimai užtikrina didesnį katalizinį stabilumą, lengvą modifikavimą ir mažesnes gamybos sąnaudas, kadangi juos galima sintetinti paprastesniais būdais negu natūralius fermentus, kuriems dažnai reikalinga ekstrakcija ir gryninimas. Be to, nanozimai pasižymi ir nanomedžiagoms būdingomis savybėmis. Vieni iš pirmųjų nanozimų pradėtų taikyti konstruojant biologinius jutiklius buvo Berlyno mėlio nanodalelės atliekančios „dirbtinės peroksidazės“ vaidmenį ir katalizuojančios vandenilio peroksido redukcija.

Šiame darbe buvo ištirti septyni skirtingi nanozimai ir sukurtas gliukozės biologinis jutiklis naudojant PtCo nanodaleles ir GOx. Sukurto biologinio jutiklio tiesinis diapazonas yra 0,04 – 2,18 mM gliukozės, jautris – 1,42 $\mu\text{A}/\text{mM}$, o aptikimo riba – 0,032 mM. Biologinis jutiklis yra atrankus gliukozei, o jo veikimui netrukdo dažnai interferenciją sukeliančios medžiagos. Be to pasižymi geru stabilumu 14 dienų laikotarpyje.

41

Thermo-oxidative surface modification of hydrophobic PTFE substrates

Evaldas Sutkus, Valentina Krylova

Kaunas University of Technology, Faculty of Chemical Technology, Department of Physical and Inorganic Chemistry

Crystalline silicon (c-Si) solar cells are currently the leading commercial photovoltaic (PV) technology. However, there is an urgent need to develop PV devices that are lightweight, flexible and/or transparent and can be manufactured on a large scale. Research is focusing on substrate technologies such as architectural fabrics to create flexible solar cells. The ability to absorb sunlight for as long as possible during the day is determined by the shape of the fabric structure. Solar cells can be made more flexible and lighter by coating architectural fabrics with semiconducting layers. One of the most versatile and durable architectural fabrics is PTFE-coated fibreglass. It is characterised by high glass fibre tensile strength, high dimensional stability, high stiffness and non-flammability. PTFE is a thermoplastic, semi-crystalline, fluoropolymer polymer. However, the low surface energy of PTFE makes it hydrophobic. In addition, PTFE does not interact significantly with some compounds, such as organic or inorganic compounds, because it has a strong C-F bond. Hydrophilic modifications of PTFE are therefore desirable. Common methods of surface modification such as chemical treatment with sodium naphthalene, high temperature sintering and irradiation grafting have been carried out. However, these methods can easily damage PTFE structures. They can also cause environmental pollution.

This study focuses on evaluating the optimisation of etching parameters to improve the surface compatibility of PTFE-coated fibreglass textiles and inorganic semiconductors.

In order to determine the appropriate etching parameters, the process was evaluated by monitoring the appearance of hydroxyl groups on the surface after treatment in the etching solution consisting of acid and oxidant. Samples of commercially available PTFE-coated fibreglass were treated in this solution from 2 to 6 hours at a temperature of $100 \pm 1^\circ\text{C}$. The samples were then rinsed with hot water, distilled water, dried and the ATR-FTIR spectra recorded. After etching to determine the degree of etching required to ensure adhesion of the deposited semiconductor layer to the as-prepared samples, the SILAR method was used to deposit Ag_2S thin films at room temperature.

From the ATR-FTIR spectra, it was observed that for the parameters studied, the optimal surface modification is achieved with the formation of the appropriate concentration of -OH groups, which is reached after 6 h of etching. The deposited Ag_2S layer shows good adhesion to the substrate, which is indicative of increased surface hydrophilicity and reduced surface energy.

Litofacijų ir geofizikinių parametų kaita Lietuvos ordoviko geologiniame pjūvyje

Donatas Kudžma¹, Anna Cichon-Pupienis², Sigitas Radzevičius¹

¹ Geologijos ir mineralogijos katedra, chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

² Giluminės geologijos laboratorija, Gamtos tyrimų centras

Šių tyrimų metu atliekama detali ordoviko pjūvio analizė Rietavas-1 gręžinyje, esančiame Vakarų Lietuvoje. Šiuo tyrimu siekiama apibūdinti dėsningumus magnetingumo ir radioaktyvumo modeliuose jūrinėse sedimentacinėse facijose nuo viršutinio kambro iki apatinio silūro.

Abi magnetinio imlumo (MI) ir spektrinės gama spinduliuotės (SGS) kreivės turi panašią formą. Abiejų kreivių reikšmės kyla uolienom pereinant į labiau siliciklastines (skalūnus ir kt.) ir mažėja labiau karbonatinguose intervaluose (klintyse ir pan.). Tai rodo, kad tirtose uolienose yra bendrų veiksnių įtakojančių gaunamą informaciją. Manoma, kad magnetinio imlumo ir spektrinės gama spinduliuotės duomenys yra įtakoti siliciklastinės detritinės medžiagos prinešimo į baseiną, taip pat ir lokaliai sutinkamų autigeninių ir diagenetinių frakcijų, kuriose yra didesnis kiekis paramagnetinių ir/arba feromagnetinių mineralų ir radioaktyvių elementų lyginant su diamagnetiniais ir mažo aktyvumo karbonatais. Siliciklastinė medžiaga gerai atsekama pagal spektrinės gama torio (Th) ir kalio (K) kiekius, kurie gerai reprezentuoja siliciklastinės medžiagos kiekį. Siliciklastinio lutito (angl. *mudstone*) facijoje karbonatiniai mineralai veikia kaip skiedikliai magnetingumo ir radioaktyvumo signalui. Nors piritas (paramagnetinis mineralas) yra dažnas, jis nestipriai paveikia MI duomenis. Lutitai su dideliu kiekiu organinės medžiagos (OM), pasižymi padidėjusia SGS dėl padidėjusio autigeninio urano (U) kiekio, dažnai sutampa su sumažėjusiomis MI reikšmėmis, kas gali būti susiję su diamagnetine OM, kuri veikdama kaip skiediklis, sumažina bendras MI reikšmes.

Labai aukštos bendros SGS reikšmės būdingos plonam apatinio ordoviko siliciklastiniam intervalui, dar vadinamam *Obulus* smiltainiu, bei virš jo slūgsančiam, glaukonitu praturtintam smiltainiui. Priešingai fosfatų turinčiam smiltainiui, kuris pasižymi mažomis MI reikšmėmis ir aukštomis SGS reikšmėmis, glaukonitiniai sluoksniai išsiskiria aukštomis MI reikšmėmis, kurios yra susijusios su paramagnetiniu glaukonito mineralu. Sluoksniai, kurie turi vulkaninių medžiagų ar tefrų pasižymi šiek tiek padidėjusia SGS dėl išaugusio K ir Th kiekio. MI reikšmės yra kintančios, tačiau pati tefra pasižymi mažomis MI reikšmėmis. Tai nurodo, kad pagrindinis faktorius įtakojantis MI signalą yra siliciklastinio detrito kiekis. Vidurinio ir viršutinio ordoviko raudonai rudos spalvos sluoksniai rodo išaugusį hematito kiekį, kuris pasižymi stipriomis magnetinio imlumo reikšmėmis. Nepaisant to, bendros MI ir SGS tendencijos išlieka panašios per visą „raudonąjį“ intervalą, kas rodo, kad detritinės medžiagos kiekis yra pagrindinis faktorius įtakojantis MI signalą, o ne diagenetiniai efektai susiję su hematizacija. Kadangi ordoviko pjūvyje aptinkami ir dolomitizacijos pėdsakai, vietiniai MI reikšmių pakilimai gali būti susiję su geležimi praturtintais karbonatais. MI ir SGS stiprumas ordoviko pjūvyje, kuris atvaizduoja sąlytį tarp karbonatinių ir siliciklastinių aplinkų, kuris taip pat yra diagenetiškai paveiktas, pagrinde susijęs su terigeninės klastinės medžiagos prinešimu į baseiną.

Lazeriu indukuoto grafeno pjezoresistyvinių savybių tyrimas

Evaldas Kvietkauskas^{1,2}, Šarūnas Mickus², Viktorija Vrubliauskaitė^{1,2}, Modestas Sadauskas², Karolis Ratautas²

¹ Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas

² Fizinių ir technologijos mokslų centras

Augant technologijų pramonei bei skatinant žaliąjį kursą, skiriamas didelis dėmesys energijos efektyvumui bei inovatyviems sprendimams, kurie prisideda prie aplinkos tausojimo. Šie sprendimai dažnai reikalauja tikslių ir patikimų jutiklių, kurie galėtų efektyviai stebėti procesus bei taupyti energiją. Vieni iš plačiausiai naudojamų elektromechaninių jutiklių yra pjezoresistyviniai jutikliai, kurie, remdamiesi pjezoresistyviniu efektu, veikia kaip slėgio jutikliai, gebantys tiksliai matuoti mechaninį įtempimą ir deformacijas, todėl plačiai taikomi įvairiose srityse, tokiose kaip robotika, automobilių pramonė ir biomedicina.

Šio darbo tikslas buvo sukurti pjezoresistyvinį jutiklį ant lanksčios poliimido plėvelės, taikant lazeriu inicijuoto grafeno (LIG) bei selektyvaus metalo nusodinimo indukuoto lazerio (SSAIL) technologijas bei iširti savybes.

Atliktas LIG formavimas su CO₂ lazeriu „Diamond E150“, bangos ilgis 10,6 μm. Atlikta Ramano spektroskopija patvirtinti, jog susidarė grafenas. Išmatuotos paviršinės varžos keturių zondų metodu, esant skirtingoms lazerio dozėms bei greičiams. Pjezoresistyvinės savybės išmatuotos Vitstono tilteliu matuojant įtempą bei lankstant bandinį.

44

Synthesis of APTES grafted silica and its modification with AgNP

Gerardas Laurinavičius, Vilius Poškus

Vilniaus university, Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry

Porous materials plays an important role in material science, especially in sample preparation techniques like solid phase extraction and microextraction.

Silica is a perfect candidate for porous sorbents – it can be easily modified and has a rather good chemical stability against organic solvents. Usually, the synthesis of mesoporous silica sorbent starts with a silica source (typically TMOS orthosilicate) porogen and a catalyst. The latter steps involve surface modification via variable reactions which can give a desired functionality and selectivity. It is always desirable to synthesize a sorbent with as little steps as possible minimizing the required steps for its functionalization.

In this study we synthesized two types of silver nanoparticles (AgNP) modified silicas with different porogens (CTAB and P123) and TMOS and APTES as a silica sources. AgNP presence was confirmed with EDX and SEM analyses, porosity and surface area were assessed with nitrogen sorption-desorption analysis. FT-IR analysis was also performed on synthesized silica samples. AgNP load (compared to silicon) was around 40-50 % for both silicas. BET surface areas: 344.6 and 8.8 m²/g for silicas, synthesized using CTAB and P123 as porogens. Nitrogen sorption-desorption analysis showed better porosity for CTAB silica with mesopores, ranging from 2 to 45 nm in size.

45

Pasvalio rajono gruntų mechaninių ir dinaminių savybių įvertinimas

Rytis Lažaunikas, Saulius Gadeikis

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Inžinerinių objektų projektavime būtina įvertinti tiek gruntų mechanines savybes, tiek ir pačių statinių arba išorinių vibracijų įtaką būsimam pagrindui. Projektuojant pamatus statiniams reikia žinoti įprastai naudojamus rodiklius – odometrinių deformacijų modulį E_{oed} , kerpamąjį stiprį τ ir nedrenuotą kerpamąjį stiprį c_u , kurie nustatomi laboratoriniais metodais. Tinkamam projektavimui reikia ir rečiau naudojamų rodiklių – šlyties modulio esant itin mažoms deformacijoms G_{max} , Puasono koeficiento μ ir dinaminio deformacijų modulio E_{dyn} . Pastaruosius parametrus galima įvertinti empirinėmis formulėmis turint skersinės V_s ir išilginės V_p bangų greičius.

Šio tyrimo tikslas – įvertinti viršutinio pleistoceno ir viršutinio devono darinių, slūgsančių Pasvalio rajone, mechanines savybes – kerpamąjį stiprį, nedrenuotą kerpamąjį stiprį, odometrinių deformacijų modulį, ir dinaminis rodiklius – dinaminį šlyties modulį, Puasono koeficientą bei dinaminį deformacijų modulį.

Pagal laboratorinius rezultatus tiriami gruntai yra mažo plastiškumo smėlingas molis (moreninis), mažo, vidutinio, ar didelio plastiškumo molis, standžios ir labai standžios konsistencijos. Remiantis Euro kodu 8 (EN 1998-1:2004, 3 priedas 3 lentelė), atsparių žemės drebėjimui konstrukcijų projektavimui tirti gruntai pagal skersinės bangos greitį V_{s30} priklauso B ir C tipams.

Šiame darbe laboratoriniais metodais nustatyti mechaninių savybių parametrai, sekliosios seismikos bandymu gręžinyje gauti V_s ir V_p bangų greičiai, kurių pagalba įvertintos grunto dinaminės savybės. Gauti rezultatai parodė, kad mažo plastiškumo smėlingo molio (moreninio) nedrenuoto kerpamojo stiprio c_u vertės pasiskirsto 91,9–207,2 kPa intervale, odometrinių deformacijų modulio E_{oed} – 6,8–12,0 MPa, šlyties modulio G_{max} – 395–486 kPa, Puasono koeficiento μ – 0,470–0,481, dinaminio deformacijų modulio E_{dyn} – 1170–1429 kPa; viršutiniam devonui priklausančio mažo plastiškumo molio c_u vertės patenka į 16,3–140,2 kPa, E_{oed} – 5,5–12,6 MPa, G_{max} – 467–706 kPa, μ – 0,459–0,475, E_{dyn} – 1376–2061 kPa intervalus.

Environmentally friendly synthesis of biphasic calcium phosphates: transformation of gypsum under different synthesis profiles

Greta Linkaitė, Rūta Raišeliienė, Inga Grigoravičiūtė, Aivaras Kareiva

Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Biphasic calcium phosphates (BCP) are substances composed of two different calcium phosphates. BCPs are typically used in hard tissue engineering, e.g. bone tissue repair, dental treatment. Their use in this field is based on the fact that the inorganic part of natural hard tissue is composed of different calcium phosphates, mainly non-stoichiometric hydroxyapatite with carbonate ions in its structure, and other phases, such as magnesium whitlockite, in relatively small quantities. Pure single-phase calcium phosphates can also be used as substitutes for bone tissue, but the combination of several phases in varying proportions allows the characteristics of the implant, such as solubility in the physiological environment, osteoconductivity, osteoinductivity and mechanical properties to be varied in such a way as to meet specific medical needs. The aim of this study was to develop pellets composed of low-crystallinity carbonate hydroxyapatite (CHA) and magnesium whitlockite (Mg-WH) in different proportions to reproduce the composition of the inorganic matrix of natural bone.

The gypsum pellets used for the BCP synthesis were prepared in the laboratory from plaster of Paris and some additives. The syntheses were carried out by the dissolution-precipitation method at a low temperature of 80 °C to obtain low crystallinity products. Two types of synthesis dynamics, including static and rotational methods, have been employed to examine their impact on the phase composition, structure, and morphology of the synthesized products. To analyze the composition of the materials, a range of analytical techniques such as X-ray diffraction (XRD), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), and inductively coupled plasma optical emission spectrometry (ICP-OES) were used. Furthermore, scanning electron microscopy (SEM) and Brunauer-Emmett-Teller (BET) analysis were applied to assess the surface properties of the granules. BCP pellets with varying ratios of CHA and Mg-WH were produced, leading to differences in structural, chemical composition, and surface properties depending on the synthesis conditions. Analysis using XRD, FTIR, and ICP-OES revealed that higher concentrations of Mg²⁺ ions in the reaction mixture altered the phase composition of the BCP granules. Additionally, BET analysis indicated that increasing the Mg-WH content and reducing the CHA content resulted in decreased surface area and porosity of the pellets.

Mediciniškai svarbių bakterinių bioplėvelių elektrogeniškumo nustatymas

Evelina Lukaitė¹, Marius Butkevičius², Eglė Malachovskienė³, Algimantas Paškevičius³, Marius Dagys², Rokas Žalnėravičius^{1,2}

¹Elektrocheminės medžiagotyros skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras

²Bioanalizės skyrius, Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas

³Biodestruktorių tyrimo laboratorija, Gamtos tyrimų centras

Tyrimo tikslas: nustatyti mediciniškai svarbių bakterijų – Gram-teigiamų *S. haemolyticus*, *E. faecalis* ir Gram-neigiamų *P. aeruginosa*, *P. mirabilis* bioplėvelių elektroaktyvumą stacionariomis sąlygomis.

Darbo metodika: Siekiant įvertinti bioplėvelių elektrogeniškumą ir pagrindines formavimosi stadijas elektrocheminiais metodais, šiame darbe buvo naudota potenciometrinė ir amperometrinė analizė. Bioanodo atviros grandinės potencialo (angl. OCP) pokyčiams įvertinti buvo naudojama dviejų elektrodų sistema. Kaip darbinis elektrodas naudotas anglies audinys (CC). Palyginamasis elektrodas - Ag/AgCl (3M KCl). Siekiant nustatyti bioplėvelių ir/ar pavienių (angl. planktonic cells) bakterijų „generuojamą“ srovės dydį, bioanodas buvo tiriamas naudojant chronoamperometriją. Tuo tikslu pastovus ~0,0 mV potencialas buvo palaikomas 24 h. Šiam tikslui pasiekti buvo naudojama trijų elektrodų sistema. Pagalbinis elektrodas - Ti folija. Siekiant įvertinti ir susieti bakterijų metabolinį aktyvumą bei dauginimąsi su elektrocheminiais atsakais, bakterijų augimas buvo stebimas matuojant suspensijų optinį tankį (OD₆₀₀). Elektrocheminiai bei optiniai matavimai atlikti stacionariomis sąlygomis, kultivuojant bakterijas LB mitybinėje terpėje su ~10⁶ KSV mL⁻¹ pasėliu (kai t=0). Išmatuotos OCP vertės yra pateiktos Ag/AgCl (3M KCl) elektrodo atžvilgiu (+205 mV vs. SHE).

Rezultatai: gauti rezultatai rodo, kad bakterinių bioplėvelių formavimasis gali būti stebimas potenciometriškai. LB terpėje (be bakterijų), CC elektrodo potencialas yra teigiamas ir per 24 h svyruoja nuo +60 iki +40 mV. Į LB terpę įnešus pasėlį, elektrodo potencialas ima palaipsniui mažėti ir, priklausomai nuo bakterijų rūšies, po 24 h svyruoja nuo -200 iki -300 mV. Didžiausias neigiamas OCP (-303 mV) gautas kultivuojant *E. faecalis* bakterijas, tuo tarpu *S. haemolyticus* buvo mažiausiai elektroaktyvi - OCP vertė siekė -165 mV po 24 h. Chronoamperometrijos metodu gauti rezultatai sutampa su OCP medodu gautais duomenimis: LB terpėje (be bakterijų) registruotos srovės tankis tiek su pridėtais redokso mediatoriais tiek ir be jų yra artimas 0 nA cm⁻². Tuo tarpu, įnešus *E. faecalis* bakterijas „registruotos“ srovės tankis buvo didžiausias ir siekė 435 nA cm⁻². Analogiškai OCP matavimams, *S. haemolyticus* bakterijų atveju „sugeneruota“ srovės tankio vertė 120 nA cm⁻² buvo mažiausia. Pastebėta, kad OCP metodas yra jautresnis stebint bioplėvelių formavimąsi nei amperometrija. Potencialo kitimas tiksliau atkartoja bakterijų augimo kreivės profilį. Šie rezultatai išryškina elektrocheminių biojutiklių galimybes greitai aptikti ir analizuoti su bakterinėmis bioplėvelėmis susijusias infekcijas, todėl galėtų būti sėkmingai integruoti į žaizdų tvarsčius.

Ekstruzijos būdu gautų celiuliozės diacetato ir kavos lukštų kompozicijų savybės

Laurynas Lukomskis, Laura Pečiulytė

Kauno technologijos universiteto Cheminės technologijos fakulteto Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Donelaičio g. 73, Kaunas, Lietuva

Didelis sintetinių plastikų naudojimas kelia susirūpinimą visame pasaulyje dėl didžiulių atliekų kiekių, kurioms suirti reikia daugybės metų. Kasmet europiečiai išmeta apie 26 mln. tonų plastiko atliekų ir tik mažiau nei 30% jų surenkama perdirbti, o likę 70% plastiko atliekų atsiduria sąvartynuose, sudeginama arba iš viso nesurenkama ir patenka į aplinką. Biologiškai skaidūs polimerai yra įprastinių sintetinių polimerų sukeltos taršos problemų sprendimas. Šiam tikslui vienas iš perspektyvių biopolimerų yra celiuliozė ir jos dariniai, tačiau jie nėra termoplastikai, t.y. jų perdirbti į produktus negalima pramonėje naudojamais įprastais termoplastikams metodais, tokiais kaip ekstruzija, injekcinis liejimas, 3D spausdinimas ir kt. Tačiau panaudojant plastiklius, tokius kaip triacetinas, trietilcitratas ar glicerolis sumažinama tarp molekulinė sąveika ir atsiranda galimybė perdirbti celiuliozės darinius terminiais būdais. O kompozicijų formavimas su atliekomis, tokiomis kaip žemės ūkio ar maisto pramonės atliekos, sprendžia atliekų panaudojimo ir produkto atpiginimo problemas. Taigi šio darbo tikslas – ekstruzijos būdu gauti celiuliozės diacetato ir kavos lukštų kompozicijas bei iširti jų savybes.

Celiuliozės diacetato ir kavos lukštų kompozicijos buvo formuojamos ekstruzijos būdu, naudojant skirtingo dalelių dydžio kavos lukštų frakcijas bei varijuojant jų kiekiu. Gautų kompozicijų savybės įvertintos nustatius takumo indeksą, kietumą, mechanines savybes, bei vilgymo vandeniui kampą.

Nustatyta, kad didėjant kavos lukštų dalelių dydžiui ir kiekiui kompozicijoje, gaunamas mažesnis takumo indeksas. Kietumo vertės didėja didinant kavos lukštų kiekį kompozicijoje, o dalelių dydžio įtaka kompozicijos kietumui minimali. Mechaninių savybių tyrimas parodė, jog kompozicijos stiprumas ir ištiesa mažėja didinant kavos lukštų kiekį ir jų dalelių dydį. Tampros modulis didėja didinant kavos lukštų kiekį, o naudojant stambesnes daleles gaunamas mažesnės tampros modulio vertės. Nustatius vilgymo kampo vertes, matyti, kad kavos lukštų kiekio ir dalelių dydžio įtaka kompozicijų hidrofobiškumui minimali.

49

Bioaktyvių 3D karkasų modeliavimas kaulinio audinio inžinerijai

Jokūbas Lukošius, Ugnius Dijokas, Odeta Baniukaitienė

Kauno technologijos universiteto Cheminės technologijos fakulteto Polimerų chemijos ir technologijos katedra

Klinikinės praktikos duomenimis dėl įvairių traumų ar degeneracinių ligų dažniausiai yra susiduriama su kaulinio audinio pažeidimais. Nepaisant reikšmingos pažangos kaulinio audinio transplantacijos srityje, vis dar susiduriama su iššūkiais, susijusiais su transplantų kokybe, jų trūkumu bei organizmo imuninio atmetimo reakcijomis. Visame pasaulyje, įskaitant Lietuvą, mokslininkai intensyviai tyrinėja ir kuria biomedžiagas, galinčias pakeisti donoro transplantus ir taip išspręsti su transplantacijomis susijusias problemas. Didžiąją perspektyvą turi 3D akyti kompozitiniai karkasai.

Šio tyrimo tikslas buvo sukurti ir įvertinti 3D bioaktyvius karkasus kaulinio audinio inžinerijai. Karkasų gavimui pasirinkta poli(pieno rūgštis) (PLA) bei hidroksiapatitas (HAP). 3D karkasų modeliavimui naudota „Z-Suite“ kompiuterinė programa, o sukurtų 3D kompozitinių karkasų modeliai atspausdinti naudojant 3D spausdintuvą *Zortrax M200 Plus*. Atlikti spektroskopiniai tyrimai: FT-IR spektrai užrašyti naudojant *Perkin Elmer Spectrum GX FT-IR* spektrometrą, o ^{13}C BMR spektrai - *Bruker Avance III (400 MHz)* spektrometru. Neorganinių medžiagų kiekis kompozite apskaičiuojamas pagal masės kitimus, deginant bandinius mufelinėje krosnyje *SNOL 8,2/1100*. Suformuotų karkasų morfologija tirta aukštos skiriamosios gebos *S-3400N* skenuojančiu elektroniniu mikroskopu.

Sukurti 3D kompozitinių karkasų modeliai, kurių akytumas kinta nuo 20 iki 90 %. Nustatyta, kad kompozitinės PLA-HAP gijos sudėtis ir technologiniai įrangos parametrai turi įtakos 3D spausdinimo procesui, sluoksnių sukibimui bei karkasų morfologijai. Karkasų mechaninės savybės priklauso nuo HAP procentinės masės dalies kompozite bei nuo struktūrinių jo parametų.

Žemės dangos pokyčiai agrariniame kraštovaizdyje remiantis 1946-2020 metų aerofotonuotrukų vizualine informacija

Julius Mačiulaitis, Darijus Veteikis, Ričardas Skorupskas, Jurgita Mačiulytė, Ieva Misiūnė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Vilniaus universiteto (Post)autoritarinių kraštovaizdžių tyrimų centras (PAScapes)

Lietuvos agrarinio kraštovaizdžio transformacija XX–XXI a. glaudžiai susijusi su reikšmingomis politinėmis, ekonominėmis ir socialinėmis reformomis: sovietmečiu vykdyta kolektyvizacija ir plataus masto melioracija iš esmės pakeitė tradicinę žemėnaudos struktūrą, o po nepriklausomybės atkūrimo agrarinio kraštovaizdžio dinamika kito dėl žemės nuosavybės grąžinimo, renatūralizacijos bei urbanizacijos, o po įstojimo į ES dėl žemės ūkio gamybos augimo. Siekiant nustatyti ir įvertinti šių transformacijų poveikį kraštovaizdžiui, tyrimui pasitelkta istorinių ir šiuolaikinių aerofotonuotrukų analizė, leidžianti atkurti ilgalaikes žemės dangos kaitos trajektorijas.

Tyrimui buvo pasirinktos reprezentatyvios teritorijos, kurios skiriasi gamtinėmis sąlygomis, kaimo visuomenės socioekonominė raida, urbanizacijos lygiu. Naudojant Lietuvos centriniame valstybės archyve saugomų aerofotonuotrukų vizualinę informaciją, kuri yra atvarta visuomenei e-archyvai.lt portale bei vėlesnių laikų aerofotonuotrukas, prieinamas Lietuvos erdvinės informacijos portale geoportal.lt, buvo analizuojami 3 istoriniai tarpsniai, atspindintys didžiausių žemės dangos kaitos procesų vyksmą. Tai XX a. 5-6 deš. – istorinis tarpsnis, atspindintis kraštovaizdžio struktūrą iki radikalių žemės naudojimo pertvarkymų. Antrasis tarpsnis – XX a. 10 deš., fiksuojantis pirmuosius pokyčius vykstant dekoloktyvizacijos procesui. Trečiasis tarpsnis – XXI a. 2-3 deš. – žymintis dabartinę situaciją. Vaizdiniai aerofotonuotrukų duomenys buvo georeferencijuoti ir analizuoti GIS aplinkoje, naudojant ArcGIS Pro 3.4.2 programinę įrangą. Taikant vizualinės interpretacijos metodus ir testuojant mašininio mokymosi modelį, žemės danga klasifikuota į septynias klases: dirbamą žemę, kelius, miškus, pelkes, pievas, užstatytas teritorijas ir vandens telkinius. Klasifikacija atlikta pagal kelis esminius principus: spektrines ir tekstūrines charakteristikas (tonų, šešėlių ir tekstūros skirtumus), erdvinę konfigūraciją (formą ir pasiskirstymą kraštovaizdyje) bei laiko kaitą, užtikrinant skirtingų tarpsnių duomenų palyginamumą. Kraštovaizdžio pokyčiai identifikuoti atliekant lyginamąją analizę su skirtingų metų erdviniais žemės dangos duomenimis.

Tyrimo rezultatai atskleidė, kad sovietmečiu agrarinis kraštovaizdis patyrė radikalius struktūrinius pokyčius, kurie turėjo ilgalaikių pasekmių. Žemumose sunyko natūralūs kraštovaizdžio elementai, teritorijos tapo homogeniškesnės, o aukštumose agrarinis kraštovaizdis išlaikė ryškesnius struktūrinius kontrastus. Taip pat tyrimas parodė, kad senųjų aerofotonuotrukų panaudojimas leidžia atkurti ilgalaikius pokyčių procesus ir suteikia erdvinį kontekstą istorinei žemėnaudos analizei. Senųjų aerofotonuotrukų integracija su šiuolaikiniais erdviniais duomenimis leidžia kurti ilgalaikes duomenų sekas, kurios yra itin vertingos kraštovaizdžio struktūros raidos tyrimuose.

51

Preparation of Sm³⁺ ions doped MgAl₂O₄ by sol-gel polyacrylamide synthesis

Pranga Prava Mandal, Dovydas Karoblis, Aivaras Kareiva

Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry, Vilnius University

Luminescence is a spontaneous emission of radiation from an electronically excited species not in thermal equilibrium with its environment. Luminescent materials can absorb energy and then emit that energy as photons of light. Luminescent materials are composed of a different matrix and an activator (usually transition element or lanthanide). Many different classes of materials can be used as matrices, including perovskites, pyrochlores, spinels, etc. In our experiment we are using MgAl₂O₄ spinel material as a matrix. While many different lanthanide ions have already been doped into the magnesium aluminate structure, there is no work regarding the Sm³⁺ substitution for this spinel. In this work, we investigated the possible Sm³⁺ ions doping into the MgAl₂O₄ system.

MgAl₂O₄ spinel was prepared by sol-gel polyacrylamide synthesis route. As this method uses acrylamide, which during the polymerization reaction forms a polymer carcass, restricting the growth of the particles. We have prepared phase pure MgAl₂O₄ compounds in the broad temperature range from 700 °C up to 1200 °C with relatively short annealing time of 2 h. When we tried the doping of small concentration of Sm³⁺ ions, there was a formation of MgO as an impurity phase. The final compounds were analyzed by different techniques, including X-ray diffraction, scanning electron microscopy (SEM) FT-IR spectroscopy. SEM results showed that with increasing temperature the particle size increased. FTIR graphs showed the formation of spinel structure as well as that at the lower temperature (700 °C), there were additional peaks which could possibly be for Mg-O-C due to incomplete combustion.

Synthesis of modified hydroxyapatite for oral care products

Sylvia Veronica Mcglone, Justinas Januškevičius, Živilė Stankevičiūtė

Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry

Oral health is a critical aspect of hygiene, health, and overall well-being. Traditional fluoride-based treatments have limitations, including potential toxicity and ineffectiveness in certain conditions. Hydroxyapatite (HA; $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$), a biocompatible and non-toxic alternative, can repair and protect tooth enamel as HA is naturally found in enamel and dentine. However, its effectiveness can be improved through certain structural and chemical modifications. Modified HA, used for biomedical applications, is chemically prepared to achieve tailored properties such as chemical purity, crystal morphology, and crystal size. This study focuses on the synthesis of modified hydroxyapatite to enhance its properties for use in oral care products. By altering its composition and structure, the goal is to improve antibacterial activity and overall effectiveness in preventing dental issues. This research aims to explore a more efficient approach to dental health using modified hydroxyapatite.

In this study, wet precipitation synthesis procedure was used to prepare Mg^{2+} substituted hydroxyapatite with 5 and 10 mol% of Mg. Subsequent characterization of the synthesized materials was conducted. The HA samples, doped with Mg^{2+} , were analyzed by X-ray diffraction and FTIR methods. The morphology dependence on the amount of magnesium, mixing time and mixing speed were determined by scanning using an electron microscope. EDX analysis was used for the determination of the amount of magnesium in the samples.

2-aril-4*h*-benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino darinių sintezės tyrimas

Urtė Milerytė, Rita Bukšnaitienė, Ieva Žutautė

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Amiloidai yra amorfiniai baltymų agregatai, kuriems būdinga netirpi fibrilinė morfologija, susidarant dėl neteisingo β klosčių susilankstymo. Šie agregatai gali kauptis įvairiuose organuose, sukeldami amiloidozę, kuri susijusi su tokiais ligomis kaip Alzheimerio ir Parkinsono liga bei II tipo cukrinis diabetas. Naujausi tyrimai pabrėžia skysčio-skysčio fazių atskyrimo (SSFA) svarbą kaip vieną iš esminių amiloidų formavimosi etapų. Nors SSFA atlieka kritinį vaidmenį ląstelių organizacijoje, jo disreguliacija gali būti susijusi su neurodegeneracinių ir onkologinių ligų patogenezė. Baltymų koncentracijos padidėjimas šio proceso metu gali inicijuoti molekulinis pokyčius, skatinančius citotoksiškų fibrilių susidarymą.

Atsižvelgiant į tai, kad SSFA disreguliacija gali lemti patologinių baltymų agregatų susidarymą, vis daugiau dėmesio skiriama junginiams, galintiems moduluoti šiuos procesus ir slopinti amiloidinių fibrilių formavimąsi. Nauji moksliniai duomenys rodo, kad imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino karkasas yra perspektyvus farmakoforas amiloidinių baltymų agregacijai slopinti. Dėl gebėjimo sąveikauti su biologinėmis makromolekulėmis imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino dariniai gali tapti reikšmingais fazių atskyrimo procesų modulatoriais, o tai ypač svarbu neurodegeneracinių ligų kontekste.

Šio tyrimo tikslas – susintetinti įvairius 2-arilbenzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino junginius, gebančius slopinti amiloidų agregaciją. Sintetinami dariniai turi naują struktūrinę modifikaciją – pakaitą C₂ padėtyje šalia dvigubą ryšio. Kadangi šie junginiai nauji, pirmiausia siekiama nustatyti optimalų jų sintezės metodą. Pradinis junginys 1-(3-fenilprop-2-in-1-il)-1,3-dihidro-2*H*-benzo[*d*]imidazol-2-*tionas* buvo gautas alkilinant 1,2-diaminobenzeną su (3-bromprop-1-in-1-il)benzenu, po to vykdant susidariusio tarpinio produkto kondensaciją su tiokarbonildiimidazolu. Šiuo metu vykdomas gauto N-alkiniltiobenzimidazolo ciklizacijos reakcijos sąlygų optimizavimas su įvairiais metalų katalizatoriais, siekiant padidinti reakcijos selektyvumą.

54

Application of the Czochralski method for single crystal growth

Miglė Minalgaitė¹, Skirmantė Tutlienė², Martynas Misevičius^{1,2}, Ramūnas Skaudžius¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Vilnius University

²Department of Chemical Engineering and Technology

According to the online encyclopaedia, Britannica, a single crystal is defined as a solid object in which an orderly three-dimensional arrangement of atoms, ions, or molecules is repeated throughout the entire volume. Single crystals represent a pivotal component within technological applications, with utilisation spanning domains such as optoelectronics, laser technology (Yan et al., 2023) and X-ray detection (Liu et al., 2024), amongst numerous others. The Czochralski method was a major breakthrough in the field of crystal growing, enabling the production of crystals of unparalleled quality (Brandle, 2004).

The objective of this study is to gain insight into the Czochralski method. This is a process that is used to produce single crystals from a melt. The material is melted in a crucible, after which the seed crystal is immersed in the melt, slowly rotated and extracted. The melt that is pulled with the crystal seed crystallises on its surface, and the crystal continues to grow. In addition to the capabilities of the existing equipment, the process of LiF single crystal growth is discussed.

References

- Brandle, C. D. (2004). Czochralski growth of oxides. *Journal of Crystal Growth*, 264(4), 593–604.
- Liu, D., Zheng, Y., Sui, X. Y., Wu, X. F., Zou, C., Peng, Y., Liu, X., Lin, M., Wei, Z., Zhou, H., Yao, Y. F., Dai, S., Yuan, H., Yang, H. G., Yang, S., & Hou, Y. (2024). Universal growth of perovskite thin monocrystals from high solute flux for sensitive self-driven X-ray detection. *Nature Communications* 2024 15:1, 15(1), 1–10
- Yan, J., Li, H., Aldamasy, M. H., Frasca, C., Abate, A., Zhao, K., & Hu, Y. (2023). Advances in the Synthesis of Halide Perovskite Single Crystals for Optoelectronic Applications. *Chemistry of Materials*, 35(7), 2683–2712.

Synthesis and responsive behavior of cross-linked dextrin octenylsuccinate-*graft*-poly(*N*-isopropylacrylamide) copolymers

Emilija Morkvėnaitė, Ramunė Rutkaitė

Department of Polymer Chemistry and Technology, Kaunas University of Technology, Lithuania

Thermo-responsive biocompatible polymeric materials play a crucial role in modern material chemistry and biomedical applications due to their ability to undergo phase transitions in response to temperature variations. These materials are particularly valuable in controlled drug delivery systems, tissue engineering, biosensors, and stimuli-responsive biological applications. The ability of thermo-responsive biopolymers to modulate their physical and chemical properties under specific environmental conditions enhances drug stability, bioavailability, and targeted release. By fine-tuning their phase transition temperatures, these materials can be tailored for specific applications, such as injectable hydrogels, smart coatings, and encapsulation matrices for bioactive compounds.

This study was focused on the synthesis and characterization of cross-linked dextrin octenylsuccinate-*graft*-poly(*N*-isopropylacrylamide) copolymers, utilizing poly(*N*-isopropylacrylamide) as thermo-responsive segment and *N,N*-methylenebisacrylamide as cross-linking agent. Four dextrin octenylsuccinates of different composition were synthesized by varying OSA content (4.37 %, 6.82 %, 8.05 %, and 10.67 %). The grafting and cross-linking reactions were carried out in an aqueous medium using free-radical mechanism.

The synthesized thermo-responsive copolymers were extensively analyzed using Fourier-transform infrared spectroscopy to confirm structural modifications, thermogravimetric analysis to determine thermal stability, and dynamic light scattering DLS to investigate the properties of the aqueous dispersions. Since the transportation of bioactive compounds using biopolymeric matrices relies on their ability to encapsulate and release various substances – such as pharmaceuticals, nutrients, and functional additives – a swelling study was performed in simulated biological media, including gastric fluid, intestinal fluid, and blood plasma. The experimental results demonstrated that the synthesized cross-linked copolymers exhibited distinct thermo-responsive behavior. Upon reaching a lower critical solution temperature of 31–33 °C, the aqueous solutions of the copolymers underwent phase separation indicating conformational transition of the copolymers in water. The degree of cross-linking and OSA content significantly influenced the swelling properties of the copolymers in different media. Additionally, the ability of these materials to transition between hydrophilic and hydrophobic states based on temperature changes provides a promising approach for targeted and sustained drug release, particularly in environments with physiological temperature variations.

56

Mg/Al sluoksniuotų dvigubų hidroksidų (SDH) sintezė ir savybių nustatymas

Gabija Navašinskaitė, Denis Sokol, Gabrielė Klydžiūtė, Aivaras Kareiva

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas,

Sluoksniuotieji dvigubi hidroksidai (SDH) - klasė sintetinių molių, savo struktūroje turinčių katijoninius ir anijoninius sluoksnius. Katijoniniai sluoksniai sudaryti iš metalų hidroksidų turi į brucitą panašią struktūrą, o vandens ir anjonų suformuoti tarpstuksniai užtikrina krūvio pusiausvyrą. Sluoksniuotieji dvigubi hidroksidai - medžiagos, kurias nesudėtinga sintetinti ir modifikuoti, norint išgauti reikiamas savybes. Katijoninius sluoksnius galima formuoti iš daugybės metalų derinių, suteikti reikiamų savybių legiruojant arba keičiant tarpstuksnyje esančius anijonus. Šio tyrimo tikslas - susintetinti $Mg_3Al_1(OH)_Y$, $Mg_{3-x}Ag_xAl_1(OH)_Y$, ir $Mg_3Al_{1-x}Cr_x(OH)_Y$ SDH ir ištirti gautų medžiagų struktūrą bei savybes.

Mg/Al SDH sintetinami bendrojo nusodinimo metodu. Reikiamomis proporcijomis sumaišyti Mg ir Al nitratų tirpalai lėtai lašinami į natrio karbonato tirpalą, kurio pH palaikomas lašinant NaOH, susintetinta medžiaga brandinama 80°C temperatūroje. SDH su Cr sintetinamas tokiu pat būdu, tik dalis aliuminio nitrato pakeičiama $Cr(NO_3)_3$ arba CrO_3 tirpalu. SDH su Ag sintezė atliekama naudojant iš anksto paruoštą Mg/Al SDH, kuris užpilamas $AgNO_3$ tirpalu ir 15 minučių maišomas 80-100°C temperatūroje. Temperatūra palaikoma hidroterminio reaktoriaus arba kaitlentės pagalba.

Al^{3+} jonų pakeitimas Cr^{3+} jonais katijoniniame SDH sluoksnyje buvo sėkmingas. Rentgeno difrakcinės analizės duomenys rodo, kad reakcijos metu nesusidarė jokių papildomų fazių, nepriklausomai nuo to, kokia medžiaga naudojama kaip Cr šaltinis. Mg^{2+} jonų pakeitimas Ag^+ jonais buvo nesėkmingas.

Applicability of MXene heavy metal sensor detection in real world water samples

Ilya Navitski¹, Šarūnas Žukauskas¹, Simonas Ramanavičius¹, Alma Ručinskienė¹, Ernestas Svirbutavičius², Arūnas Ramanavičius²

¹State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology (FTMC)

²Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University (VU)

Cadmium contamination presents significant environmental and health concern. Cadmium can damage kidneys, bone structures, and respiratory system and is a known carcinogen. The use of cadmium in various industries generates waste, which can contaminate environments and allow the metal or its ion to enter human body. Therefore, developing methods to detect cadmium in different systems is essential. In the case of water, several types of sensors have been implemented for cadmium detection. Electrochemical sensors, known for being cost-effective, reliable, and easy to use, are one the best option. The choice of material for these sensors is crucial, and 2D nanostructures called MXenes are among the best candidates due to their favorable characteristics. In this study, we designed a sensor based on the interaction between MXenes and cadmium ions to determine cadmium concentrations.

Drop-casting of MXenes+Nafion mixture on the glassy carbon electrode surface was used as a sensor preparation procedure. Differential pulse voltammetry was used to determine selectivity, sensitivity, and the limit of detection (LOD), as well as to examine various sensing dependencies. Acetic buffer solution (ACB) was used as the medium for cadmium detection. To evaluate stability, sensors were prepared simultaneously and tested at one-week intervals over a four-week period.

Cadmium detection was depended on temperature and pH. At pH 4.5 at room temperature, the sensor achieved a sensitivity of $5.11 \mu\text{A}/(\mu\text{M}\cdot\text{cm}^2)$ and an LOD of $0.82 \mu\text{M}$, within a concentration range of $1.03 - 27.53 \mu\text{M}$. The sensor maintained relatively stable performance for three weeks, with a gradual decline in sensitivity due to oxidation of MXenes. The sensor was also evaluated for its performance in real-world water samples, showing high reliability and accuracy in detecting cadmium ion in Vilnia river, Sudervė lake and Vilnius green lakes.

In conclusion, the developed sensor demonstrated high sensitivity and reliability, successfully detecting cadmium concentrations in various water samples. Although its LOD is too high for detecting cadmium in drinking water, it is suitable for use in industrial areas where cadmium concentrations tend to be higher.

Preparation and functionalization of gold nanorods for bioconjugation applications

Tymofii Omelchenko, Marina Sapauskiene, Veronika Zahorodna, Oleksiy Gogotsi, Almira Ramanaviciene, Anton Popov

Vilnius University, Faculty of Chemistry and Geosciences, Center of Nanotechnology and Materials Science

Gold nanorods (AuNRs) are rod-shaped nanoparticles that have gained significant attention recently. Their unique one-dimensional shape and tunable plasmonic properties make them valuable for various applications. As synthetic methods were developed, researchers began attaching various materials to AuNRs. This approach aims to enhance their plasmonic properties and explore cutting-edge technologies (Zheng et al., 2021). Once researchers have achieved a reasonable size control and monodispersity level, the next step is shape control. This involves synthesizing non-spherical nanoparticles, where the size and other topological features can be tailored through careful selection of experimental conditions. A significant challenge in applying bioconjugates is achieving stable and efficient bioconjugation while preserving their structural integrity and functionality. Traditional functionalization methods often face issues such as aggregation, ineffective attachment of biomolecules, and degradation of optical properties (Vedhanayagam et al., 2022).

This study aims to develop an optimized method for synthesizing and functionalizing gold nanorods for further bioconjugation. AuNRs with varying aspect ratios were successfully synthesized using a seed-mediated growth method by adjusting the concentration of silver nitrate and systematically varying the concentrations of AgNO_3 . Furthermore, the synthesis of AuNRs with a high aspect ratio was achieved. These nanorods exhibited longitudinal surface plasmon resonance (LSPR) peaks in the range of 1000 to 1200 nm. The increase in aspect ratio was observed through scanning electron microscopy (SEM) and UV-Vis spectroscopy, which showed a progressive elongation of the nanorods with a controlled size distribution. Surface modification methods were employed to create nanocomposites of AuNRs with MXenes and/or polymers.

References

- Zheng, J., Cheng, X., Zhang, H., Bai, X., Ai, R., Shao, L., & Wang, J. (2021). Gold nanorods: The most versatile plasmonic nanoparticles. *Chemical Reviews*, *121*(21), 13342–13453.
- Vedhanayagam, M., Andra, S., Muthalagu, M., & Sreeram, K. J. (2022). Influence of functionalized gold nanorods on the structure of cytochrome-C: An effective bio-nanoconjugate for biomedical applications. *Inorganic Chemistry Communications*, *146*, 110182.

NiPdPt nanozimo taikymas kuriant pirmos kartos amperometrinių jutiklių skirtą gliukozės koncentracijos nustatymui

Austėja Orintaitė, Asta Kaušaitė-Minkštimienė

NanoTechnas – Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Cukrinis diabetas – klatinga liga, kurios valdymui būtina nuolatinė gliukozės koncentracijos kraujyje stebėseną. Pagal gliukozės kiekio kraujyje kitimo tendencijas galima atitinkamai taikyti gydymo priemones, siekiant palengvinti šios ligos eigą bei išvengti su cukriniu diabetu susijusių komplikacijų. Dėl nesudėtingo veikimo principo, didelio jautrio ir atrankumo, gliukozės kiekio nustatymui plačiai taikomi amperometriniai biologiniai jutikliai. Šie biologiniai jutikliai išmatuoja elektros srovę sugeneruotą dėl indikatorinio elektrodo paviršiuje imobilizuotos gliukozės oksidazės (GOx) katalizuojamos gliukozės oksidacijos molekulinio deguonimi.

Siekiant patobulinti biologinių jutiklių analizes charakteristikas, greta kitų nanomedžiagų, vis dažniau naudojami nanozimai – fermentų katalizines savybes imituojančios nebaltyminės kilmės nanomedžiagos, kurios, priešingai nei fermentai, pasižymi atsparumu žalingam aplinkos poveikiui, pavyzdžiui, temperatūros ar pH pokyčiams. Šių medžiagų sintezė ir gryninimas reikalauja mažiau laiko bei finansinių sąnaudų lyginant su fermentais. Be to, fermento ir nanozimo kombinacija leidžia ženkliai padidinti biologinio jutiklio stabilumą bei analizinio signalo dydį, taip pat padeda išvengti nepageidaujamos elektrochemiškai aktyvių pašalinių medžiagų įtakos biologinio jutiklio analiziniam signalui.

Šiame darbe susintetintos NiPtPd nanodalelės, kurios kartu su GOx panaudotos amperometrinio gliukozės biologinio jutiklio kūrimui. Taip pat atlikti šio biologinio jutiklio indikatorinio elektrodo paruošimo sąlygų optimizavimo tyrimai.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-24-7.

Ledyno pakraščio fliuvioglacialinės sedimentacijos zonų ypatybės Rytų Lietuvoje

Miglė Paškevičiūtė, Petras Šinkūnas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Tyrimo tikslas – išsiaiškinti paskutinio apledėjimo Baltijos stadijos ledyno kraštiniuose dariniuose įsiterpusių deltos formos fliuvioglacialinių nuogulų darinių susidarymo mechanizmą ir sedimentacijos sąlygas. Taip pat siekiama nustatyti, ar šių darinių susidarymas galėjo būti susijęs su ledyno liežuvių slėniais, kurie tirpstant ledynui sudarė sąlygas fliuvioglacialinei lygumai formuotis. Pagrindinė taikoma metodika – sedimentologinė analizė, kurios metu analizuotos nuogulų struktūros ir tekstūros. Atlikti sluoksnelių polinkio kampo ir krypties matavimai, siekiant nustatyti nuogulas transportavusių paleosrautų kryptis bei jų dinamikos pokyčius. Taip pat atlikta geomorfologinių duomenų analizė, pasitelkiant LiDAR duomenų pagrindu sukurtą skaitmeninį reljefo modelį (DTM). Papildomai informacijai gauti naudota archyvinių gręžinių analizė, padedanti įvertinti fliuvioglacialinių nuogulų storumės išsidėstymą erdvėje.

Gauti preliminarūs rezultatai rodo, kad tirtose vietovėse Molėtų ir Utenos apylinkėse, fliuvioglacialinių nuogulų išplitimo zonoje, vertikaliame pjūvyje dominuoja panaši litologija. Virš moreninio pagrindo, jei jis aptinkamas, dažniausiai slūgso įvairaus stambumo kryžmiškai įkypai sluoksniuoto žvirgždingo smėlio sluoksniai, kurių storis svyruoja nuo kelių iki keliolikos metrų. Didžiąją fliuvioglacialinių nuogulų storumės dalį sudaro ir smulkaus horizontaliai bei įkypai sluoksniuoto smėlio bei subhorizontaliai sluoksniuoto žvirgždo persisluoksniavimas. Jis rodo dinamišką pulsuojančių ledyno tirpsmo vandens srautų kaitą. Daugeliu atvejų fliuvioglacialinę storumę dengia diamikto – masyvios tekstūros žvirgždingų, molingų nuogulų sluoksniai.

Apie tai, kad tyrimo apylinkėse tirpstant ledynui vyko skirtingi sedimentaciniai procesai, liudija žemiau žvirgždingos fliuvioglacialinės storumės aptinkami smulkaus, gerai išrūšiuoto smėlio sluoksniai. Jie kartais būna atskirti ryškiu eroziniu paviršiumi nuo aukščiau esančių žvirgždingų nuogulų. Visos fliuvioglacialinės nuogulos išlaiko dominuojančią šiaurės rytų (ŠR), rytų (R) arba pietryčių (PR) kryptį. Tai patvirtina jų sąveiką su ledynu, atitinkančią jo judėjimo kryptis (priešingas atsitraukimui). Fliuvioglacialinių nuogulų storumės sandara ir litologinės ypatybės rodo, kad tirpstant ledynui tirtose apylinkėse vyko įvairūs sedimentaciniai procesai. Aptiktas smulkaus smėlio persisluoksniavimas su žvirgždingomis nuogulomis leidžia daryti prielaidą apie kintančias srautų hidrodinamines sąlygas ir galimą sąveiką su ledyno liežuvių suformuotais paleoslėniais. Geomorfologinė analizė rodo, kad fliuvioglacialinių nuogulų išplitimas erdvėje ir jų morfologinės ypatybės galėjo formuotis veikiant įvairiems veiksniams, tarp kurių – ledo blokų palaidojimas ir klimato sąlygų pokyčiai ledyno pakraščio zonoje. Preliminarūs tyrimo rezultatai leidžia manyti, kad Molėtų ir Utenos apylinkėse esantys fliuvioglacialinių nuogulų telkiniai sudaro vientisus kompleksus, kuriuose sedimentacija vyko veikiant šiaurės rytų – pietryčių krypties ledyno tirpsmo vandens srautams, o jos pobūdį galėjo lemti anksčiau susiformavę paleoslėniai.

61

2-Alkenilthioimidazolų elektrofilinės ciklizacijos reakcijų tyrimas

Martyna Paulauskaitė, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Junginiai, turintys imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentą, pasižymi įvairiomis biologinėmis savybėmis. Šie junginiai yra chemiškai stabilūs ir geba specifiskai jungtis su įvairiomis biomolekulėmis, todėl yra plačiai taikomi moksliniuose tyrimuose dėl jų potencialaus panaudojimo kuriant vaistus.

Dažniausiai imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmento susidarymą apima nukleofilinio pakeitimo arba kondensacijos reakcijos, kurios reikalauja kelių sintezės etapų. Pastaruoju metu populiarus būdas sintetinti heterociklines sistemas tapo alkinų elektrofilų inicijuojamos nukleofilinės ciklizacijos reakcijos. Šiuo metodu galima ne tik efektyviai formuoti imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino žiedus, bet ir pasiekti gerą reakcijos selektyvumą bei didelę išeią. Tačiau 2-alkenilthioimidazolų elektrofilų inicijuojama ciklizacijos reakcija yra labai mažai tyrinėta. Tikėtina, kad šių junginių ciklizacijos reakcijose gauti heterociklai pasižymės naujomis cheminėmis savybėmis ir biologiniu aktyvumu. Taigi šiame tyrime 2-cinamiltiobenzimidazolas buvo pasirinktas kaip modelinis junginys ciklizacijos reakcijos sąlygoms optimizuoti bei ištirti reakcijos eiga ir susidarančių produktų struktūrą.

Dvifunkcinių Hsp90 šaperono slopiklių, turinčių rezorcinolio ir benzimidazolo fragmentus, sintezė ir aktyvumo tyrimas

Vilius Petraška, Ieva Žutautė, Algirdas Brukštus

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Hsp90 (angl. Heat Shock Protein) yra molekulinis šaperonas, priklausantis šiluminio šoko baltymų šeimai. Jo molekulinė masė siekia apie 90 kDa ir jis sudaro maždaug 1-2% visų ląstelėse randamų baltymų (Chen et al, 2006). Hsp90 atlieka svarbų vaidmenį užtikrinant kitų baltymų susilankstymą, stabilizavimą streso sąlygomis bei jų degradaciją. Vėžinėse ląstelėse šis baltymas dalyvauja metastazės, proliferacijos ir kituose augimo procesuose, todėl jis tapo reikšmingu taikiniu vėžinių ir neurodegeneratyvinių ligų gydyme (Al-Jarrah et al., 2014). Tyrimai parodė, kad N-galo domene esanti ATP kišenė yra kritinė Hsp90 funkcionavimui, o jos slopinimas sutrikdo baltymų brendimą ir vėžinių ląstelių dauginimąsi. Viena iš Hsp90 slopiklių grupių yra junginiai, turintys rezorcinolio fragmentą. Šiai junginių grupei priklauso ir Onalespibas – slopiklis, sėkmingai užbaigęs klinikinius tyrimus. Remiantis šio junginio bei kitų Hsp90 slopiklių struktūrinėmis savybėmis ir siekiant padidinti aktyvių junginių selektyvumą bei saugumą, buvo atliktos izopropilgrupės ir izoindolino modifikacijos. Heterociklinis fragmentas buvo pakeistas benzimidazolu, o izopropilgrupė – erdviškai didesnėmis ciklopentano bei arilo grupėmis.

Darbo metu susintetinta septyniolika potencialių Hsp90 slopiklių reakciją atliekant mikrobangų reaktoriuje. Nustatyta, jog optimalios tokios sintezės sąlygos vykdant ją be tirpiklio yra 170 °C MW, 10 min, naudojant 1,1 ekv. organinės rūgšties.

References

- Chen, B., Zhong, D., & Monteiro, A. (2006). Comparative genomics and evolution of the HSP90 family of genes across all kingdoms of organisms. *BMC Genomics*, 7(1), 156.
- Al-Jarrah, M., Erekat, N., & Al-Khatib, A. (2014). Heat shock protein 90 is a potential therapeutic target for ameliorating skeletal muscle abnormalities in Parkinson's disease. *Neural Regeneration Research*, 9(6), 616.

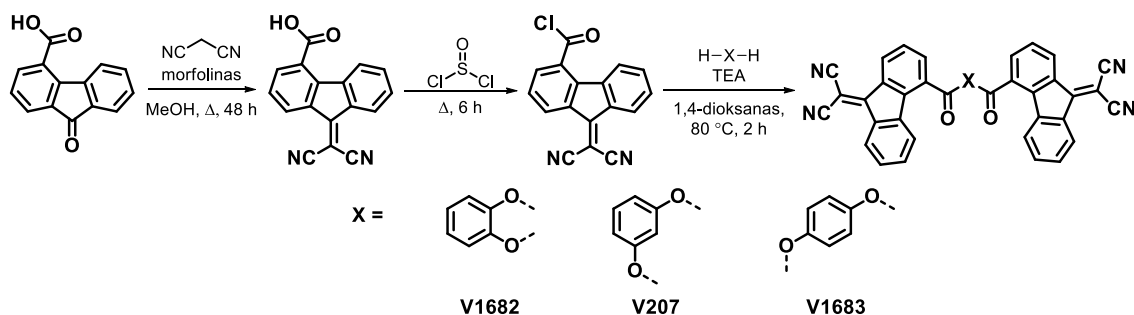
Elektronų pernaša pasižyminčių (9-fluoreniliden)malononitrilo darinių sintezė ir savybių tyrimas

Julius Petrulevičius¹, Marytė Daškevičienė¹, Giedrė Bubnienė¹, Vygintas Jankauskas²,
Giedrius Juška², Vytautas Getautis¹

¹Kauno technologijos universitetas, Organinės chemijos katedra, Kaunas, Lietuva

²Vilniaus universitetas, Cheminės fizikos institutas, Vilnius, Lietuva

Elektronų transportinė medžiaga (ETM) yra svarbus fotovoltinių prietaisų komponentas, palengvinantis fotogeneruotų elektronų pernašą iš fotoaktyvaus sluoksnio į katodą. Dažniausiai šio sluoksnio formavimui yra naudojamas fullerenas C60. Pastaruoju metu, kaip alternatyva fullerenui C60, dėl pigių reagentų ir paprastos sintezės didelį susidomėjimą kelia organinės ETM. Vienas iš organinių puslaidininkių panaudojimo privalumų – tai galimybė konstruoti lengvus ir lanksčius prietaisus (Lian et al., 2018; Zhang et al. 2020).



1 pav. ETM V1682, V207 ir V1683 sintezė.

Šiame darbe, taikant trijų stadijų sintezę, buvo gauti nauji ETM V1682, V207 ir V1683 (1 pav.) bei ištirtos šių medžiagų terminės, optinės ir fotoelektrinės savybės. Išmatavus naujų organinių puslaidininkių V1682, V207 ir V1683 dreifinį elektronų judrį buvo pastebėta, kad judris mažėja, kai molekulėje didėja atstumas tarp dviejų (9-fluoreniliden)malononitrilo chromoforų (1 lentelė).

1 lentelė. Naujų ETM elektronų dreifinis judris

ETM	d [μm] ^a	$\mu(0)$ [cm^2/Vs] ^b	$\mu(1 \cdot 10^6 \text{ V/cm})$ [cm^2/Vs] ^c
V1682	2,4	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$9,6 \cdot 10^{-4}$
V207	2,4	$1,3 \cdot 10^{-6}$	$6,9 \cdot 10^{-4}$
V1683	3,2	-	$\sim 7 \cdot 10^{-6}$

^aUžgarinto puslaidininkio storis; ^belektronų dreifinis judris nuliniame lauke; ^celektronų dreifinis judris esant $1 \cdot 10^6 \text{ V/cm}$ stiprio elektriniam laukui.

Literatūra

Lian, J., Lu, B., Niu, F., Zeng, P., & Zhan, X. (2018). Electron-transport materials in perovskite solar cells. *Small Methods*, 2(10), 1800082.

Zhang, S., Si, H., Fan, W., Shi, M., Li, M., Xu, C., Zhang, Z., Liao, Q., Sattar, A., Kang, Z., & Zhang, Y. (2020). Graphdiyne: Bridging SnO_2 and perovskite in planar solar cells. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(28), 11573–11582.

64

4-(7*H*-imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-5-il)anilino sintezė ir modifikavimas

Polina Pylskaja, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir Geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Baltymų agregacijos ir amiloidų susidarymo tyrimai yra vis labiau aktualūs dėl jų ryšio su įvairiomis neurodegeneracinėmis ir sisteminėmis ligomis, tokiomis kaip Alzheimerio liga, Parkinsono liga ir 2 tipo cukrinis diabetas. Amiloidinių fibrilių susidarymas yra vienas iš pagrindinių šių ligų priežasčių, todėl veiksmingų agregacijos slopiklių paieška yra itin svarbi mokslo ir medicinos srityse. Naujausi tyrimai rodo, kad imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino dariniai gali būti perspektyvūs amiloidų agregacijos modulatoriai. Siekiant praplėsti tiriamų junginių imtį, šiame darbe buvo atliekama 4-(7*H*-imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-5-il)anilino sintezė ir amino grupės modifikavimas.

Taikytas sintezės metodas apima auksu inicijuotą ciklizacijos reakciją, kurios metu iš atitinkamo 2-alkinilioimidazolo susidaro 4-(7*H*-imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-5-il)anilinas. Vėliau anilino grupė modifikuojama karbamato fragmentais, naudojant tinkamus elektrofilinius reagentus. Šio tyrimo rezultatai suteiks vertingos informacijos apie modifikuotų imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino darinių stabilumą ir chemines savybes, kurios gali turėti įtakos jų aktyvumui biologinėse sistemose.

65

3D spausdinimo technologijoje naudojamų plastikų sąveika su vandens terpe: QCM ir elektrocheminiai tyrimai

Deivis Plaušinitis, Evelina Vaicekauskaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto, Chemijos institutas, Fizikinės chemijos katedra

Sparčiai tobulėjant šiuolaikinėms technologijoms nemažą iššūkį kelia galimybės kaip įmanoma operatyviau modifikuoti laboratorijoje naudojamas tyrimo sistemas. Pavyzdžiui, kuriant chemo- bei bio-jutiklius yra būtina jau konstravimo etape keisti tokio jutiklio konfigūraciją ar jo dalį arba visą jutiklio celę. Šiuo metu tokiam tikslui kaip tik gali būti pritaikyta 3d spausdinimo technologija. Tačiau šiuo būdu pagamintos jutiklio dalys, kurios tiesiogiai kontaktuoja su darbinio tirpalu, gali užteršti tiek patį darbinį tirpalą, tiek ir jutiklio paviršių. Užteršimas gali vykti tomis medžiagomis, kurios tirpsta plastikui kontaktuojant su darbinio tirpalu. Tai gali būti įvairūs priedai, tokie kaip plastifikatoriai ar dažikliai, taip pat monomerai bei oligomerų grandys.

Todėl šiame darbe mes tyrėme dažniausiai naudojamų 3d spausdinimo plastikų pritaikomumą elektrocheminių sistemų dalims, kurios kontaktuoja su tiriamaisiais tirpalais, gaminti. Šiuo metu dažniausiai taikomos dvi, komerciškai lengvai prieinamos, 3d spausdinimo technologijos: išlydyto termoplastiko liejimo (**Fused Deposition Modeling, FDM**) bei fotopolimerizacijos (pavyzdžiui **Digital Light Processing, DLP**). Todėl savo eksperimentuose mes taikėme PLA, PET-G, ASA, PP termoplastikus bei skirtingas fotopolimerines dervas: standartinio tipo, ABS tipo, augalinės kilmės ir derivą tirpę vandenyje.

Eksperimentinis darbas buvo vykdomas dviem etapais. Pirmame etape, taikdami kvarco kristalo mikrosvarstyklių metodą (QCM) mes tyrėme plastikų paviršinio tirpimo greitį vandens terpėje. Tuo būdu, priklausomai nuo medžiagos, QCM jutiklis buvo padengiamas pasirinkto plastiko plonu sluoksniu ir patalpinamas į hermetišką celę. Užpildžius celę dejonizuotu vandeniu buvo stebimas QCM jutiklio rezonansinio dažnio pokytis, kuris yra tiesiog proporcingas plastiko sluoksnio masės pokyčiui. Antrame eksperimentų etape buvo atliekami Au elektrodo, esančio kontakte su tiriamo plastiko celėje esančiu tirpalu, užsiteršimo tyrimai. Šiam tikslui buvo taikomi elektrocheminio impedanso spektroskopijos (EIS) bei ciklinės voltamperometrijos (CV) metodai.

Atliekant QCM tyrimus buvo pastebėta, kad suformavus Au paviršiuje apytikriai 0.3 μm storio polimero sluoksnį, 12 val. bėgyje jo masė sumažėdavo vidutiniškai 60 %. Labiausiai toks efektas pasireiškėdavo naudojant vandenyje tirpų fotopolimerą. Mažiausias masės pokytis stebėtas naudojant standartinio tipo fotopolimerą. Tuo tarpu iš EIS matavimų buvo pastebėta, kad Au elektrodo dvigubo elektrinio sluoksnio talpa 0,1M Na_3PO_4 + 0,1M Na_2SO_4 vandeniniame tirpale (pH7) kontaktuojančiame su pasirinktu plastikumu 24val., sumažėja vidutiniškai 50 %. Tai parodė Au elektrodo aktyvaus ploto sumažėjimą, įvykusį dėl medžiagų, kurios difunduoja į tirpalą nuo plastiko paviršiaus, adsorbcijos.

Tuo būdu šie matavimai iš dalies patvirtino pradinius nuogastavimus, kad dėl vykstančio 3d plastikų tirpimo gali užsiteršti tiriamieji tirpalai bei jutiklių paviršiai.

Ketvirtoje padėtyje cikliniais aminais ir amidais modifikuotų 6-chlorrezorcinolių sintezė

Ugnius Popovas, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Hsp90 (angl. Heat Shock Protein) yra vienas svarbiausių molekulinų šaperonų, dalyvaujančių daugiau nei 300 klientų baltymų brendimo reguliavime. Daugelis iš jų yra glaudžiai susiję su sunkiai gydomomis ligomis, tokiomis kaip vėžys, neurodegeneracinės, infekcinės ligos. Dėl šios priežasties Hsp90 yra reikšmingas taikinyb baltymo sintetinių slopiklių paieškose. Vienas iš pagrindinių jo farmokoforų yra rezorcinolio fragmentas, kuris dėl susidarančių vandenilinių ryšių tarp jo hidroksigrupių ir baltymo N-terminalio domeno amino rūgšties Asp93, slopiną Hsp90 veikimą, todėl šią struktūrą turintys junginiai yra plačiai naudojami kuriant antros kartos slopiklius.

Siekiant surasti naujas struktūras, kurios gerintų rezorcinolinių darinių slopinimo savybes, buvo nuspręsta susintetinti rezorcinolio fragmentą turinčius amidus ir aminus. Bazine struktūra pasirinktas 4-chlorrezorcinolis.

Pirmajame etape į šeštą 4-chlorrezorcinolio padėtį buvo įvesta aldehido grupė. Antrame etape, žinant tolimesnius žingsnius, metiljodidu užblokuotos hidroksigrupes 4-chlorrezorcinolyje. Trečiame etape sintezė šiek tiek išsišakoja, kadangi aldehidas, naudojant kalio permanganato junginį, oksiduotas iki rūgšties, o tada kondensuotas su tiksliniais aminais ir gaunami amidai. Kitas kelias - aldehidas suredukuotas iki alkoholio. Alkoholis dviejų stadijų reakcijoje bromintas su fosforo tribromidu ir iškart vykdomas nukleofilinis pakeitimas su tiksliniais aminais.

67

Pietryčių Baltijos jūros bangų režimas: vizualinių stebėjimų ir WAM modelio lyginamoji analizė

Donatas Pupienis^{1,2}, Pranciškus Brazdžiūnas¹

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Gamtos tyrimų centras, Geoaplinkos tyrimų laboratorija

Atsižvelgiant į žmonijos poreikius, siekiant užtikrinti saugią laivininkystę ir krova uostuose, vėjo jėgainių parkų sklاندų vystymą, žinoti tik vidutinį bangos aukštį jau nebepakanka. Dar didesnę susidomėjimą kelia, kokie bangų parametrai gali būti audrų metu, kai jos nėra stebimos. Baltijos jūros bangų stebėjimai ties Lietuva buvo pradėti XX a. viduryje, tačiau iki šiol jaučiamas patikimų bangų režimo duomenų trūkumas. Tyrimo tikslas – palyginti Pietryčių Baltijos jūros vizualinių stebėjimų ir WAM modelio 1980-2024 metų bangų metinius, mėnesinius ir ekstremalių audrų metu gautus bangų aukščio, periodo ir krypties parametrus bei užpildyti esamas žinių spragas susijusias su bangų režimu.

Tyrimo analizuojami vizualinių bangų stebėjimų ir Baltijos jūros bangų WMA 4.7 modelio 1980-2024 metų duomenys. Vizualiniai bangų stebėjimai atliekami Melnragėje. Stebėjimo taškas yra nutolęs 0,5 km nuo kranto, jūros gylis čia siekia 7 metrus. Stebėjimų metu 6, 12 ir 18 val. fiksuojami bangų aukštis, kryptis ir periodas. Bangų modelyje pateikiami valandiniai momentiniai bangų aukščio, krypties ir periodo modelio duomenys, kurių erdvinė skiriamoji yra 1 jūrmylė. Bangų modelio išvesties duomenys paremti ERA 5 meteorologinio modelio reanalizės duomenimis. Palyginimui buvo atrinkti sumodeliuoti bangų duomenys iš taško, kuris yra arčiausiai vizualinių bangų stebėjimo posto. Modelio taškas yra 1 km atstumu nuo kranto, o jūros gylis – 8,5 metro. Darbe analizuojami daugiamečiai vidutiniai ir ekstremalių audrų metu nustatyti bangų parametrai.

Palyginus daugiamečius vizualinių bangų stebėjimų ir modelio krypties duomenis nustatyta, kad abiem atvejais dominuoja ŠV, V, PV krypties bangos, tačiau jų pasikartojimas atitinkamai siekia 56,0 ir 82,5 %. Modeliuoti bangų rezultatai pasižymi mažesne kryptių įvairove. Daugiametis vidutinis bangų periodas apskaičiuotas iš vizualinių bangų stebėjimų ir modelio duomenų, atitinkamai siekia 7,1 ir 6,0 sekundes. Vidutinis maksimalus bangų aukštis remiantis abiem metodais siekė 5 metrus. Lyginant atskirų audrų duomenis, sumodeliuotų bangų maksimalus aukštis siekė 9,6 m, o vizualinių stebėjimų metu stebėtas tik 6,5 m bangų aukštis. Toks neatitikimas sietinas su vizualinių stebėjimų metodika, kadangi vėlyvą rudenį ir žiemą bangų stebėjimai vykdomi tik 12 val., o modelis pateikia valandinius duomenis. Remiantis modelio rezultatais, nustatyta statistškai nepatikima bangų vidutinio aukščio mažėjimo tendencija. Priešingos patikimos bangų vidutinio aukščio didėjimo tendencijos ($p < 0,05$), nustatytos remiantis vizualinių bangų stebėjimo duomenimis. Tačiau žymūs vizualinių stebėjimų metu nustatyti bangų aukščio pokyčiai fiksuojami tik nuo 2014 metų, kai vidutinis bangų aukštis padidėjo 0,3-0,4 metro. Kadangi stebėjimo metodika nesikeitė, tai šiuos pokyčius galima susieti tik su pasikeitusiu stebėtoju. Atsižvelgiant į lyginamosios analizės rezultatus, rekomenduojame bangų tyrimuose naudoti WMA 4.7 bangų modelio duomenis.

Plačiai funkcionalizuojamų modulinų supramolekulinių kavitandų sintezė

Nojus Radzevičius, Eividas Trioška, Edvinas Orentas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Kavitandai – makrociklinės molekulės turinčios didelę vidinę ertmę – turi daug potencialių taikymų medicinos, organinės cheminės sintezės bei medžiagotyros srityse. Tačiau dabartinis prieinamų kavitandų pasirinkimas turi nemažai problemų – ribota geometrinė įvairovė ir funkcionalizavimo galimybės, sudėtingos sintezės bei aukšta simetrija.

Šio tyrimo tikslas yra sukurti sistemą, leidžiančią iš keleto lengvai funkcionalizuojamų molekulinų statybinių blokų sukurti didelę įvairovę supramolekulinių kavitandų, pasižyminčių įvairiomis vidinės ertmės geometrijomis ir dydžiais. Funkcionalizuojamos sritys leistų lengvai modifikuoti įvairias kavitandų savybes, pavyzdžiui, tirpumą poliniuose ar nepoliniuose tirpikliuose bei antrines sąveikas su molekuliniais 'svečiais'.

Tyrimo metu buvo sėkmingai sukurtas tetramerinis kavitandas, kurio monomerai susideda iš abiejų biciklo[3.3.1]nonan-2,6-diono enantiomerų, sujungtų ciklokondensacijos reakcijomis su C_2 -simetriškais aromatiniais jungtukais. Monomerų galai funkcionalizuojami prijungiant ureidopirimidinono fragmentus, galinčius tarpusavyje jungtis vandenilniais ryšiais. Dėka šių sąveikų, monomerai tirpaluose jungiasi į kryžiaus formos makrociklinius tetramerus, kas buvo patvirtina BMR spektroskopijos metodais. Tolimesniuose tyrimuose bandoma įterpti funkcinės grupės, padidinančias tirpumą poliniuose tirpikliuose, bei plėsti C_2 -simetriškų aromatinių jungtukų įvairovę.

69

Skirtingos morfologinės sudėties magnio vitlokito granulių sintezė, ištyrimas bei tarpinių fazių identifikavimas

Rūta Raišlienė, Greta Linkaitė, Skirmantas Astramskas, Aivaras Kareiva, Inga Grigoravičiūtė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Ilgėjantis gyventojų amžius, demografinis augimas lemia didesnę kaulų defektų atsiradimą, o kartu didina ir kaulų implantų poreikį. Implantologijoje plačiai naudojami kalcio fosfatai (KF), kurių sintezė dažniausiai vykdoma aukštoje temperatūroje. Aukšta sintezės temperatūra padidina gaunamos medžiagos kristališkumą ir lemia kai kurių biokeraminių medžiagų, pvz. magnio vitlokito (Mg-VTL, $\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$), irimą ir taip apriboja jų panaudojimą. Žemo kristališkumo KF gali būti susintetinti žemoje temperatūroje tirpinimo-nusodinimo sintezės metodu. Šiuo metodu gali būti susintetinti produktai granulių, kurios ypač plačiai naudojamos dantų implantologijoje, pavidale.

Šio mokslinio darbo tikslas – žemoje temperatūroje susintetinti Mg-VTL granules tirpinimo-nusodinimo metodu iš trijų skirtingos sudėties pradinių granulių, ištirti jų susidarymą, struktūrą bei morfologinius skirtumus. Pradinių granulių sintezė buvo vykdoma iš kalcio sulfato hemihidrato bei skirtingo diamonio vandenilio fosfato ir magnio vandenilio fosfato kiekio. Produktų granulių sintezė buvo vykdoma 24 ir 48 val. 80 °C temperatūroje, užpildant pradines granules natrio divandenilio fosfato ir dinatrio vandenilio fosfato tirpalais (pradinės granulės sudėtyje neturinčios magnio papildomai buvo užpiltos magnio acetato tirpalu).

Granulių sudėties, morfologijos laike pokyčiai buvo tiriami Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), Furje transformacinės infraraudonųjų spindulių spektroskopijos (FTIR) analizės, bei skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) metodais.

Kapinių kaip miesto žaliųjų erdvių daugiakriterinis vertinimas: Vilniaus miesto savivaldybės atvejis

Augustas Reikertas, Neringa Mačiulevičiūtė–Turlienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Dinamiškas bei nuolat transformuojamas kraštovaizdis gali nulemti ne tik pokyčius susijusius su kintančia žmogaus aplinka, bet ir iškelti naujus klausimus dėl nusistovėjusių įvairių erdvių atliekamų funkcijų teisingumo. Žaliosios erdvės bei jų pasiekiamumas yra itin svarbus faktorius užtikrinantis gyvenimo kokybę miesto gyventojams. Dėl nuolatinės migracijos į miestus, didėja gyventojų skaičius, dėl ko tampa vis sunkiau užtikrinti suteikiamas žaliųjų erdvių paslaugas. Pastarųjų erdvių trūkumas bei besikeičiantis požiūris į kapinių užimamas funkcijas visuomenėje, gali nulemti kapinių virsmą tampant erdve pritaikyta sąlyginei rekreacijai. Tyrimo tikslas – sukurti kapinių kaip miestų žaliųjų erdvių daugiakriterinio vertinimo metodiką bei ją pritaikyti Vilniaus miesto savivaldybės kapinių atvejui. Daugiafunkcinis požiūris, kapinių įveiklinimo kontekste, padėtų išplėsti jau esamą miestų želdynų tinklą bei išsaugoti jų istorinę–kultūrinę vertę.

Miesto kapinių kaip žaliųjų erdvių vertinimo metodikai sukurti svarbiausia buvo nustatyti pagrindinius kriterijus, kuriais remiantis būtų galima įvertinti kapines. Atlikus literatūros analizę, buvo išskirti trys pagrindiniai kriterijai: rekreacinis potencialas, gamtinė būklė ir antropogeninis poveikis. Kiekvienas kriterijus susideda iš rodiklių – iš viso jų yra 12 (dydis, danga, takai, apkrova gyventojais ir kt.). Šie rodikliai vertina kapinių savybes, susijusias su nustatytais kriterijais. Tyrime naudoti ne tik oficialūs valstybinių įstaigų tvarkomi erdviniai duomenys, bet ir įvairūs atviros prieigos šaltiniai, tokie kaip „OpenStreetMap“. Kapinių vertinimo metodikos testavimas buvo atliktas Vilniaus miesto savivaldybės teritorijoje, dėl kokybiškų ir lengvai prieinamų duomenų. Prieš atliekant vertinimą, svarbiausia buvo tinkamai paruošti duomenis iškeltų rodiklių reikšmių apskaičiavimui, o tai nebūtų įmanoma be GIS programinės įrangos – ArcGIS Pro ir QGIS. Visi kriterijai, pagal įvestą rodiklių vertinimo skalę, sudaro iš viso 54 balus. Bendras balas buvo apskaičiuotas sudėjus kiekvieno rodiklio balus.

Apskaičiavus rodiklius ir įvertinus kapines pagal suteiktus balus, nustatyta, kad bendri rezultatai svyruoja nuo 7 iki 36 balų iš galimų 54. Daugiausia, po 36 balus, surinko Antakalnio ir Našlaičių kapinės bei Vingio parko I ir II PK karių kapinės. Mažiausiai balų kapinės vidutiniškai gavo patogumų, apšvietimo ir turizmo potencialo srityse – atitinkamai 0,29; 0,77 ir 0,81 balo. Šios žemos reikšmės rodo, kad tokio tipo infrastruktūra kapinėse yra reta. Pastebėta, kad geriausiai įvertintos yra didesnio ploto kapinės, esančios miesto centre arba jo periferijoje. Kapinėms suteiktų balų pasiskirstymą gali lemti ir jų dydis – didesnės kapinės Vilniuje paprastai turi labiau išvystytus takus, geresnę infrastruktūrą, daugiau patogumų bei apšvietimą. Kuo kapinės didesnės, tuo platesnės teikiamos rekreacinės paslaugos ir daugiau galimybių plėtoti turizmą ar kitas veiklas.

71

Cr³⁺ doped YAG and YLuAG synthesis and insight of luminescence properties

Nerija Ričkutė, Greta Inkrataitė

Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Yttrium aluminium garnet (YAG) and yttrium lutetium aluminium garnet (YLuAG) are synthetic materials that belong to the garnet group. Synthetic garnet was first discovered in the 1950s, and since then the electronics industry has seen a rapid development of technologies using synthetic compounds with a garnet structure. YAG and YLuAG have good mechanical and optical properties. This matrix allows incorporation in solid solution of luminescent ions such as transition metals (Cr³⁺). Chromium doped YAG and YLuAG have different luminescence properties due to their structural differences and effect on crystal field, they are both widely used in luminescent systems. YAG is an excellent host for high power solid-state lasers due to its high density, high thermal stability, relatively efficient luminescence processes and high quantum efficiency. YLuAG, on the other hand, is often used in phosphor-converted LEDs and scintillators due to its great optical properties. However, garnets doped with different amounts of chromium show different results in luminescence properties. The measurements showed that even a small amounts of chromium incorporated in garnets indicate luminescent properties such as emission in NIR region, which is highly significant for applications in NIR-LED construction, horticulture and theranostics. This enables excellent results in luminescence with only a small amount of Cr³⁺.

In the present work, garnets doped with different amounts of chromium have been synthesised and their structural and luminescence properties were studied. Cr³⁺ doped YAG and YLuAG were synthesized by the sol-gel method. The phase purity of the samples was analysed by means of X-ray diffraction. The morphology of the compounds was evaluated by using scanning electron microscopy. Photoluminescence properties such as emission and excitation spectra, decay curves, quantum efficiency have been investigated.

Investigation of Exfoliated Graphite-(SCN)_n Composites and Their Application in Serotonin Sensors

Gintarė Rimkutė¹, Greta Melkūnaitė¹, Justina Gaidukevič^{1,2}

¹ Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

² Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Vilnius, Lithuania

The neurotransmitter serotonin (SER) plays a crucial role in regulating various complex behaviors, including mood, appetite, sleep, motor activity, pain management, sexual behavior, and hormone secretion (Moncrieff et al., 2023). Since maintaining a balanced SER level is vital, its precise detection has become an important aspect of clinical diagnosis. Electrochemical sensors have emerged as a promising alternative, offering advantages such as low cost, ease of operation, rapid response, good sensitivity, and excellent selectivity (Sharma et al., 2018). However, the performance of electrochemical sensors is greatly influenced by the materials used in their fabrication. Carbon-based materials have shown great promise in electrochemical sensors for neurotransmitter detection. Among them, exfoliated graphite (EG) has gained significant attention because of its beneficial characteristics, such as high electrical and thermal conductivity, mechanical strength, and low density (Hou et al., 2021).

The aim of this study was to investigate exfoliated graphite-polythiocyanogen (EG(SCN)_n) composites and use them in electrochemical sensors for SER detection. First, three graphite precursors with grain sizes of <50 μm, ≥149 – ≤840 μm, and 2000 μm were intercalated with sulfuric acid and heat-treated at a temperature of 800 °C. The acquired EG samples were modified with conducting polymer polythiocyanogen. The obtained EG(SCN)_n samples were characterized structurally using scanning electron microscopy (SEM), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), Raman spectroscopy and were tested as active electrode materials for detecting SER.

SEM micrographs revealed that the layered arrangement observed before modification was replaced by irregular shape particles and chaotically arranged individual sheets. XPS confirmed successful nitrogen and sulphur incorporation into the graphitic structure. The analysis also showed that EG(SCN)_{n_3}, obtained from the largest graphite grains, had the highest concentration of pyrrolic-N, which enhances electrical conductivity by adding electrons to the sp² network. Electrochemical analysis revealed that the sensor constructed with EG(SCN)_{n_3} demonstrated excellent sensitivity (5389 μA mM⁻¹ cm⁻²) and a moderately low limit of the detection value of 133 nM for the SER analyte.

References

- Hou, S., He, S., Zhu, T., Li, J., Ma, L., Du, H., Shen, W., Kang, F., & Huang, Z. H. (2021). Environment-friendly preparation of exfoliated graphite and functional graphite sheets. *Journal of Materiomics*, 7(1), 136–145.
- Moncrieff, J., Cooper, R. E., Stockmann, T., Amendola, S., Hengartner, M. P., & Horowitz, M. A. (2023). The serotonin theory of depression: a systematic umbrella review of the evidence. *Molecular Psychiatry*, 28(8), 3243–3256.
- Sharma, S., Singh, N., Tomar, V., & Chandra, R. (2018). A review on electrochemical detection of serotonin based on surface modified electrodes. *Biosensors and Bioelectronics*, 107, 76–93.

Vario rašalų ant popieriaus stabilizavimas

Gustė Rudaitytė¹, Aušra Čiuladienė²

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

²Lietuvos mokslų akademijos Vrublevskių bibliotekos Dokumentų konservavimo ir restauravimo skyrius

Pereinamųjų metalų jonai, esantys istoriniuose rašaluose, gali padaryti didelę žalą rašytiniams kultūros objektams. Vienas iš plačiausiai naudotų rašalų dėl puikių savo savybių, tokių kaip lengvas pagaminimas, patvarumas ir atsparumas vandeniui buvo geležies galo rašalas. Šiame rašale be geležies, taip pat gausu kitų pereinamųjų metalų, ypač vario. Vario jonai pasižymi dideliu kataliziniu aktyvumu ir skatina oksidacinį celiuliozės irimą geležies galo rašalu rašytuose dokumentuose.

Šio darbo tikslas – stabilizuoti vario jonus ant popierinės laikmenos naudojant 2,5-heksandiolio (2,5-HDO) vandeninį tirpalą. Prieš tyrimą pagal senąsias receptūras buvo paruošti skirtingi vario rašalai (juodasis rašalas su vario sulfatu ir senasis vario rašalas). Šiais rašalais paveikti popieriaus mėginiai buvo dirbtinai pasendinti 80 °C, 60 ± 5% drėgmės kameroje ir ištirti, siekiant įvertinti jų cheminius ir fizinius pokyčius po sendinimo. 2,5-HDO poveikis popierinei laikmenai buvo įvertintas taikant šiuos analizės metodus: skenuojančią elektroninę mikroskopiją (SEM), kolorimetrinius ir pH matavimus bei infraraudonųjų spindulių Furjė spektroskopiją (FTIR).

Atliktas vario rašalų kompozicijų su 2,5-HDO sendinimo tyrimas parodė, jog naudojant 2,5- heksandiolį sulėtinamas celiuliozės oksidacijos procesas. Po sendinimo mėginių pH vertės sumažėjo nežymiai arba padidėjo, cheminės struktūros pokyčių nebuvo identifikuota. Spalvos pokyčio matavimai leidžia daryti išvadą, kad heksandiolis, nepriklausomai nuo rašalo ir popieriaus rūšies, neturi įtakos mėginio spalvai.

74

Tarp mineralogijos, kristalografijos ir chemijos - doc. dr. Veros Kotovič 100-ąsias gimimo metines pasitinkant

Eugenija Rudnickaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto, Geomokslų instituto, Geologijos muziejus

Vera Kotovič gimė 1925 metų gegužės 10 d. Vilniuje, tarnautojų šeimoje. Nors buvo sunkus pokario laikas, ji 1944 metais įstojo į Vilniaus universiteto Chemijos fakultetą, kurį baigė 1949 metais. Gabi jauna specialistė buvo paskirta dirbti asistente Vilniaus universiteto Gamtos mokslų fakulteto Mineralogijos katedroje, kuriai tuo metu vadovavo profesorius Mykolas Kaveckis. Profesorius puikiai suprato naujai įsteigtos Gamtos mokslų fakultete Geologijos specialybės mokslinę ir praktinę reikšmę. Rūpinosi kvalifikuotų specialistų ruošimu. Todėl jauna perspektyvi specialistė Vera Kotovič kelti kvalifikacijos buvo pasiūsta į Leningrado (dabar Sankt Peterburgo) universiteto Kristalografijos katedrą. Čia ji 1952–1955 m. mokėsi aspirantūroje pas profesorių V.Franką-Kameneckį. Parengė kandidatinę (dabar daktaro) disertaciją „Junginių su sfalerito ir viurcito struktūra izomorfizmo ir priverstinės mineralizacijos klausimu“, kurią sėkmingai apgynė 1955 metais.

Grįžusi į Vilniaus universiteto Mineralogijos katedrą ėjo docentės pareigas. Aspirantūroje įgytos žinios dar labiau priartino ją prie geologijos, leido įsisavinti sudėtingas geologinio turinio disciplinas. Ji sėkmingai skaitė kristalografijos, mineralogijos, geochemijos kursus, vedė šių disciplinų laboratorinius darbus, vadovavo studentų diplominiams darbams (virš 20 baigiamųjų darbų), lauko praktikai. Be to, skaitė kristalų chemijos kursą Chemijos fakulteto studentams. Iš jos skaitytų specialių kursų ypač svarbi buvo rentgenometrijos disciplina, padėjusi pagrindus naujai perspektyviai molio mineralų tyrimo kryptčiai Lietuvoje. Jos dėka katedroje įdiegtas rentgenografijos tyrimo metodas, kurį Lietuvos gelmių tyrimams plačiai naudoja geologai. Nuo 1960 metų vykdė mokslo tiriamąjį darbą – nagrinėjo mineralų izomorfinius pokyčius. 1963 metais jai buvo suteiktas docento mokslinis vardas.

Svarbią vietą jos darbų tarpe užima Lietuvos ir Kaliningrado srities triaso uolienu geocheminių elementų bei molio mineralų asociacijų pasiskirstymo dėsninumų tyrimai. Nagrinėdama raudonspalvių molių granulometrinę sudėtį, karbonatinių, sulfato-natrio-chloro jonų koncentraciją, ji nustatė sulfato jonų koncentracijos priklausomybę nuo paleogeografinių sąlygų, atliko šių uolienu pjūvių gretinimą. Tyrimo duomenys buvo apibendrinti habilitacinėje daktaro disertacijoje, kuri dėl ligos nebuvo užbaigta. Yra paskelbusi apie 30 mokslinių straipsnių. Dauguma jos mokslinių straipsnių (vienos ar su bendraautorais) publikuoti žurnale „*LTSR aukštųjų mokyklų mokslo darbai. Geografija ir geologija*“. Taip pat rašė ir molio mineralų nustatymo metodikos, ir mokslo istorijos klausimais. Docentė dirbo studentų grupių kuratore, buvo vyriausiosios enciklopedijos redakcijos moksline konsultante, parašė daug enciklopedinių straipsnių, buvo Tarpžinybinio litologijos komiteto Pabaltijo skyriaus nare. Tiek bendradarbiai, tiek studentai prisimena docentę Verą Kotovič kaip ramaus būdo moterį, pasižymėjusią inteligencija, labai taktišku elgesiu su studentais. Ji buvo pareiginga, kukli, gerai sutardavo su kolegomis. Todėl buvo visų gerbiama.

Mirė 1980 metų rugpjūčio 27 d. Palaidota Liepkalnio kapinėse Vilniuje.

75

Karbazolo fragmentą turinčių mėlynų OLED spinduolių sintezė

Gabija Sergejevaitė¹, Jonas Žurauskas¹, Gediminas Kreiza², Edvinas Orentas¹

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas, Organinės chemijos katedra*

²*Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto Fotonikos ir nanotechnologijų institutas*

Nors organiniai šviesos diodai (OLED, angl. organic light-emitting diode) plačiai naudojami išmaniųjų prietaisų ekranuose ir apšvietime, visgi mėlyni spinduoliai nėra pakankamai efektyvūs ir stabilūs. Didėjanti technologijų paklausa skatina ieškoti naujų medžiagų, pritaikomų OLED prietaisuose.

Šio tyrimo metu mėlyni OLED spinduoliai buvo sintetinami naudojant donoro karbazolo ir akceptorius bipiridino arba izoftalonitrilo fragmentus. Gauti OLED spinduoliai charakterizuoti UV-VIS spektroskopija ir preliminariai įvertintos jų taikymo OLED sluoksniuose galimybės. Tyrinėtų OLED spinduolių veikimas paremtas termiškai aktyvuota uždelstą fluorescencija (TADF, angl. thermally activated delayed fluorescence), kurios metu singuletinė būseną atkurama iš tripletinės, vykstant atgalinei interkombinacijos konversijai (RISC, angl. reverse intersystem crossing). Toks procesas galimas, jeigu HOMO ir LUMO orbitalės yra lokalizuotos. Šiuo atveju orbitalių lokalizaciją skatina metil pakaitas, esantis ant karbazolo, kuris didina sukimo kampą tarp donoro ir akceptorius fragmentų.

Mn⁵⁺ jonais legiruoto Sr₅(PO₄)₃F sintezė ir optinių savybių tyrimai

Jonas Stadulis, Artūras Katelnikovas, Aleksej Žarkov

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Sparčiai tobulėjant technologijoms, auga ir naujų medžiagų poreikis. Vienos iš jų – liuminescencinėmis savybėmis pasižyminčios optinės medžiagos, kurias dažniausiai sudaro optiškai aktyviais jonais legiruojamos matricos. Šiai grupei priklausančios medžiagos turi platų pritaikymą įvairiose srityse, pavyzdžiui, LED šviestuvuose, lazeriuose, optiniuose termometruose, manometruose, biomedicinoje ir t.t. Šiame darbe pasirinktas stroncio fluorapatitas (Sr₅(PO₄)₃F; SFAp) dėl stroncio šarminių savybių bei struktūroje esančių P⁵⁺ jonų gali stabilizuoti ir optiškai aktyvius Mn⁵⁺ jonus, kurie įprastomis sąlygomis linkę oksiduotis ar redukuotis. Šiais jonais legiruotos struktūros pasižymi plačiu sužadinimo ruožu, patenkančiu į NIR-I sritį, ir intensyvia emisija NIR-II srityje. Dėl šių savybių Mn⁵⁺ jonais legiruotas SFAp potencialiai gali būti naudojamas įvairiose srityse, tokiose kaip optiniai termometrai ar biomedicina.

Šio darbo tikslas buvo susintetinti ir ištirti Mn⁵⁺ jonais legiruoto SFAp optines savybes. Pirmame sintezės etape, pirmtakais naudojant diamonio vandenilio fosfatą ((NH₄)₂HPO₄), stroncio nitrata (Sr(NO₃)₂) ir amoniaką (NH_{3(aq)}), nusodinimo metodu buvo sintetinamas stroncio fosfatas (Sr₃(PO₄)₂). Antrajame etape lydytų druskų metodu, naudojant Sr₃(PO₄)₂, stroncio fluorida (SrF₂) ir natrio fluorida (NaF) druskų mišinį bei mangano nitrato tetrahidrata (Mn(NO₃)₂•4H₂O), gautas skirtingomis Mn⁵⁺ jonų koncentracijomis legiruotas Sr₅(PO₄)₃F. Susintetintų miltelių kristalinė struktūra ir fazinis grynumas buvo ištirti naudojant rentgeno spindulių difrakcinę analizę (XRD), bei Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių (FTIR) bei Raman spektroskopiją. Morfologinės savybės stebėtos ir užfiksuotos naudojantis skenuojančiu elektronų mikroskopu (SEM), o elementinė sudėtis analizuota naudojant induktyviai susietos plazmos optinės emisijos spektrometrą (ICP-OES). Naudojantis fluorescenciniu spektrometru buvo ištirtos optinės savybės: sužadinimo ir emisijos spektrai, atspindžio spektrai, gesimo kreivės bei temperatūrinės emisijos ir gesimo trukmės priklausomybės.

Influence of Al₂O₃ on the crystallinity of 1.13 nm tobermorite

Liveta Steponaitytė, Raimundas Šiaučiūnas

Kaunas University of Technology, Faculty of Chemical Technology, Department of Silicate Technology

When the temperature of the environment exceeds 500 °C, it is recommended to use ceramic and silicate heat-resistant materials. One of the effective varieties of thermal insulating products with an operating temperature of 650–700 °C is made from calcium silicate hydrate, 1.13 nm tobermorite. However, it is difficult to synthesize this compound in pure form. The product often contains a semi-amorphous, C-S-H(I) type calcium silicate hydrate with no clear crystalline structure. It increases the shrinkage of articles and reduces the application temperature. The aim of this work is to synthesize 1.13 nm tobermorite with a high degree of crystallinity and to investigate the influence of Al³⁺ ions on the course of hydrothermal reactions and product purity.

The following raw materials were used: CaO, obtained by burning the reagent CaCO₃ at 950 °C (CaO_{free} = 99.78 %), silica (SiO₂·xH₂O) and amorphous Al₂O₃ obtained by burning the reagent Al(OH)₃ at 475 °C. Hydrothermal syntheses were carried out in stirred at 100 rpm suspensions (W/S = 20) at 180 °C with the duration of isothermal curing of 24, 48 and 72 h. The composition of the mixtures corresponded molar ratios CaO/SiO₂ = 0.83 and Al₂O₃/(SiO₂ + Al₂O₃) = 0; 0,01; 0,025; 0,05; 0,075. The products were examined by XRD, STA, SEM methods.

XRD and STA analysis showed that the reactions of the formation of 1.13 nm tobermorite proceed quite slowly during the first 24 h of synthesis: 1.13 nm peak intensity is 14.2 cps, the crystallite size is 24.1 nm and heat flow released by the exothermic effect at 840 °C (it is characteristic of the recrystallization of C-S-H(I) into wollastonite) is 6.3 mW. Practically, the maximum amount of 1.13 nm tobermorite is formed within 48 h, with the values of the abovementioned characteristics of 33.99 cps, 36 nm and 2.1 mW. When the synthesis time is extended to 72 h, they remain almost unchanged.

A small amount of aluminum [Al₂O₃/(SiO₂ + Al₂O₃) = 0,025] slightly slows down the formation of crystalline tobermorite. After 48 h of synthesis, the intensity of the 1.13 nm peak is 34.7 cps, the crystallite size – 25.5 nm, and the heat flow at 846 °C – 11 mW. A higher amount of aluminum additive strengthens this negative influence. Thus, for the synthesis of high-crystallinity 1.13 nm tobermorite, it is recommended to use raw materials that are as pure as possible.

78

Distribution of Microplastic Particles in the Air of Lithuanian Schools Premises and Their Chemical and Physical Properties

Tomas Stonkus, Ieva Uogintė, Steigvilė Byčėnienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research

Plastic has become one of the most used materials since it was first created as a phenol-formaldehyde resin. Although it was originally designed to make our lives more convenient, today plastic has become a serious threat to both the environment and human health. In recent years, the growing use of synthetic polymers in different industries has caused an increase in microplastic pollution in the air. These tiny particles, often smaller than 5 millimeters, come from various sources. Some, known as primary microplastics, are intentionally made, like microbeads in personal care products. Others, called secondary microplastics, form when larger plastic items break down. It is important to analyze microplastic particles in the indoor air, since about 90 % of our time is spent indoors.

The goal of this research is to analyze microplastic particles found in the air inside Lithuanian schools, focusing on their size, color, shape, and chemical makeup. The findings will contribute to a better understanding of microplastic pollution in indoor air and its potential harmful effects.

In this study indoor microplastic particles were collected by teachers using 5,5 cm paper filter left out in the school premises for a week. In the laboratory paper filters are washed with filtered distilled water. Samples then go through chemical processing and density separation. Samples are transferred to fiberglass filter for optical analysis and aluminum dioxide filter for chemical composition using FTIR spectroscopy.

Acknowledgment. We would like to thank the schools, teachers, and students who helped to collect data on indoor microplastic particles in Lithuanian school's premises

Importance of drying speed and shrinkage coefficient in the synthesis of crack-free silica xerogels via the sol-gel method

Austėja Šernaitė, Greta Inkrataitė, Ramūnas Skaudžius

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

Xerogels are highly porous materials that are obtained via the sol-gel process in which the gel is dried in ambient pressure. Due to their noteworthy characteristics such as high surface area, small pore size and low density, they can find applications in catalysis and have been established as prospects for thermal and acoustic insulation as well as biomedical applications due to low thermal conductivity and potential biocompatibility respectively (Catauro et al., 2014; Gizli et al., 2022). However, a prevalent problem impacting the widespread usage of xerogels is their tendency to crack during the drying phase due to high capillary action. The present study hypothesizes that the drying speed and shrinkage coefficient of the gel may serve as reliable indicators of whether the xerogel will end up cracked.

In our experimental design, we varied the filling of gel in the containers (10%; 40%; 50% and 90% visually) and the size of holes in the lids of the containers, drilled to regulate the drying speed. All xerogels were synthesized via the acid catalyzed sol-gel method outlined by Skruodiene et al. (2023) with minor adjustment to the drying time. The shrinkage coefficient was calculated by dividing the amount of shrinkage height-wise by the amount of shrinkage width-wise. The experimental results demonstrate that both these variables have an impact, however one more crucial factor for achieving no cracks was found to be the pouring of the gel into the containers and transferring them to the ultrasound bath. It is imperative that there is as little amount of air bubbles as possible. The findings indicate that the most effective method for producing crack-free xerogels is to perforate the lid with a 4 mm wide aperture in the middle and to fill the container with a quantity of gel such that the shrinkage coefficient is approximately equal to any of these numbers: 0.44 (40%), 0.55 (50%), 0.61 (50%), 0.69 (50%), 1.03 (90%).

Acknowledgments. Austėja Šernaitė would like to thank Monika Skruodienė for teaching us this method and Miglė Minalgaitė for occasional help in the laboratory.

References

- Catauro, M., Papale, F., Roviello, G., Ferone, C., Bollino, F., Trifuoggi, M., & Aurilio, C. (2014). Synthesis of SiO₂ and CaO rich calcium silicate systems via sol-gel process: Bioactivity, biocompatibility, and drug delivery tests. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 102(9), 3087–3092.
- Gizli, N., Çok, S. S., & Koç, F. (2022). Aerogel, xerogel, and cryogel: Synthesis, surface chemistry, and properties—Practical environmental applications and the future developments. *Advanced Materials for Sustainable Environmental Remediation: Terrestrial and Aquatic Environments*, 195–229.
- Skruodiene, M., Kemere, M., Inkrataite, G., Leimane, M., Ramanauskas, R., Skaudzius, R., & Sarakovskis, A. (2023). Synthesis and Investigation of Novel Optical Active SiO₂ Glasses with Entrapped YAG:Ce Synthesized via Sol–Gel Method. *Gels*, 9(6), 488.

Klimato indeksų panaudojimas Lietuvos klimato pokyčių apibūdinimui

Juras Šukys, Justinas Kilpys

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Vykstant intensyviai klimato kaitai, jos tyrimai ir sprendimų paieškos išlieka svarbios ir jautrios temos globalizuotame pasaulyje. Žmonės vis dar yra priklausomi nuo iškastinio kuro ir dėl to šiltnamio efektą sukeliančių dujų koncentraciją atmosferoje nuolat auga. Siekiant prisitaikyti prie pokyčių žmonijai reikia tirti bei analizuoti klimato pokyčius įvairiuose pasaulio regionuose bei dalyse. Šio darbo tikslas yra apibendrinti klimato pokyčius įvykusius Lietuvoje 1961–2020 m. remiantis klimato indeksais. Pasitelkiant CLIMPACT programinę įrangą apskaičiuoti 70 temperatūros ir kritulių klimatinių indeksų ir palyginti du laikotarpius: 1961–1990 m. bei 1990–2020 m. Lyginant šiuos du laikotarpius, pastebėta, kad Lietuvoje įvyko reikšmingi temperatūros rodiklių pokyčiai, ypač siejamų su šiltuoju metų laiku. Vidutinius tropinių naktų skaičius per metus Nidos MS padidėjo iki 3 naktų, o anksčiau jų pasitaikydavo ne kasmet. Tuo tarpu, karštų dienų skaičius (atvejai kai viršijamas 90-tas percentilis), lyginant 1961–1990 m. bei 1990–2020 m. laikotarpius, išaugo nuo 7 iki 13 atvejų per metus tiek Vilniuje, tiek Klaipėdoje. Pokyčiai taip pat nustatyti ir šaltuoju periodu – šildymo dienolaipsnių nuoseklus ir statistiškai patikimas mažėjimas rodo vidutinės temperatūros augimą šaltuoju metų laiku. Atvejų, kai oro temperatūra Lietuvoje nukrenta žemiau $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ sumažėjo 10 iš 18 MS. Nors labai šaltų dienų skaičius ir mažėja, tačiau jos visiškai neišnyko. Šaltų naktų skaičius (atvejų kai minimali temperatūra žemesnė už 10-tą percentilį), lyginant 1961–1990 m. bei 1990–2020 m. laikotarpius, reikšmingai sumažėjo ir Vilniuje, ir Klaipėdoje, nuo 12 iki 8 atvejų per metus. Analizė parodė, kad metinis kritulių kiekis Lietuvoje didėja. Statistiškai reikšmingas metinio kritulių kiekio prieaugis stebėtas 6 iš 18 MS. Taip pat išaugo kritulių kiekis, iškritęs labai intensyvių liūčių. Tokių atvejų dažnėjimas nustatytas 9 iš 18 MS, tačiau tik 3 MS buvo statistiškai patikimas ir ten augimo tendencija buvo 3 mm / 10 metų. Vidutinis metinis kritulių kiekis iškritęs intensyvių liūčių metu Vilniuje padidėjo nuo 136 mm iki 154 mm (13 % padidėjimas). Klaipėdos MS nustatytas 15 % padidėjimas: nuo 137 mm iki 158 mm, lyginant du pasirinktus laikotarpius. Nors Lietuvoje stebimas metinio kritulių kiekio didėjimas, kartu daugėja ir sausringų laikotarpių. Tyrimo rezultatai parodė, kad iš eilės einančių sausių dienų skaičius didėjo net 13 iš 18 MS, tačiau statistiškai patikimas trendas nustatytas tik Šiaulių ir Raseinių MS. Sparčiausia sausių dienų didėjimo tendencija nustatyta Panevėžio, Šiaulių ir Raseinių MS, iki 0,8 dienų / 10 metų. Klimato indeksų analizė parodė, kad Lietuvoje didėja ekstremalių reiškinių susijusių su karščiu ir intensyviais krituliais bei mažėja šalčio laikotarpio ekstremalių įvykių skaičius.

Nitroaromatinių junginių su fluoro grupėmis stabilumo ir energetinių savybių tyrimas kvantinės chemijos metodais

Jelena Tamulienė¹, Jonas Šarlauskas²

¹Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto Teorinės fizikos ir astronomijos institutas

²Vilniaus universiteto Gyvybės mokslų centro Biochemijos institutas

Kvantinės chemijos tyrimai B3LYP/cc-pVTZ tankio funkcionalo metodu buvo atlikti nustatyti kaip keičiasi nitroaromatinių darinių stabilumas ir energetinės savybės, kai juose esančios $-\text{CF}_3$ arba $-\text{OCF}_3$ grupės yra pakeičiamos $-\text{SF}_5$. Darinių terminio ir cheminio stabilumo palyginimui nustatytos šios charakteristikos: ryšio energija tenkanti atomui, HOMO-LUMO tarpas, cheminis kietumas, elektroneigiamumas. Detonacijos slėgis ir greitis nustatyti pritaikius mašininio mokymosi metodą.

Nustatyta, kad $-\text{CF}_3$ ar $-\text{OCF}_3$ grupių pakeitimas sunkesne $-\text{SF}_5$ grupe ne visada lemia tiriamų darinių tankio padidėjimą, kas yra susiję su skirtingu tūrio ir molekulinės masės pokyčiu, t.y. dėl skirtingos minėtų grupių formos, molekulių tūris didėja sparčiau nei masė. Nepaisant to, mūsų siūlomų naujų medžiagų, tokių kaip $\text{CF}_3\text{SF}_5\text{N}_3$, $\text{C}_2\text{F}_6\text{SF}_5\text{N}_3$, $\text{CF}_3\text{S}_2\text{F}_{10}\text{N}_3$, $\text{O}_2\text{C}_2\text{F}_6\text{SF}_5\text{N}_3$, $\text{S}_3\text{F}_{15}\text{N}_3$, tankis yra didesnis nei HMX – ypatingai didelės energijos ir palyginti neįtraus nitroamino. Kitas nepageidaujamas rezultatas yra darinių terminio stabilumo sumažėjimas, atsirandantis dėl $-\text{SF}_5$ įterpimo vietoje $-\text{CF}_3$ ar $-\text{OCF}_3$. Įvertinus nustatytus parametrus, tokius kaip HOMO-LUMO tarpas, ryšio energiją tenkančią atomui, cheminis kietumas, padarėme išvadą, kad fluoro atomų skaičius neturėtų viršyti devynių, nes viršijus šią ribą nitroaromatinių darinių turinčių savo sudėtyje fluoro cheminis ir terminis stabilumas mažėja. Be to, įvertinus junginių elektroneigiamumą, prognozuojama, kad tiriamieji dariniai gali greitai senti dėl jonizacijos. Nepaisant to, visi tirti dariniai yra aukšto stabilumo. Tai rodo apskaičiuotos kietumo indekso vertės didesnės nei 0.9.

Įvertinus detonacijos greitį ir slėgį rasta, kad tiriamų darinių energetinės savybės blogėja, kai $-\text{OCF}_3$ pakeičiamas $-\text{SF}_5$. Tai gali būti dėl deguonies atomų skaičiaus sumažėjimo darinyje. Priešingai, $-\text{CF}_3$ pakeitimas $-\text{SF}_5$ pagerina energetines savybes. Nepaisant to, nustatytos detonacijos slėgio ir greičio vertės rodo, kad nauji dariniai yra priskiriami didelės energijos junginių klasei, jų energetinės savybės yra geresnės nei TNT, o atskirais atvejais ir HMX.

Visgi remdamiesi mūsų tyrimo rezultatais ir literatūros šaltiniuose minimais sunkumais, susijusiais su pentafluorosulfanilo grupės įterpimu į nitroaromatinius darinius, teigiame, kad darinių, kuriuose yra $-\text{SF}_5$ (vieno arba kartu su $-\text{CF}_3$ ar $-\text{OCF}_3$), praktinis pritaikymas yra mažai tikėtinas ar naudingas.

A sustainable approach to modifying the structure and hygroscopic performance of unfired clay materials

Yahor Trambitski, Olga Kizinievič, Viktor Kizinievič

Laboratory of Composite Materials, Institute of Building Materials, Vilnius Gediminas Technical University

This poster summarizes the effects of different natural polysaccharides on clay materials, focusing on their structural transformation, physical-mechanical properties, and hygroscopic behavior. Clay modification was achieved by incorporating gelled biopolymer solutions of starch, alginate, and chitosan at varying concentrations (2.5–10%) into the clay matrix during the preparation stage. Biopolymers tend to decrease the density and shrinkage of the clay materials, while compressive strength increases for starch- and alginate-modified composites, whereas chitosan exhibits limited mechanical benefits. The incorporation of gelled biopolymer solutions increased moisture adsorption in clay materials, indicating enhanced moisture-buffering capacity, which may benefit for indoor humidity regulation. Structural characterization using a combined method of volumetric 3D scanning (microtomography) and 2D imaging (scanning electron microscopy) enhances the understanding of biopolymer distribution and interaction within the clay matrix. The obtained scans indicate that starch and alginate function as surface-coating agents, while chitosan forms organic clusters within the clay matrix. A hypothesis on potential clay-biopolymer interactions was formulated based on the results of this study. Overall, the findings highlight biopolymer-modified clay as a promising material for sustainable construction, particularly for masonry units and interior applications requiring humidity regulation.

Acknowledgements. This research work has received funding from the project “Civil Engineering Research Centre” (agreement No S-A-UEI-23-5, ŠMSM)

Synthesis and Characterization of Biomass-Derived Carbon Catalysts for Hydrazine Oxidation

Virginija Ulevičienė^{1,*}, Aldona Balčiūnaitė¹, Daina Upskuvienė¹, Galina Dobele², Aleksandrs Volperts², Ance Plavniece², Aivars Zhurinsh², Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė¹, Eugenijus Norkus¹

¹*Department of Catalysis, Center for Physical Sciences and Technology*

²*Latvian State Institute of Wood Chemistry*

As the global energy landscape shifts toward more sustainable and efficient technologies, the development of cost-effective and environmentally friendly catalysts has become a key research focus. Biomass-derived carbon materials have emerged as attractive alternatives to conventional carbon-based catalysts due to their renewability, natural abundance, and intrinsic heteroatom content (e.g., N, P, S), which enhances catalytic activity. These materials provide a versatile platform for designing advanced catalysts, particularly when doped with transition metals such as nickel (Ni), cobalt (Co), and copper (Cu) to improve their electrochemical properties. In this study, we present a simple and scalable synthesis approach to fabricate nitrogen- and metal-doped carbon catalysts using biomass-derived activated wood carbon (AWC). The resulting materials were systematically characterized to evaluate their physicochemical properties and electrochemical performance. Hydrazine (N₂H₄) oxidation studies were conducted on AWC-N, AWC-Ni-N, AWC-Co-N, and AWC-Cu-N catalysts. Cyclic voltammetry (CV) measurements were performed in a 0.05 M N₂H₄ + 1 M KOH solution within an electrode potential range of -1.2 to 0.6 V (vs. SCE) at a scan rate of 50 mV s⁻¹.

All synthesized AWC-Ni-N, AWC-Co-N, and AWC-Cu-N catalysts demonstrated excellent activity and stability for N₂H₄ electrooxidation, highlighting their potential as promising anode catalysts for direct hydrazine fuel cells (DHFCs).

Efficient two-step synthesis of novel imidazopyrazolooxazepines

Agnė Užupytė, Algirdas Šačkus, Eglė Arbačiauskienė

Faculty of Chemical Technology, Kaunas University of Technology

Heterocyclic compounds play a crucial role in medicinal chemistry due to their diverse biological activities and wide therapeutic applications. Among them, imidazole-pyrazole hybrids have attracted considerable interest for their promising neuroprotective or anticancer potential. Despite advancements in this field, efficient and sustainable synthetic methods for these compounds remain scarce.

This study aims to develop a simple and efficient two-step synthesis of imidazopyrazolooxazepine derivatives from pyrazole-4-carbaldehyde and various diamines, followed by cyclization. The study seeks to evaluate the effectiveness of this synthetic approach in terms of yield and reaction selectivity, as well as to assess the potential biological activity of the resulting compounds. The resulting compounds were characterized using NMR, IR, and mass spectrometry to confirm their structures.

The synthesis and separation of imidazopyrazolooxazepines have shown promising results, highlighting the potential of the developed method for preparing these compounds. However, the separation of regioisomers was not fully efficient, indicating the need for further optimization. Future research will focus on improving the synthesis process and investigating the neuroprotective properties of these compounds, with the aim of exploring their potential for neurological therapies.

Synthesis of Phenothiazine Derivatives Exhibiting Very Long Room Temperature Phosphorescence

Paulius Vaickūnas,¹ Jonas Žurauskas,¹ Vilius Stankevičius,² Steponas Raišys,² Karolis Kazlauskas² and Edvinas Orentas¹

¹Department of Organic Chemistry, Vilnius University

²Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University

Room-temperature phosphorescence (RTP) in organic compounds is an uncommon yet highly intriguing phenomenon with significant applications in various fields, including bioimaging, data encryption, and digital displays. However, inducing phosphorescence in organic compounds presents considerable challenges, often necessitating cryogenic temperatures and an inert atmosphere. In this study, we have developed a series of phenothiazine derivatives capable of exhibiting long-lasting RTP. Through systematic structural modifications, we aim to elucidate the correlation between molecular architecture and phosphorescent properties, ultimately advancing the design of organic compounds that demonstrate stable and prolonged phosphorescence under ambient conditions, with observed lifetimes reaching up to 700 milliseconds. The synthesized crystalline structures were characterized using X-ray diffraction, while fluorescence spectrophotometry was employed to measure the phosphorescence lifetimes of each compound. These findings contribute to the growing class of fully organic phosphorescent materials with extensive application potential. Phenothiazine serves as a versatile molecular scaffold, offering high tunability and synthetic accessibility—both of which are crucial attributes in the development of phosphorescent materials. While this research is ongoing, it provides valuable insights for the future advancement of organic phosphorescent systems.

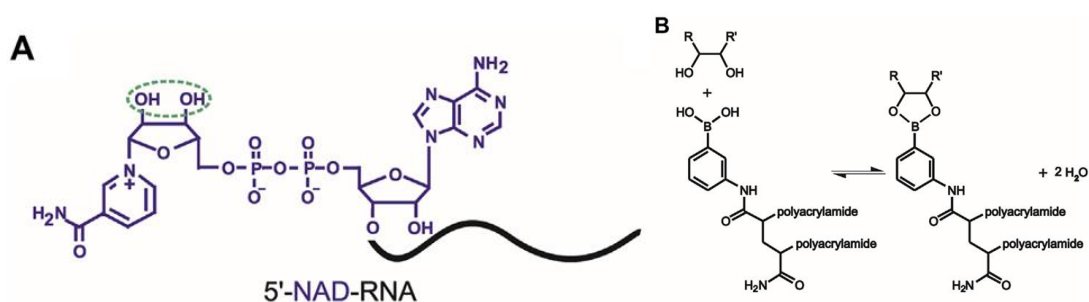
Fenilboronio rūgštys nukleorūgščių analizėje

Ugnė Vaitiekūnaitė, Viktoras Masevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Nukleorūgščių atpažinime (pavyzdžiui prisijungiant baltymus) svarios įtakos turi kovalentinės šių rūgščių 5'-galo modifikacijos. Tiriant šių modifikacijų biologinę rolę, modifikuotų ribonukleorūgščių (RNR), tokių kaip 5'-NAD ar 5'-FAD RNR, paplitimo ir pasiskirstymo ląstelėse analizei atlikti gali būti panaudotas gelių elektroforezės metodas, kurio metu nukleorūgštys atskiriamos pagal jų dydį bei krūvį. Tačiau kofaktoriais modifikuotos RNR nuo nemodifikuotų negali būti atskirtos tipiškai šiam metodui naudojamais akrilamido geliais, esant panašioms nukleorūgščių masės ir krūvio vertėms. Akrilamido geliai, kopolimerizuoti fenilboronio rūgštimis, pasitelkia boraro rūgšties funkcinės grupės gebėjimą suformuoti stabilų kompleksą su 1,2-cis diolio grupe (esančia ir NAD kofaktoriaus struktūroje). Kompleksų susidarymas leidžia išskirti 5'-NAD-RNR dėl didesnio jų sulaikymo ir mažesnio mobilumo gelyje. Šis metodas taip pat gali būti pasitelkiamas didelio kiekio grynų 5'-modifikuotų RNR sintezėje. *In vitro* 5'-NAD-RNR transkripcija neretai atliekama pasitelkiant T7 RNR polimerazę bei naudojant NAD kaip inicijuojantį nukleotidą. Tačiau šio metodo rezultatas - 5'-NAD modifikuotų ir 5'-trifosforilintų RNR mišinys, kurio išrūšiuvimui ir tinka fenilboronio rūgštimi kopolimerizuotų gelių elektroforezė. Metodo metu gaunamos ryškios apibrėžtos juostos leidžia atlikti ne tik RNR atskyrimą, bet ir kiekybinę analizę.

Gelių kopolimerizacijai N-akrioloil-3-aminoboronio rūgštis iš aminofenilboronio rūgšties hemisulfato ir akriloilchlorido gali būti nesudėtingai sintetinama esant 70% išeigai, tačiau bandymai sintezę atlikti naudojant didesnę substrato kiekį baigėsi ryškiu sintezės išeigos sumažėjimu. Būsimų tyrimų tikslas – išsiaiškinti išeigos sumažėjimo priežastis ir optimizuoti reakcijos sąlygas didesnio kiekio sintezei. Toliau tiriama gali būti ir skirtingų fenilo žiedo pakaitų įtaka junginio sąveikai su 1,2-cis dioline grupe.



Schema. A) 5'-NAD-RNR su laisvomis 1,2-cis diolinėmis grupėmis. B) Poliakrilamido gelyje fiksuotos aminofenilboronio rūgšties ir cis-diolio grupės sąveika. (Nübel et al., 2017)

Integruotas Plungės miesto komunalinių nuotekų išleistuvo ir Mažosios Sruojos upelio nuosėdų geocheminis vertinimas

Matas Vaitkus¹, Stasys Tautkus², Donatas Kaminskas¹

¹ Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas.

² Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas.

Šiuolaikinės upių nuosėdos yra sudėtingos mechaninės, mineralinės ir cheminės sudėties sistemos, jautrios jų supančios aplinkos fizinių ir cheminių sąlygų pokyčiams (Radzevičius, Vareikienė, 2001). Pastaraisiais dešimtmečiais itin svarbiu veiksmu, lėmusiu upių nuosėdų makro- ir mikroelementinę sudėtį, tapo žmogaus gamybinė ir ūkinė veikla (Kadūnas, 1998). Buitinės nuotekos yra įvardijamos kaip vienos iš pagrindinių technogeninės taršos šaltinių. Nors pastaraisiais metais nuotekų valymo technologijos sparčiai tobulėja ir joms skiriama vis daugiau dėmesio, valymo įmonės negali užtikrinti 100% valymo efektyvumo, o tai yra svarbu, kadangi į aplinką patekę mikroelementai nesuyra gamtinėje aplinkoje. Norint patikimai interpretuoti rezultatus, būtina atlikti išsamius granulimetrinės sudėties, organinės medžiagos kiekio, cheminės ir mineraloginės sudėties tyrimus.

Pagrindinis šio tyrimo tikslas - įvertinti Plungės miesto komunalinių nuotekų išleistuvo ir Mažosios Sruojos upelio nuosėdų bei aplink esančio viršutinio dirvožemio sluoksnio užterštumą sunkiaisiais metalais.

Tyrimo metu nustatyta dirvožemio ir nuosėdų mineralinė, cheminė, granulimetrinė sudėtis ir organinės medžiagos kiekis. Gauti rezultatai parodė, kad viršutinis dirvožemio sluoksnis nėra užterštas sunkiaisiais metalais. Kai kurių elementų - Cu, Pb, Zn, Cr, As ir Mo - koncentracijos koeficiento reikšmės upelio nuosėdose viršija 1, todėl juos galima laikyti potencialiais teršalais. Vis dėlto, tyrimo metu tiek dirvožemyje, tiek nuosėdose nenustatyta sąsaja tarp organinės medžiagos, molio dydžio dalelių kiekio ir cheminės sudėties.

Literatūra

Radzevičius, A., & Vareikienė, O. (2001). Geochemical peculiarities of river sediments of the Mūša and the Nemunėlis basins. *Geologija*, 33, 18–28.

Kadūnas, V. (1998). *Technogeninė geochemija*. Geologijos institutas.

Baltų tekstūrinių dažų gamyba, užpildu naudojant gamybos atliekas

Zenonas Valančius, Edita Prichockienė

Kauno Technologijos Universiteto Cheminės technologijos fakulteto Silikatų technologijos katedra

Dažai plačiai naudojami įvairių objektų spalvinimui ar paviršiaus padengimui siekiant dekoratyvinio ar apsauginio efekto. Dažų yra labai daug rūšių, kokius panaudoti sprendžiama pagal objekto paskirtį ir naudojimo būdą. Baltų silikatinių vandeninių dažų gamyboje kaip baltinantis agentas yra naudojamas titano oksidas, kurio vertė bendroje dažų savikainoje yra didžiausia. Todėl gamintojai turi ieškoti būdų kaip atpiginti jų gamybą. Atpiginti gamybą praktiškai įmanoma tik parenkant pigesnius pigmentus ar užpildus, nebloginant dažų kokybės. Todėl yra tikslas ieškoti būdų, kad bent dalį titano oksido būtų galima pakeisti pigesniais komponentais ar net gamybos atliekomis.

Katedroje atlikti tyrimai, titano oksidą kaip pigmentą keičiant gamybos atlieka fosfogipsu, parodė, kad fosfogipsas nėra tinkamas kaip pigmentas baltų tekstūrinių dažų gamyboje. Tęsiant tyrimus buvo bandyta fosfogipsą panaudoti kaip baltą užpildą. Šio darbo tikslas ir yra pagaminti baltus, tekstūrinius, vandens pagrindo dažus, atitinkančius kokybės reikalavimus, kai užpildu naudojama gamybos atlieka – fosfogipsas.

Pagrindinės dažų sudedamosios dalys (žaliavos) pigmentai, užpildai, plėvelės, tirpikliai ir kiti priedai naudoti analogiškai žaliavoms, kurias naudoja silikatinių dažų gamintojų Lietuvoje: bermakol 1000, 20 % KOH, dispergantas Oratan 4045, putų slopiklis faomas, TiO₂, omyocarb, dolomitas, akrilas, tirštiklis, vanduo. Tyrimuose naudojome tiek gryną atliekinį fosfogipsą, tiek neutralizuotą, kai jame esančias rūgščias priemaišas apdorojome su 5 % CaO. Fosfogipsu buvo keičiama iki dviejų trečdalių nuo bendro užpildo kiekio dažuose.

Dažų baltumo laipsnis, dažų blizgesys, atsparumas šlapiam valymui ir dengiamumas buvo nustatyti naudojant standartinius dažų pramonėje taikomi instrumentinės analizės metodus.

Atlikus išsamius tyrimus, parodyta, kad tiesiogiai fosfogipsas ir kaip užpildas negali būti naudojamas gaminant vandens emulsinius dažus. Didėjantis fosfogipso kiekis keičia dažų kokybės charakteristikas: sumažino baltumo laipsnį ir atsparumą šveitimui, padidino dažų terpės rūgštingumą, dėl kurio atsirado pelėsis ir pablogėjo dažų kokybė. Tolimesnis tyrimas naudojant kalkėmis modifikuotą fosfogipsą kaip dalinį užpildą, pakeičiantį juo dalį dolomito, Omyacarb ir TiO₂, parodė, kad fosfogipsas gali teigiamai paveikti dažų kokybę pagerindamas tokias svarbias charakteristikas kaip dažų terpės pH, jos blizgesys, baltumas, padengimas, klampumas ir tankis. Vertinant pilną dažų sluoksnio nusitrynimą, mėginiai, į kuriuos buvo pridėta iki 32 % fosfogipso nuo bendro visų užpildų kiekio, atlaikė 9000–9700 ciklus, kai etaloninis mėginys 8900 ciklą. Fosfogipso priedas taip pat pagreitino stabilios dažų plėvelės susidarymo laiką, taip apsaugodamas nuo išorinių pažeidimų. Galima teigti, kad šis kalkėmis apdorotas fosfogipso priedas leidžia 40 % sumažinti TiO₂ kiekį dažuose nepabloginam, išlaikant aukštesnę kokybę nei etaloniniai.

Ni-Mo-W katalizatoriai vandenilio generavimui

Gitana Valeckytė, Zita Sukackienė, Jūratė Vaičiūnienė, Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, Eugenijus Norkus

Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Katalizės skyrius

Vandenilis – alternatyvus ateities kuras. Yra žinoma, kad vandenilis pagal gavimo būdus yra skirstomas į keturias rūšis: pilkasis, mėlynasis, žaliasis bei geologinis (baltasis ar auksinis). Pilkąjį vandenilį galima išgauti iš metano dujų riformingo būdu. Šis būdas yra geriausiai žinomas ir gausiausiai naudojamas. Šios reakcijos metu į aplinką yra išskiriamas anglies dioksidas (CO_2). Mėlynasis vandenilis beveik niekuo nesiskiria nuo pastarojo. Tiesiog vykdant metano dujų riformingą yra naudojami tam tikri filtrai, kad išsiskiręs CO_2 nepatektų į aplinką. Žaliojo vandenilio gamybai yra naudojami atsinaujinantys šaltiniai, o vandenilio dujos, susidaranti Žemės mantijoje ir dėl įvairių geologinių procesų išsiskiriančios į paviršių, vadinamos geologiniu vandeniliu. Be šių gerai visiems žinomų vandenilio gavimo būdų yra dar vienas. Tai yra vandenilio išgavimas iš medžiagų, kurios savo sudėtyje turi didelį kiekį vandenilio. Natrio borohidridas laikomas viena tinkamiausių medžiagų vandenilio saugojimui. Pažymėtina, kad borohidrido hidrolizės reakcijos metu gaunamas ypač grynas vandenilis. Todėl selektyvių šios reakcijos katalizatorių atradimas yra svarbi tyrimo dalis, siekiant išvengti elektrodo paviršiaus užteršimo proceso metu ir vandenilio saugojimo bei transportavimo trūkumų.

Šio darbo tikslas buvo suformuoti NiMoW(5)/Cu ir NiMoW(10)/Cu katalizatorius, juos charakterizuoti ir įvertinti jų katalizines savybes natrio borohidrido hidrolizės reakcijai. NiMoW dangos buvo nusodintos ant Cu pagrindo paprastu cheminiu nusodinimo metodu, naudojant morfolino boraną kaip reduktorių. Buvo gauti katalizatoriai su skirtingu wolframo masės procentiniu kiekiu priklausomai nuo į nusodinimo tirpalą dedamo wolframo druskos kiekio: 5 bei 10 mM. Katalizatorių paviršiaus morfologija, struktūra ir cheminė sudėtis buvo ištirta naudojant skenuojančią elektronų mikroskopiją (SEM), Rentgeno spindulių energijos dispersinę analizę (EDS) ir indukuotos plazmos optinės emisijos spektroskopiją (ICP-OES). Natrio borohidrido hidrolizės reakcijos katalizinis aktyvumas buvo įvertintas išmatuojant vandenilio kiekį, išsiskiriantį iš katalizuojamos natrio borohidrido hidrolizės reakcijos.

Darbo metu buvo suformuoti abu minėti NiMoW/Cu katalizatoriai. Buvo ištirta jų morfologija ir struktūra. Nustatyta, kad paruoštos dangos susideda iš įvairaus dydžio dalelių, kurios susijungia į ovalo formos aglomeratus. Nustatyta, kad trijų komponentų NiMoW(5) danga pasižymėjo didžiausiu kataliziniu aktyvumu. Nustatyta, kad šio katalizatoriaus H_2 išsiskyrimo greitis $70\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūroje yra $4,44\text{ ml/min}$.

Investigating the Impact of Sr²⁺ Substitution on the Structural Properties and Phase Transition Behavior of La₂Mo₂O₉

Ugnė Vazgelevičiūtė, Giedrė Gaidamavičienė, Artūras Žalga

Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

As ecological requirements increase, the development of new clean and sustainable energy sources is needed. Solid oxide fuel cells (SOFCs) are a promising technology due to their high efficiency and low emissions. The performance of SOFCs is significantly influenced by the choice of electrolyte material, which must exhibit high ionic conductivity, thermal stability at operating temperatures, and gas impermeability to prevent mixing between fuel and oxidizer before they reach the reaction sites.

Due to its high ionic conductivity at elevated temperatures, yttria-stabilized zirconia (YSZ) remains the most widely used electrolyte in SOFCs. However, it operates effectively only at high temperatures, leading to material degradation and reduced system longevity. A promising alternative is La₂Mo₂O₉, which exhibits high oxide-ion conductivity at intermediate temperatures. This material undergoes a structural phase transition from a monoclinic structure to a cubic structure with enhanced conductivity above 580 °C. A critical challenge lies in stabilizing the cubic phase at lower temperatures to enable improved performance and durability. Many studies have shown that doping lanthanum molybdate with various metals can stabilize the cubic phase at lower temperatures, enhancing its ionic conductivity and making it a viable candidate for SOFC applications.

In this study, La_{2-x}Sr_xMo₂O_{9-x/2} (x=0.01–0.2) ceramics were synthesized using an aqueous sol-gel method, and the effects of Sr²⁺ substitution on structural and phase transition behavior were investigated. X-ray diffraction (XRD) was used to analyse the crystal structure, while differential scanning calorimetry (DSC) was employed to study phase transition. Structural analysis revealed that Sr²⁺ substitution at concentrations above x=0.04 led to the stabilization of the cubic phase at room temperature. Additionally, a secondary phase only appears when x>0.19. DSC analysis indicates that Sr²⁺ substitution significantly influences the phase transition of La₂Mo₂O₉. An anomalous phenomenon – two-phase transition peaks – was observed in the La_{1.96}Sr_{0.04}Mo₂O_{8.98} sample. This may be attributed to a phase transition from the dynamic disordered state to the static disordered state in oxygen ion/vacancy distribution. No apparent phase transition peaks can be observed for compositions with x>0.10, suggesting the complete suppression of structural phase transition at room temperature.

These findings highlight the potential of Sr²⁺ doping in stabilizing the high-conductivity cubic phase of La₂Mo₂O₉, paving the way for its application as a SOFC electrolyte at reduced operating temperatures.

Silver doped calcium phosphate synthesized for antibacterial soap by precipitation method

Tomas Verbickas, Justinas Januškevičius, Živilė Stankevičiūtė

Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Traditional soaps provide basic cleansing to the skin but lack true antibacterial activity - they are designed to simply lift debris and microbes up from the skin instead of inhibiting bacterial activity. Even though antibacterial soaps are now widely available, the majority of them contain agents that may cause negative effects on the human body, such as contact dermatitis or asthma. However, incorporating metal-doped antimicrobial agents into soap formulations might serve as a solution to this issue. Silver is known to have strong antimicrobial properties, whereas calcium phosphate (CP) is a material widely used in medical and pharmaceutical applications. By doping calcium phosphate with silver, the material could serve as an additive in soap formulations, enhancing its antibacterial properties.

In this work, silver doped calcium phosphate was synthesized by wet precipitation method. Calcium nitrate tetrahydrate, diammonium hydrogen phosphate, silver nitrate solutions and ammonia solution were used as precursors for silver doped CP. After precipitation and washing procedures, the precipitates were dried overnight in the oven at 50 °C. Finally, the dry powder was ground in agate mortar and annealed in the furnace for 5 hours in air. The assessment of phase purity was conducted using obtained X-Ray diffraction data. Infrared spectra (FTIR) were recorded to evaluate the functional groups presented in synthesized material. Scanning electron microscopy was used to determine surface morphology and particle size. The phase purity and microstructure of silver doped CP were evaluated and discussed.

Modifikuoto heksagoninio boro nitrido keraminių 3D fotokatalizatorių gamyba naudojant stereolitografiją ir pirolizę

Robertas Virkėtis, Vaidas Klimkevičius, Greta Merkininkaitė, Simas Šakirzanovas

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas

Pastaraisiais dešimtmečiais adityvioji gamyba sulaukia vis daugiau susidomėjimo dėl pritaikomumo sudėtingų 3D objektų gamybai. Vienas iš pagrindinių jos metodų yra stereolitografija, kuri naudoja UV šviesą gaminant 3D struktūras iš UV šviesai jautrios dervos. Šiam procesui pirmenybė yra teikiama homogeninėms medžiagoms, kadangi jos pasižymi nuoseklia sudėtimi ir tolygiai pasiskirsčiusiomis savybėmis atspausdintuose objektuose. Tai užtikrina padidintą mechaninį stiprumą, struktūros vienodumą ir lygesnę paviršiaus tekstūrą. O kietų dalelių dispergavimas dervoje dėl sedimentacijos sukelia nevienodą dalelių pasiskirstymą atspausdintame objekte. Taipogi, stereolitografijos ir pirolizės (apdirbimas aukšta temperatūra bedeguonėje atmosferoje) kombinacija leidžia gaminti sudėtingos struktūros 3D keraminius objektus.

Heksagoninis boro nitridas (h-BN) pasižymi cheminiu inertiškumu, atsparumu korozijai, mažu tankiu ir atsparumu didelėms temperatūroms. Anglies įterpimas į h-BN kristalinę gardelę mažina jos draustinę juostą, verčiant ją puslaidininkiu, dėl ko ji tampa patrauklia medžiaga fotokatalizei. Puslaidininkiai veikiami šviesos katalizuoja foto reakcijas, o pats procesas yra žinomas kaip fotokatalizė, kuri gali būti pritaikyta vandens valymui nuo biologiškai neskaidžių organinių teršalų.

Pirmiausia buvo susintetintas borą turintis organinis monomeras 2-(5,5-dimetil-1,2,3-dioksaborinan-2-iloksil)etil metakrilatas (BoMA), kurio atlikta protonų branduolių magnetinio rezonanso spektroskopinė analizė patvirtino junginio susidarymą su 70% išeiga. Po to, naudojant UV šviesos stereolitografą Zortrax Inkspire buvo pagaminti 3D objektai iš BoMA. Atspausdinti 3D objektai buvo kaitinami pirmiausia vakuume iki 900 °C, o po to iki 1700 °C N₂ atmosferoje. Atlikta rentgeno spindulių difrakcinė analizė patvirtino susidariusią h-BN fazę. Taip pat, buvo sėkmingai ištirtas keraminių darinių fotokatalitinis aktyvumas ardant rodamino B dažą po halogenine lempa, kuri imitavo saulės šviesą.

Šiuo tyrimu yra demonstruojama, kad borą turinčio organinio monomero sintezė, stereolitografija ir pirolizė yra tinkamas būdas gaminant fotokatalizatorius, kurie veikiami saulės šviesos ardo organinius teršalus vandenyje.

Terminių anomalijų Rytinėje Baltijos regiono dalyje sąsajos su atmosferos cirkuliacija

Vaiga Vyšniauskienė¹, Gintautas Stankūnavičius²

¹ Gamtos tyrimų centras

² Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Šiame tyrime buvo analizuojamos 1951-2020 metų vidutinės paros oro temperatūros anomalijos žiemos ir vasaros sezonais Rytinėje Baltijos regiono dalyje. Atmosferos cirkuliacijos įtakai vertinti buvo pasitelkta Heso–Brezovskio (H-B) atmosferos cirkuliacijos (*Grossweterlagen*) klasifikacija. Tyrimo regionas išskirtas koordinatėmis: 53.75° - 56.5° š. pl. ir 21° - 26.75° r. ilg., o 70 metų trukmės tyrimo laikotarpis buvo padalintas į du klimatinius periodus: 1951-1985 ir 1986-2020 metai. Naudojant kiekvieno mėnesio vidutinės paros temperatūros 10-tą ir 90-tą procentilės, buvo išskirtos terminės anomalijos žiemos ir vasaros sezonais. Rezultatai parodė, kad Rytinėje Baltijos regiono dalyje šilumos anomalijų metu žiemą daugiau fiksuota zoninės cirkuliacijos formos atvejų. Per visą tiriamąjį laikotarpį, anomalios šilumos metu žiemą šios formos vidutiniškai padaugėjo 10 %, mišrios 8 %, o meridianinės sumažėjo apie 1 %. Neigiamų temperatūros anomalijų metu žiemą dažniausiai vyraudavo meridianinės formos cirkuliacija, tačiau jų per tą patį laikotarpį sumažėjo 3 %, zoninės – 4 %, o mišrios padaugėjo 7 %. Vasaros sezono metu neigiamos ir teigiamos temperatūros anomalijos daugiausia yra meridianinės cirkuliacijos formos įtakoje. Tačiau jos įtaka tiriamuoju laikotarpiu šiek tiek sumažėjo, o mišrios - padidėjo. Ekstremalių terminių anomalijų išskyrimui buvo naudojamos vidutinės paros temperatūros 2-a ir 98-a procentilės. Pirmuoju periodu vasarą daugiausia šilumos anomalijų įvyko vyraujant Vakarų Europos slėniui (TRW), o antruoju - Vidurio Europos balnagūbriui (BM). Neigiamos temperatūros anomalijų metu vasarą daugiausia vyraudavo zoninės cirkuliacijos formos – Vakarinis anticikloninis (WA) tipas pirmuoju periodu ir Vakarinis cikloninis (WZ) antruoju. Žiemą Rytinėje Baltijos regiono dalyje daugiausia šilumos anomalijų susidarė vyraujant Vakariniam cikloniniam (WZ) tipui, o neigiamų temperatūros anomalijų - Fenoskandijos anticiklono tipui (HFA).

Diana Vištorskaja, Artūras Katelnikovas, Aivaras Kareiva

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Aktuali šiuolaikinio skaitmeninio amžiaus problema - energijos poreikio padidėjimas, kuris gali sukelti daugybę aplinkos pokyčių. Šios problemos galimas sprendimas - naujų aplinkai draugiškų apšvietimo technologijų bei efektyvių daugiafunkcinių medžiagų kūrimas (Nair ir kt., 2019). Mokslininkai ypatingą dėmesį skiria neorganinėms liuminescencinėms medžiagoms (liuminoforams, fosforams), kurios praktiškai naudojamos beveik visuose dirbtinės šviesos įrenginiuose. Liuminoforai susideda iš kristalinio pagrindo (matricos) ir aktyvatoriaus, dažniausiai lantanoidų arba pereinamųjų metalų jonų (Li ir kt., 2009). Granato struktūros junginiai yra plačiausiai naudojamos optinės matricos medžiagos. Itrio aliuminio granatas ($Y_3Al_5O_{12}$, YAG) išsiskiria geru optiniu skaidrumu nuo ultravioletinių iki infraraudonųjų spindulių, puikiu terminiu bei cheminiu stabilumu. Dėl savo unikalių savybių YAG legiruotas pereinamųjų metalų arba lantanoidų jonais randa platų pritaikymą fluorescencijos srityje ir yra laikomas pagrindiniu komponentu visų spalvų fosforuose (Li ir kt., 2009; Nair ir kt., 2019; Silveira ir kt., 2020). Granato struktūros junginiai dažnai yra gaunami zolių-gelių sintezės metodu, kuris yra nekenksmingas aplinkai, nereikalauja aukštos temperatūros ar slėgio, o šiuo būdu susintetinti produktai pasižymi aukštu faziniu grynumu (Silveira ir kt., 2020). Taigi, šio darbo pagrindinis tikslas yra zolių-gelių sintezės metodu gauti naujos cheminės sudėties $Y_{2.47}Na_{0.5}Ln_{0.03}Al_5O_{12}$, $Y_{2.47}K_{0.5}Ln_{0.03}Al_5O_{12}$, $Y_{2.97}Ln_{0.03}Al_{4.95}V_{0.05}O_{12}$, $Y_{2.92}Na_{0.05}Ln_{0.03}Al_{4.9833}V_{0.0167}O_{12}$ ($Ln = Tb^{3+}$, Eu^{3+}) liuminoforus bei ištirti jų struktūrinės, morfologinės bei optinės savybes. Gauti produktai buvo apibūdinti naudojant Rentgeno spindulių difrakcijos analizę (XRD), Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR), skenuojančiąją elektroninę mikroskopiją (SEM), be to, buvo išmatuoti mėginių emisijos ir sužadavimo spektrai, programa apskaičiuotos spalvinės koordinatės.

Literatūra

- Nair, G. B., Swart, H., & Dhoble, S. (2019). A review on the advancements in phosphor-converted light emitting diodes (pc-LEDs): Phosphor synthesis, device fabrication and characterization. *Progress in Materials Science*, 109, 100622.
- Li, G., Cao, Q., Li, Z., Huang, Y., Wei, Y., & Shi, J. (2009). Photoluminescence properties of YAG:Tb nano-powders under vacuum ultraviolet excitation. *Journal of Alloys and Compounds*, 485(1–2), 561–564.
- Silveira, W. S., Nascimento, P. A., Silva, A. J., & Rezende, M. V. S. (2020). Luminescent properties and energy transfer mechanism from Tb^{3+} to Eu^{3+} doped in $Y_3Al_5O_{12}$ phosphors. *Journal of Alloys and Compounds*, 822, 153651.

Oro drėgmės dinamika rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje

Anastasija Volkova

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Oro drėgmė – tai svarbus klimato sistemos rodiklis, kuris daro įtaką Žemės energijos balansui, hidrologiniam ciklui ir orų reiškiniams. Šiame darbe analizuojami ilgalaikiai oro drėgmės pokyčiai rytinėje Baltijos regiono dalyje 1901-2023 metais. Tiriama teritorija apima rytinę Baltijos regiono dalį nuo 53.5° iki 59.5° šiaurės platumos ir nuo 20.0° iki 28.5° rytų ilgumos. Ši dalis apima Lietuvą, Latviją ir Estiją bei nedidelę Baltarusijos bei Rusijos dalį. Tyrime naudojami vandens garų slėgio duomenys iš CRU TS 4.08 duomenų bazės, taikomi statistiniai siekiant įvertinti tiek oro drėgmės erdvinį pasiskirstymą, tiek kaitą laike. Ilgalaikių pokyčių statistinis reikšmingumas nustatytas neparametriniu Mano-Kendalo testu, kai $p < 0.05$.

1991-2020 metais didžiausios vidutinės metinės reikšmės fiksuotos teritorijos pietvakariuose, o mažiausios – Estijoje ir Rytų Latvijoje. Tai lemia oro temperatūros pasiskirstymas. Pajūryje oro drėgnumas didesnis dėl Baltijos jūros poveikio, o žemyninėje dalyje pastebimi ryškesni sezoniniai svyravimai. Mažiausias vandens garų slėgis būna sausį, didžiausias – liepą, o ryškiausi sezoniniai kontrastai žiemą nustatyti tarp pajūrio ir labiau į kontinentą nutolusių teritorijų, tuo tarpu vasarą – tarp pietinių ir šiaurinių regiono dalių.

Rezultatai rodo statistiškai reikšmingą vandens garų slėgio augimą visoje tiriamoje teritorijoje. Ryškiausi pokyčiai fiksuojami pakrantėje bei teritorijos šiaurėje. Didžiausias sezoninis padidėjimas nustatytas vasarą, ypač Latvijos pajūryje ir centrinėje tiriamos teritorijos dalyje, o mažiausi pokyčiai fiksuoti pavasarį. Baltijos šalių sostinėse (Rygoje, Taline ir Vilniuje) taip pat pastebimas reikšmingas vandens garų slėgio augimas, sparčiausias vasaros metu, o lėčiausias – žiemą.

Sintezės sąlygų įtaka aukštynerve liuminescencija pasižyminčių nanodalelių savybėms

Viktorija Vrubliauskaitė, Eglė Ežerskytė, Vaidas Klimkevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Lantanoidais legiruotos, aukštynerve liuminescenciją pasižyminčios nanodalelės (angl. *upconverting nanoparticles*, UCNP) turi unikalią savybę sugerti artimą infraraudonąją spinduliuotę (NIR) ir išspinduliuoti aukštesnės energijos (matomą ar ultravioletinę) šviesą. Dėl šios priežasties jos gali būti vertingos įvairiems biologiniams pritaikymams: NIR spinduliuotė gali prasiskverbti per odą į gilumines audinių sritis, nesukeldama intensyvaus kaitinimo, todėl NIR sužadintos UCNP plačiai tiriamos dėl galimo panaudojimo teranostikoje, bioanalitikoje ir biovaizdavime. Be to, šios nanodalelės taip pat gali būti plačiau pritaikomos: super-rezolucijos vaizdavimui, NIR-II vaizdavimui, užkoduotiems brūkšniniams kodams, pirštų atspaudų analizei, NIR regėjimui, optogenetikai, UCNP palaikomoms fotocheminėms manipuliacijoms, optiniams pincetams, 3D spausdinimui, lazerių generavimui, UCNP-molekulinių nanohibridų kūrimui ir kt. (Malhotra et al., 2023).

Tačiau, norint efektyviai panaudoti UCNP įvairiose srityse, būtinos aiškiai apibrėžtos nanodalelių morfologinės ir optinės savybės, o sintezės sąlygos – pagrindinis parametras, kuriuo varijuojant galima kontroliuoti šias savybes.

Šio tyrimo tikslas yra optimizuoti UCNP, kurių bendroji formulė yra $\text{NaGdF}_4:18\%\text{Yb}^{3+},2\%\text{Er}^{3+}$ sintezės sąlygas. Įvertinta sintezės temperatūros, trukmės bei lantanoidų druskų ir NH_4F molinio santykio įtaka nanodalelių morfologijos ir optinių savybių pokyčiams. Dalelių dydis, kristalinė fazė ir grynumas buvo analizuojami naudojant rentgeno difrakcijos metodą, o liuminescencijos emisijos intensyvumas ir gyvavimo trukmė – naudojant fotoluminescencijos spektroskopiją.

Gauti empiriniai duomenys suteikia papildomų įžvalgų apie sintezės sąlygų įtaką $\text{NaGdF}_4:18\%\text{Yb}^{3+},2\%\text{Er}^{3+}$ UCNP savybėms. Parinkus tinkamą sintezės temperatūrą, trukmę ir lantanoidų su NH_4F santykį, galėjome tiksliai kontroliuoti sintetinamų nanodalelių dydį bei optinį atsaką.

Literatūra

Malhotra, K., Hrovat, D., Kumar, B., Qu, G., Van Houten, J., Ahmed, R., Piunno, P. a. E., Gunning, P. T., & Krull, U. J. (2023). Lanthanide-Doped Upconversion Nanoparticles: Exploring A Treasure Trove of NIR-Mediated Emerging Applications. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 15(2), 2499–2528.

Magnetinių nanodalelių modifikavimas biomolekulių SERS tyrimams

Greta Zambžickaitė^{1,2}, Lina Mikoliūnaitė^{1,2}

¹*Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius*

²*Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas*

Paviršiaus sustiprinta Ramano sklaida (SERS) yra pažangi spektroskopinė metodika, leidžianti itin jautriai aptikti molekules. Ši metodika remiasi Ramano sklaidos signalo sustiprinimu, kai tiriamosios molekulės yra arti metalinių nanostruktūrų, dažniausiai pagamintų iš tauriųjų metalų, tokių kaip sidabras ar auksas. Dėl šio sustiprinimo SERS tapo galingu įrankiu analizuojant chemines ir biologines medžiagas, įskaitant biomolekules. Magnetinių geležies oksido ir sidabro nanodalelių derinimas tarpusavyje sukuria nanokompozitus, turinčius tiek magnetinių, tiek plazmoninių savybių. Šie nanokompozitai yra ypač naudingi SERS tyrimuose dėl šių priežasčių: 1) sidabro nanodalelės pasižymi stipriomis plazmoninėmis savybėmis, kurios žymiai sustiprina Ramano signalus, o tai leidžia tiksliai ir jautriai aptikti labai mažas biomolekulių, tokių kaip baltymų, nukleorūgščių koncentracijas; 2) geležies oksido nanodalelės suteikia magnetines savybes, leidžiančias lengvai surinkti, koncentruoti ir perkelti nanokompozitus kartu su adsorbavusiomis analitės molekulėmis naudojant išorinį magnetinį lauką. Ši savybė palengvina mėginių paruošimą, padidina aptikimo efektyvumą bei signalo atsikartojamumą. Apibendrinant, magnetinių geležies oksido ir sidabro nanodalelių naudojimas SERS tyrimuose sukuria efektyvią platformą biomolekulių analizei, derinant didelį jautrumą, tikslumą ir paprastą mėginių paruošimą.

Šiame darbe pristatome magnetines geležies oksido nanodaleles dekoruotas įvairių formų sidabro nanodalelėmis. Susintetintos ir / arba dekoruotos nanodalelės buvo charakterizuotos transmisine elektronų mikroskopija, skenuojamąja elektronine mikroskopija, ultravioletine ir regimąja spektroskopija bei pritaikytos paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje naudojant biomolekules: adeniną ir ergotioniną.

Aplinkai draugiška alavo sulfido sluoksnių sintezė ir iškaitinimo efektas

Dominyka Zubrickaitė, Asta Bronušienė, Ingrida Ancutienė

Kauno technologijos universiteto Cheminės technologijos fakulteto Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra

Metalų chalkogenidai, ypač alavo sulfidai, sulaukia didelio dėmesio dėl savo ypatingų fizikinių ir cheminių savybių. Alavas ir siera yra netoksiški, gamtoje paplitę elementai, todėl alavo chalkogenidai yra aktualūs energetikos reikmėms dėl puikių elektrinių ir optinių savybių. Ortorombinės struktūros SnS, pasižymi 1,1 eV draustinės juostos energija, yra panašus į silicij ir pasižymi daug žadančiu veikimu artimųjų infraraudonųjų spindulių srityje. SnS gali turėti ir n tipo, ir p tipo laidumą, priklausomai nuo iškaitinimo temperatūros. SnS₂ yra n tipo puslaidininkis, turintis šešiakampę struktūrą. Mišrių alavo sulfidų (SnS_x) savybių universalumas leidžia juos naudoti įvairiose technologinėse srityse, pavyzdžiui, fotoelektros įrenginiuose, superkondensatoriuose, optiniuose jutikliuose ir tranzistoriuose.

Nuoseklosios jonų sluoksnių adsorbcijos ir reakcijos (SILAR) metodas siūlo ekonomišką ir efektyvų plonų sluoksnių nusodinimo metodą, leidžiantį gauti didelio ploto dangas, stipriai sukibusias su pagrindu. Šio darbo tikslas buvo aplinkai draugišku metodu susintetinti alavo sulfido sluoksnius ant FTO stiklo, iškaitinti juos azoto atmosferoje 200 °C temperatūroje, iširti struktūrinės, morfologinės ir optinės savybes.

Pirmiausia nuplauti FTO stikliukai ultragarsu buvo valomi acetone 10 min. Sluoksnių sudarymui naudotas SILAR metodas, kuris pagrįstas nuosekliu katijonų ir anijonų pirmtakų tirpalų ir distiliuoto vandens naudojimu. Vandeninį katijoninį tirpalą sudarė 0,05 M SnCl₂ su 1,0 g citrinos rūgšties, o vandeninis anijoninis tirpalas buvo 0,05 M Na₂S. Sintezei buvo panaudota 20, 30 ar 40 SILAR ciklų 40 °C temperatūroje. Ploni alavo sulfidų sluoksniai buvo apibūdinti naudojant RSDA, SEM-EDS ir UV-Vis spektroskopijos analizes.

Atlikus RSDA analizę kaitintų ir nekaitintų bandinių rentgenodifraktogramose vyrauja šių fazių smailės: SnS, Sn₂S₃. Kadangi gauti sluoksniai ploni, todėl rentgenodifraktogramose pastebima ir alavo oksido fazė. Iškaitinus padidėja sluoksnių kristališkumas, bet fazinė sudėtis išlieka ta pati. Keičiant SILAR ciklų skaičių sluoksnių fazinė sudėtis taip pat išlieka ta pati. SEM analizės rezultatai parodė, kad didinant ciklų skaičių alavo sulfidų sluoksnių struktūra tampa tankesnė, tolygesnė ir homogeniškesnė, mažėja porėtumas, vienodėja grūdelių dydis ir pasiskirstymas. Tačiau pastebima, kad vietomis yra netolygiai pasidengusių sričių. Draustinės juostos pločio intervalas kinta nuo 1,6 iki 3,9 eV.

Daugiapoliarumo paradigmos formalūs modeliai cheminių elementų atomų funkcijoms

Saulius Židonis

Tarptautinė Lietuvos mokslininkų ir inteligentų asociacija „Kūryba“

Šiame darbe pristatoma pagrindinės mokslosferos nepastebėta ir deramai neįvertinta mokslo ir pažinijos paradigma - daugiapoliarumas, besiskiriantis specifine polinarine sąveika, kokybių ir dėsnių tarp jų išskėlimu, modeliavimu, vidiniu dialektiškumu ir galimų atvejų konkretumu.

Analizuojama paradigmos informacija, gauta suradus ir peržiūrėjus skaitmenizuotas kopijas raritетinių monografijų, parašytų Kazachstano mokslininko Lenskij V.V. kartu su bendraautorium Kočnev A.G. ir išleistų skirtingų mokslo institucijų leidyklose 1982 ir 1986 metais nedideliais tiražais. Bendra autorių indėliai 1982 metų monografijoje „Polinariai santykiai ir daugiapoliariai modeliai“ (iš rusų k.) sukonkretinti taip, kad formalūs modeliai yra sukurti pagrindinio bendraautorius, todėl daugiapoliarumo formalųjį aparatą galima identifikuoti kaip „Lenskio grupes“.

Darbo tikslas: patikrinti polinarinėmis funkcijomis ir dialektikos principais modernizuotos grupių teorijos, pavadintos Lenskio grupių „lokaliniais daugiapoliariais formaliais modeliais“ (arba trumpai – „lokomis“, o visos kartu - „daugiapoliarumo paradigma“) adekvatumus fizikinės chemijos užduotims.

Konkrečiai, cheminių elementų atomų funkcijoms modeliuoti ir fenomenams paaiškinti, ypač nepaaiškintiems kitų paradigmu pagrindais. Taikyti teorinis modeliavimas ir lyginamoji analizė. Svarbiausi gauti rezultatai - matematiniai modeliai ir funkcijų paaiškinimai – hipotezės cheminių elementų atomams:

- elektronų konfigūracijos energijos polygių s, p, d, f, ... orbitalių ir elektronų skaičių, priežastingumo;
- elektronų spinų mechanikos ir logikos;
- branduolių nuklonų magiškujų skaičių eilių matematinės logikos.

Tarp rezultatų – išvados, kad konkretūs daugiapoliarumo modeliai yra besivystantys dialektiniais principais nuo paprasčiausių vis sudėtingyn. Kai paprastesnieji pagal dėsnius tolesniu vystymusi sprendžia dialektinius prieštaravimus. Ir sukuria naujas, dar nebuvusias kokybes. Tradicinės paradigmos tai vadina „emerdžentiškumu“, „sinergija“ ir net „dvasia“ bei „siela“. Su kiekybių šuoliškais perėjimais į naujas kokybes - virsmas. Modeliai talpūs specifinėmis kokybinėmis-kiekybinėmis lokalių dėsnių funkcijomis. Bet ne visų galimų atvejų vienu metu, o kiekvienam konkrečiam atskiram atvejui – tik viskas savo ribotai konkrečiau. Yra svarbūs skirtumai tarp taip vadinamų „nelyginių“ ir „lyginių“ pagal poliarumų skaičių erdvių-lokų kokybių savybių ir dėsnių. Tai gerai dera su tradicinio modelio nelokalumo susietumo fenomenais ir Pauli draudimo bei kitais kvantiniais reiškiniais, pvz., smulkiosiomis sandaromis. Skirtingus atskirai lokalius daugiapoliarius modelius jungia į paradigmą vieningi principai ir dialektiniai perėjimai.

Padėka. Konsultavo daugiapoliarumo autorius Vasilij Lenskij. Iliustracijas atliko dizaineris Artūras Jazavita.

Paviršiuje imobilizuotų membranų sąveikos su α -hemolizinu dinamikos tyrimas greitosios Furjė transformacijos elektrocheminio impedanso spektroskopijos metodu

Gerda Žižiūnaitė¹, Gintaras Valinčius², Aušra Valiūnienė¹, Inga Gabriūnaitė¹

¹Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas

²Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas

Biologinės ląstelės membrana sudaryta daugiausia iš lipidų, cholesterolio ir baltymų. Vienos svarbiausių jos funkcijų - ląstelės apsauga bei molekulių ar jonų pernašos iš ir į ląstelę reguliavimas. Kadangi tirti ląstelės membranas *in vivo* sudėtinga, buvo sukurtos modelinės ląstelės membraną imituojančios sistemos. Vienas tokios sistemos pavyzdžių – ant laidaus ar puslaidininkio paviršiaus per molekulinis inkarus imobilizuotas lipidų dvisluoksnis. Molekuliniai inkarai suteikia lipidiniam dvisluoksniui fluidiškumo bei leidžia susidaryti 1-2 nm storio pomembraniniam rezervuarui, imituojančiam ląstelės citoplazmą. Laidus substratas leidžia tirti tokią sistemą įvairias, tuo tarpu ir elektrocheminiais, metodais. Šie modeliai gali būti naudojami kaip biologiniai jutikliai toksinams, kurie membranose sudaro poras, pavyzdžiui α -hemoliziniui (α HL), nustatyti.

Šiame darbe buvo sukurtas ląstelės membranos modelis ant stiklinės plokštelės, padengtos fluoru legiruoto alavo oksido (FTO) sluoksniu. Substarto silanizavimui buvo naudotas ekvimoliarinis trichloro(3-(oktadeciltio)propil)silano (TOPS) ir alkiltrichlorosilano (ATS) mišinys. Ant silanizuoto paviršiaus vezikulių liejimo būdu buvo imobilizuotas fosfolipidinis dvisluoksnis. Tam naudotas daugiasluoksnių vezikulių tirpalas sudarytas iš 0,4 mM cholesterolio ir 0,6 mM DOPC. Kinetiniai fosfolipidinio dvisluoksni formavimosi matavimai bei suformuotos sistemos veikimo poras formuojančiu toksinu α HL tyrimai atlikti naudojant greitosios Furjė transformacijos elektrocheminio impedanso spektroskopiją (FFT-EIS). Ši technika leidžia pamatuoti elektrocheminio impedanso spektrą per keletą sekundžių, tad leidžia tirti labai greitus pasikeitimus sistemoje.

Šio tyrimo metu, fosfolipidinis dvisluoksnis buvo suformuotas per ~30 min, nepriklausomai nuo skirtingų sistemos savybių, tokių kaip fosfolipidinio dvisluoksni ar savitvarkio monosluoksni elektrinės talpos ar defektiškumas. Tokioms sistemoms būdingo minimumo Bode koordinatėse kitimo laike trajektorija ($\arg Z_{\min}(\log f_{\min})$) leido įvertinti fosfolipidinio dvisluoksni formavimosi procesą kaip prasidedantį mažu kiekiu fosfolipidinio dvisluoksni „salų“, kurios plečiasi membranai formuojantis. EIS pokyčiai, kuriuos sukelia α HL pažaida taip pat pastebimi jau per pirmąją minutę. Darbas atskleidė, kad α HL poveikio kinetika skirtingose sistemose skiriasi, o tam, tikėtina, didelę įtaką daro substrato, savitvarkio monosluoksni ir suformuoto fosfolipidinio dvisluoksni heterogeniškumas.

Naudojant FFT-EIS taip pat buvo įvertintas α HL polinkis sudaryti klasterius: Tiek elektrocheminio impedanso Bode koordinatėse pastebėtas fazės minimumo kitimo trajektorija, tiek sistemos heterogeniškumui įvertinti naudoto ζ parametro, apibūdinančio minimumo pločio ir padėties koordinatėse sąryšį, leido daryti išvadą, kad α HL šioje sistemoje linkęs sudaryti klasterius.

Molekulių įspaudais modifikuoto polipirolo formavimas ir analizė

Greta Žvirzdinė¹, Raimonda Bogužaitė¹, Vilma Ratautaitė¹, Arūnas Ramanavičius^{1,2}

¹*Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanotechnologijų skyrius*

²*Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas*

Polipirolas yra vienas dažniausiai naudojamų elektrai laidžių polimerų įvairių jutiklių kūrime. Polipirolas, parinkus tinkamas sąlygas, pasižymi puikiu elektriniu laidumu, stabilumu bei biologiniu suderinamumu. Tačiau naudojant jį kaip molekulių įspaudais grįstų jutiklių pagrindą, gali kilti tokių iššūkių kaip per silpna adhezija ant elektrodo. Molekulių įspaudais modifikuoti polimerai (MIP) yra inovatyvios medžiagų struktūros, kurios leidžia atpažinti tikslines molekules, suformuojant šių molekulių įspaudus pasirinktame polimere (Ramanavicius et al., 2021).

Šio tyrimo tikslas yra elektrocheminis MIP formavimas polipirolo pagrindu, naudojant potencialų ciklus ant indžio-alavo oksidu dengto stiklo elektrodo. Naudojant skenuojančios elektroninės mikroskopijos bei pulsinės chronoamperometrijos su optine absorbcija metodus buvo įvertinta suformuoto MIP paviršiaus morfologija bei sluoksnio storio įtaka jo adhezijai ant elektrodo (Boguzaitė et al., 2023).

Literatūra

Ramanavicius, S., Jagminas, A., & Ramanavicius, A. (2021). Advances in molecularly imprinted polymers based affinity Sensors (Review). *Polymers*, 13(6), 974.

Boguzaitė, R., Pilvenyte, G., Ratautaitė, V., Brazys, E., Ramanaviciene, A., & Ramanavicius, A. (2023). Towards molecularly imprinted Polypyrrole-Based sensor for the detection of methylene blue. *Chemosensors*, 11(11), 549.



eISSN: 3030-0312
© Vilnius universitetas