



CHEMIJA IR GEOMOKSLAI

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

**Konferencija skirta pažymėti geologijos
profesoriaus Juozo Paškevičiaus
100-ąsias gimimo metines**

2024

Konferenciją remia



Vandens harmonija

Organizacinis komitetas: prof. A. Kareiva, doc. L. Mikoliūnaitė, prof. E. Rimkus, doc. Ž. Stankevičiūtė, prof. P. Šinkūnas

Konferencija vyko 2024 metų kovo 22 dieną VU Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institute (Naugarduko 24, Vilnius)

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

eISSN: 3030-0312

© Vilniaus universitetas

Konferencijos programa

08:00 - 09:00 Dalyvių registracija, stendinių pranešimų kabinimas (*Kazio Daukšo auditorija*)

I SESIJA

SESIJOS PIRMININKAS PROF. EGIDIJUS RIMKUS
(*Neorganinės chemijos auditorija*)

09:00 - 09:10 Konferencijos atidarymas. Sveikina fakulteto dekanas **prof. Aivaras Kareiva**
09:10 - 09:40 **Dr. Eugenija Rudnickaitė, Antanas Marcinonis** „*Profesorius Juozas Paškevičius – pedagogas, mokslininkas, asmenybė*“
09:40 - 10:05 **Prof. Edvinas Orentas** „*Mechaninis ryšys: nuo molekulių iki mašinų*“
10:05 - 10:30 **Prof. Andrej Spiridonov** „*Evoliucijai suprasti reikia erdvės ir ilgos atminties*“
10:30 - 11:15 Kavos pertrauka ir stendinių pranešimų sesija

II SESIJA

SESIJOS PIRMININKĖ DOC. LINA MIKOLIŪNAITĖ

11:15 - 11:35 **Dr. Inga Gabriūnaitė** „*Dvisluoksnių fosfolipidinių membranų formavimas ant metalų oksidų paviršių ir jų pritaikymas biologinių jutiklių kūrimui*“
11:35 - 11:55 **Prof. Donatas Pupienis** „*Ar ateityje dėl klimato kaitos, kylančio jūros lygio ir žmogaus veiklos galėsime mėgautis Baltijos jūros smėlėtais krantais?*“
11:55 - 12:15 **Doc. Anton Popov** „*Aukso nanodalelės: nuo vitražinio stiklo iki galimo vėžio gydymo*“
12:15 - 12:35 **Doc. Gintaras Žaržojus** „*Aeracijos zonos gruntų inžinerinių geologinių sąlygų tyrimo ypatumai*“
12:35 - 12:55 **Doc. Justina Gaidukevič** „*Anglies alotropinių atmainų įvairovė ir jų panaudojimas*“

III SESIJA

SESIJOS PIRMININKĖ DOC. ŽVILĖ STANKEVIČIŪTĖ

14:30 - 14:50 **Dr. Greta Merkininkaitė** „*Neorganinių 3D darinių formavimo šviesa technologijos ir tendencijos*“
14:50 - 15:10 **Doc. Ieva Misiūnė, Doc. Ričardas Skorupskas** „*Miestų žalinimo probleminiai klausimai ir jų sprendimo būdai klimato kaitos kontekste*“
15:10 - 15:30 **Dokt. Marijus Jurkūnas** „*Fosforilcholino šepetiniai kopolimerai: sintezė ir taikymas*“
15:30 - 15:50 **Doc. Linas Bevainis** „*Eolinio kraštovaizdžio transformacijos: stebėsena ir analizė*“
15:50 - 16:10 **Doc. Denis Sokol** „*Medienos technologijų pažanga: medienos modifikavimo metodų, skirtų tvariai statybai ir naujoviškiems pritaikymams, tyrinėjimas*“
16:10 - 16:40 Apdovanojimai ir konferencijos uždarymas
Konferencijos rezultatų aptarimas

TURINYS

Pratarmė	8
Profesoriaus Juozo Paškevičiaus pagrindiniai gyvenimo kelio laiptai	9
ŽODINIAI PRANEŠIMAI	
Rudnickaite E., Marcinonis A. Profesorius Juozas Paškevičius – pedagogas, mokslininkas, asmenybė	12
Orentas E. Mechaninis ryšys: nuo molekulių iki mašinų	13
Spiridonov A. Evoliucijai suprasti reikia erdvės ir ilgos atminties	14
Gabriūnaitė I., Aleksandrovič A., Žižiūnaitė G., Sabirovas T., Valiūnienė A. Dvisluoksnių fosfolipidinių membranų formavimas ant metalų oksidų paviršių ir jų pritaikymas biologinių jutiklių kūrimui	15
Pupienis D. Ar ateityje dėl klimato kaitos, kylančio jūros lygio ir žmogaus veiklos galėsime mėgautis Baltijos jūros smėlėtais krantais?	16
Popov A., Brasiūnas B., Kaušaitė-Minkštienė A., Ramanavičienė A. Aukso nanodalelės: nuo vitražinio stiklo iki galimo vėžio gydymo	17
Žaržojus G., Samalavičius V., Lekstutytė I., Gribulis D. Aeracijos zonos gruntu inžinerinių geologinių sąlygų tyrimo ypatumai	18
Gaidukevič J., Aukštakojytė R., Pauliukaitė R. Anglies alotropinių atmainų įvairovė ir jų panaudojimas	19
Merkininkaitė G., Aleksandravičius E., Gailevičius D., Malinauskas M., Šakirzanovas S. Neorganinių 3D darinių formavimo šviesa technologijos ir tendencijos	20
Misiūnė I., Skorupskas R. Miestų žalinimo probleminiai klausimai ir jų sprendimo būdai klimato kaitos kontekste	21
Jurkūnas M., Talaikis M., Klimkevičius V., Pudžaitis V., Niaura G., Makuška R. Fosforilcholino šepetiniai kopolimerai: sintezė ir taikymas	22
Bevainis L., Česnulevičius A., Bautrėnas A., Ovodas D., Mačiulevičiūtė–Turlienė N., Šutinienė L., Svilienė R. Eolinio kraštovaizdžio transformacijos: stebėsena ir analizė	23
Sokol D. Medienos technologijų pažanga: medienos modifikavimo metodų, skirtų tvariai statybai ir naujoviškiems pritaikymams, tyrinėjimas	24
STENDINIAI PRANEŠIMAI	
1. Grigelis A. Profesorius Juozas Paškevičius – Lietuvos geologijos korifėjus	26
2. Rudnickaite E. "Foto reportažas": iš profesoriaus Juozo Paškevičiaus gyvenimo	27
3. Rudnickaite E. Svarbiausi profesoriaus Juozo Paškevičiaus publikuoti darbai	28
4. Adomaitė G., Valiūnienė A. Formation of Prussian Blue thin coat - based biosensors	29
5. Aleksaitytė G., Pocienė O., Šlinkšienė R. Azoto, fosforo ir kalio koncentracijos kitimas biriuose organiniuose tręšiamuosiuose produktuose	30
6. Aukštakojytė R., Pauliukaitė R., Gaidukevič J. Selective Electrochemical Detection of Dopamine Using Nitrogen-Modified Reduced Graphene Oxide	31

7. Bagamulskytė I., Paleckienė R. <i>Skystosios trąšos su huminėmis medžiagomis, gautomis iš durpių</i>	32
8. Bajarūnaitė R., Popov A., Talaikis M., Niaura G., Ramanavičienė A., Ramanavičius S. <i>MXenų pritaikymas kolorimetriniam sidabro jonų nustatymui</i>	33
9. Bekeraitė S., Juchnevičiūtė I., Spiridonov A. <i>Pleistoceno žinduolių bendrijų sąranga: Bajeso tinklų analizė</i>	34
10. Bendžiūtė S., Grigoravičiūtė I., Katelnikovas A., Žarkov A. <i>Eu jonais legiruoto stroncio chlorapatito sintezė bei optinės savybės</i>	35
11. Bernatavičiūtė I., Gruškienė R., Celitan E., Kavleiskaja T., Sereikaitė J. <i>Vandenyje tirpūs beta-karoteno kompleksai: sintezės sąlygų optimizavimas</i>	36
12. Budžytė G. E., Raišeliene R., Grigoravičiūtė I., Kareiva A., Žarkov A. <i>Magnio vitlokito sintezės iš amorfinio kalcio fosfato parametų optimizavimas</i>	37
13. Burbulytė A., Uogintė I. <i>Investigation of microplastic sorption parameters and removal efficiency using lignin nanomaterials</i>	38
14. Čekytė A., Slaboševičiūtė G., Ramanauskaitė A., Lapinskaitė V., Urbonavičius J., Tauraitė D. <i>Metilintų heterociklinių bazių sintezė ir jų metabolizmo tyrimai</i>	39
15. Dankina D., Šečkus J. <i>Ankstyvojo devono naujos kaulinių žuvų genties radimas Sibiro platformoje (Rusijoje)</i>	40
16. Dzvinka M., Misevičius M. <i>Analysis of Undoped and Europium-Doped Barium Borate</i>	41
17. Ežerskytė E., Vrubliauskaitė V., Katelnikovas A., Klimkevičius V. <i>Daugiaspalvė NaGdF₄:Tb³⁺,Eu³⁺ nanodalelių liuminescencija</i>	42
18. Fahim M. A. S., Sužiedelytė Visockienė J. <i>Air Quality and Environmental Health: Evaluating Pollution Sources and Mitigation Strategies</i>	43
19. Gaidamavičienė G., Žalga A. <i>Lanthanum content effect on the crystalline composition for the La₂Mo₂O₉ system</i>	44
20. Griškonytė G., Brukštus A., Žutautė I. <i>Tikslinių 6-(5-aril-1,2,3-tiadiazol-4-il)-(4-benzil)benzen-1,3-diolių sintezė Hsp90 slopiklių paieškai</i>	45
21. Gruškienė R., Pachaleva J., Bočkovienė A., Kavleiskaja T., Sereikaitė J. <i>Skirtingą paviršiaus krūvį turinčių nizinu kapsuliuotų dalelių tyrimas</i>	46
22. Inkrataitė G., Keil J., Jüstel T., Skaudžius R. <i>Synthesis and Investigations of Boron and Cerium Doped Lutetium and Gadolinium Aluminum Garnets</i>	47
23. Janušauskaitė G., Misevičius M. <i>Na_{1-x}AlGe_{1-0,5x}O₄, x= Bi³⁺, Ce³⁺, Dy³⁺, Eu³⁺, Pr³⁺, Sm³⁺, Tb³⁺ legiruotų mėginių liuminescencijos tyrimas</i>	48
24. Januškevičius J., Stankevičiūtė Ž., Kareiva A. <i>Aqueous sol-gel synthesis and XRD investigation of lanthanide orthoferrite series</i>	49
25. Kapilovaitė J., Daugvila D. <i>Tranzitinės klimato kaitos rizikos</i>	50
26. Kasputė G., Prentice U. <i>Essential oil chemistry from the geological standpoint: influence of the biological effect</i>	51
27. Klimavičius L., Rimkus E. <i>Kompleksiniai klimato įvykiai rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje 1950–2022 metais</i>	52
28. Klusytė S. <i>Cartographic reconstruction of administrative boundaries for the Catholic Church</i>	53
29. Kuzborskaja K., Jančaitienė K. <i>Skystos kompleksinės trąšos ir pagrindinės jų savybės</i>	54

30. Kvietkauskas E., Budrienė S. <i>Poliesterinių plėvelių gavimas, tyrimas ir taikymas audinių inžinerijai</i>	55
31. Laurinavičius G., Poškus V. <i>Porosity of the silica synthesized using different silica precursors</i>	56
32. Lažaunikas R., Gribulis D., Gadeikis S., Samalavičius V. <i>Moreninių smulkių gruntų dinaminė savybių nustatymas geofiziniais metodais</i>	57
33. Levachou Y., Stonevičius E. <i>Lake Macrophytes Abundance and Reflectance Relationship</i>	58
34. Levinas R. Viter R., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>Investigating Photogenerated Charge Carrier Lifetimes by Open Circuit Voltage Decay and Intensity Modulated Photovoltage Spectroscopy</i>	59
35. Lisyte V., Ramanaviciene A., Popov A. <i>Multicolor Colorimetric Method for Cyanide Detection</i>	60
36. Lugauskas E., Karoblis D., Kareiva A. <i>Synthesis and characterization of LnMnO₃ (Ln = Sm, Gd, Nd, Tb, Eu) nanoparticles</i>	61
37. Mačytė J., Licaj L., Guirgis G., Šablinskas V. <i>Conformational analysis of Cyclopropyl, Chloromethyldifluorosilane by Vibrational Spectroscopy</i>	62
38. Mačiulaitis J., Veteikis D. <i>Miesto-kaimo-gamtos gradiento erdvinė analizė Europoje palydoviniais žemės dangos duomenimis</i>	63
39. Martinkutė-Baranauskienė G., Šinkūnas P. <i>FT-IR ir FT-RS spektrometrija gintaro ir kitų iškastinių dervų nustatymui</i>	64
40. Metrikaitytė Gudelė G., Sužiedelytė Visockienė J. <i>SAR Data Analysis for Permanent Grasslands Monitoring</i>	65
41. Milerytė U., Bukšnaitienė R., Žutautė I. <i>2-alkinilbenzoilo darinių sintezės kelių paieška</i>	66
42. Pakalniškis A., Zákutná D., Gerina M., Skaudžius R., Kareiva A. <i>Release of Remnant Magnetization in BiFeO₃ by Means of Rhenium Doping</i>	67
43. Paškevičiūtė M., Šinkūnas P. <i>Fliuvioglacialinių nuogulų sedimentacijos Rimučių ir Alekniškių telkiniuose analizė remiantis granulometrija, tekstūra ir sandara</i>	68
44. Paukštys J., Paškevičius T., Lapinskaitė R., Urbelienė N., Labanauskas L., Meškys R. <i>Di-tert-alkyl phosphine synthesis and investigation of chemoenzymatic synthesis of their precursors – tertiary acetates</i>	69
45. Paulauskaitė M., Žutautė I. <i>Tikslinių kondensuotų tioimidazolų sintezė</i>	70
46. Paulikaite G., Talaikis M., Popov A., Ramanavicius S., Niaura G. <i>Organinių dažų pašalinimas panaudojant Mxeny nanostruktūras: pH įtaka ir kinetinis tyrimas</i>	71
47. Pažerauskaitė P., Katelnikovas A., Žarkov A. <i>Europio jonais legiruoto Ca₂PO₄Cl sintezė bei optinių savybių tyrimas</i>	72
48. Petrulevičius J., Yang Y., Liu C., Steponaitis M., Kamarauskas E., Daškevičienė M., Bati A. S. R., Malinauskas T., Jankauskas V., Rakštys K., Kanatzidis M. G., Sargent E. H., Getautis V. <i>Teigiamų krūvininkų parneša pasižymintys trifeniletano dariniai ir jų panaudojimas perovskitiniuose saulės elementuose</i>	73
49. Petrulionienė T., Murauskas T. <i>Determination of potential migrants in food-contact polyethylene</i>	74
50. Pleskytė S., Uogintė I., Byčenkienė S. <i>Time-dependent photodegradation of low-density polyethylene microplastic particles using TiO₂ nanoparticles</i>	75

51. Plyčiuraitytė Plyčiūtė M., Dankina D., Spiridonov A. <i>Late Silurian fish fossils from western Lithuania</i>	76
52. Potapov E., Pastarnokienė L., Kochanė T., Makuška R. <i>Savaime džiūstančių aliejų mikrokapsulės</i>	77
53. Radzevičius N., Orentas E. <i>Design and synthesis of molecular building blocks for modular supramolecular cavitands</i>	78
54. Raišeliienė R., Linkaitė G., Žarkov A., Kareiva A., Grigoravičiūtė I. <i>Aplinkai draugiška didelio kiekio magnio vitlokito mieltelių sintezė</i>	79
55. Reikertas A., Mačiulevičiūtė–Turlienė N. <i>Ar Lietuva kapinių kraštas?</i>	80
56. Rimkutė G., Niaura G., Pauliukaitė R., Gaidukevič J. <i>Structural and electrochemical study of graphene-polypyrrole nanocomposites</i>	81
57. Sarka K. <i>Beyond the integrated mass-independent isotopic fractionation</i>	82
58. Sergejevaitė G., Valčekas D., Orentas E. <i>Synthesis of monofunctionalized hexa-peri-hexabenzocoronene</i>	84
59. Sinkevičiūtė J., Balčiūnas A., Vaitkevičius V. <i>LiDAR duomenų taikymas partizaninių kovų paveldo objektų Lietuvoje tyrimams</i>	85
60. Sirgėdaitė G., Mikoliūnaitė L. <i>Nanostruktūros sustiprinto Ramano spektroskopijos tyrimams</i>	86
61. Skuodaitė E., Krylova V. <i>SILAR synthesis and XRD characterization of Ag₂S layers on PET/PVC construction textile</i>	87
62. Sobol K., Brasiūnas B., Ramanavičienė A. <i>Elektrocheminio imuninio jutiklio skirto antikūnų prieš SARS-CoV-2 spyglio baltymą nustatymui kūrimas</i>	88
63. Stadulis J., Pazylbek S., Katelnikovas A., Žarkov A. <i>Cr³⁺ jonais legiruoto Ca₃(PO₄)₂ sintezė ir optinių savybių tyrimai</i>	89
64. Stonevičius E., Soldevilla C. G., Oteros J. A., Šaulienė I., Šukienė L. <i>Olea europaea žiedadulkių sezono vertinimas naudojant palydovų duomenis</i>	90
65. Stanaitis R., Stonevičius E. <i>Landsat-8 palydovo duomenų analizė mašininio mokymosi metodais Lietuvos ežerų vandens paviršiaus temperatūros tyrimams</i>	91
66. Stonkus T., Uogintė I., Byčėnienė S. <i>Microplastic Particles Distribution in Lithuanian Rivers and Their Chemical and Physical Properties</i>	92
67. Šapauskienė M., Kuksa A., Šemis A., Lisytė V., Ramanavičienė A., Popov A. <i>Enhancing Glucose Detection Through the Application of Gold Nanorods</i>	93
68. Šiožinys V., Petraitytė G., Masevičius V. <i>Homoserino darinių sintezės iš metionino tyrimas. Amin rūgšties fragmento apsauga suformuojant diketopiperaziną</i>	94
69. Škarnulytė D., Petrulevičienė M., Juodkazytė J., Pilipavičius J., Vilčiauskas L. <i>Investigation of Na₂SO₃ as Reducing Agent in Aqueous Sodium Ion Batteries</i>	95
70. Tamašauskas R., Grendaitė D. <i>Vandens lygio vertinimas upėse naudojant palydovinius Copernicus duomenis</i>	96
71. Trioška E., Viliūnas M., Merkininkaitė G., Šakirzanovas S. <i>The effect of monoatomic oxygen on carbon-sputtered quartz crystals</i>	97
72. Ūsaitė A., Gedminienė L. <i>Durpių susiskaidymo įtaka nuosėdų litologijai ir geocheminei sudėčiai</i>	98
73. Valeckytė G., Sukackienė Z., Vaičiūnienė J., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>Nikelio molibdeno katalizatoriai vandenilio generavimui</i>	99

74. Valentukevičius P. D., Šakirzanovas S. <i>Mechanocheminė perovskito CsPbBr₃ nanodalelių sintezė</i>	100
75. Virkėtis R., Merkininkaitė G., Klimkevičius V., Šakirzanovas S. <i>3D boro karbido objektų gamyba naudojant stereolitografiją ir pirolizę</i>	101
76. Vištorskaja D., Gaidukevič J., Katelnikovas A., Kareiva A. <i>Naujų liuminoforų sintezė zolių-gelių metodu ir jų apibūdinimas</i>	102
77. Volbikas K., Paškevičius T., Lapinskaitė R., Urbalienė N., Labanauskas L., Meškys R. <i>Funkcionalizuotų m-terfenilų sintezė, modifikacija ir chemofermentinis ašinių enantiomerų atskyrimas</i>	103
78. Zambžickaitė G., Mikoliūnaitė L. <i>Geležies oksido nanodalelių sintezė ir jų dekoravimas sidabro nanodalelėmis</i>	104



Pratarmė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakultetas pirmą kartą rengia nacionalinę mokslinę konferenciją "Chemija ir geomokslai 2024". Šio užmanymo tikslas yra dvejopas. Du institutai – Chemijos ir Geomokslų – yra viename fakultete, bet taip mažai žinome vieni apie kitus, apie vykdomus mokslinius tyrimus abiejuose institute. Taigi, ši konferencija yra skirta pristatyti naujausius mokslinius tyrimus, vykdomus Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos ir Geomokslų institute. Antrasis konferencijos tikslas yra ne mažiau svarbus, o gal ir svarbesnis. Norime prisiminti ir pagerbti žymaus lietuvių geologo profesoriaus Juozo Paškevičiaus atminimą. Prieš metus dar visi šventėme profesoriaus 99-ąjį gimtadienį...Be atminties nebūna ateities. Šią konferenciją dedikuojame garsaus geologijos profesoriaus Juozo Paškevičiaus 100-osioms gimimo metinėms.

Labai tikiuosi, kad renginys bus įdomus, nes užsiregistravo didelis kiekis dalyvių ne tik iš mūsų fakulteto. Neabejoju, kad konferencija bus tęstinė, kasmetinė, vienijanti ne tik chemikus su geomokslų atstovais. Viliuosi, kad prisijungs fizikai, biologai, medžiagotyrininkai, mokslo istorikai, sociologai ir humanitarai. Ir nepamiršime mūsų praeities.

Prof. Aivaras Kareiva
VU Chemijos ir geomokslų fakulteto dekanas

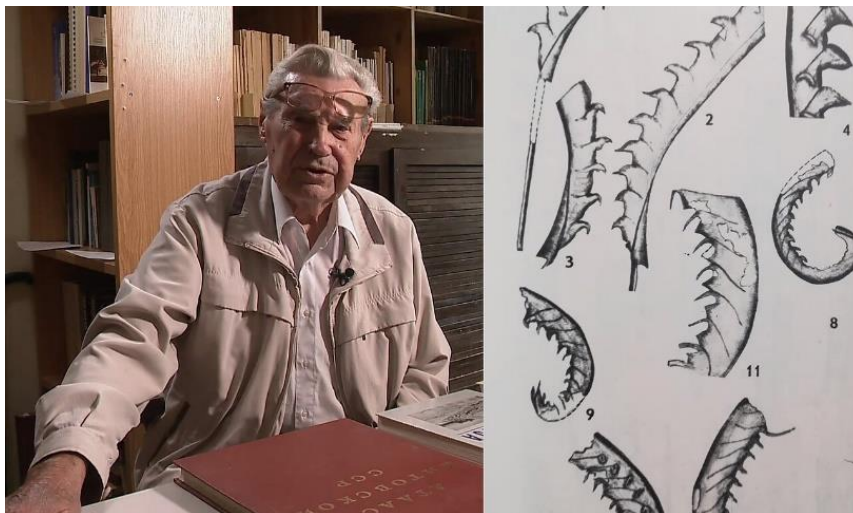
Profesoriaus Juozo Paškevičiaus pagrindiniai gyvenimo kelio laiptai

Gimė 1924 m. kovo 19 d. Dabužėlių kaime, Anykščių rajone (pagal prieškarinę administraciją Dabužėlių k. Kavarsko valsč., Ukmergės apskr.). 1934 m. baigė Dabužių pradžios mokyklą, 1943 m. – Veprių žemės ūkio mokyklą, 1943–1944 m. mokėsi Vilniaus vidurinėje sodininkystės mokykloje, baigė pirmąjį kursą (sutrūkdė karas), vėliau Vilniaus suaugusių gimnazijoje.

1944–1945 m. dirbo Musninkų valsčiaus agronomu. 1947 m. baigė Vilniaus žemės ūkio technikumą ir įgijo jaunesniojo agronomo, sodininko-daržininko kvalifikaciją.

1947–1948 m. dirbo sodininku Vilniaus apželdinimo trešte. 1947 m. įstojo į Vilniaus pedagoginio instituto Gamtos-geografijos fakultetą, baigė pirmąjį kursą.

1948 m. perėjo į Vilniaus universiteto Geologijos skyrių, kurį baigė 1952 m. Jam buvo pripažinta diplomuoto geologo kvalifikacija. 1952–1953 m. įsidarbino Lietuvos mokslų akademijos Geologijos ir geografijos instituto jaunesniuju moksliniu bendradarbiu ir Vilniaus universiteto Mineralogijos katedroje skaitė paskaitas valandiniu atlyginimu.



Profesorius Juozas Paškevičius (1924-2023)

P E D A G O G A S

1953 m. perėjo darbui į Vilniaus universiteto Geologijos katedrą vyresniuju dėstytoju, nuo 1963 m. docentas, nuo 1975 m. – profesorius. 1973–1990 metais vadovavo Geologijos ir mineralogijos katedrai, o 1990–1994 metais universiteto toje pačioje katedroje dirbo profesoriumi. 1994 m. jam buvo paskirta Vilniaus universiteto profesoriaus habilituoto daktaro rentą.

Vilniaus universitete 1952–2004 metais parengė ir dėstė 20 geologijos disciplinų, išleido du vadovėlius ir dvi mokymo programas, vadovavo 40 studentų diplominių darbų, buvo 21 disertacinio darbo, oponento ir disertacijų gynimo komiteto pirmininko arba jo nario pareigose,

Vadovavo 49 studentų mokslo darbams, kuriuos vykdė 79 studentai, parengtus darbus skaitė mokslinėse konferencijose,

13-je mokslo tarybų, komisijų ir draugijų darbe, su kitais universiteto geologais parengė ir išleido į gyvenimą daugiau kaip 1100 diplomuotų geologų.

M O K S L I N I N K A S

1958 m. apgynė geologijos ir mineralogijos mokslų kandidato (dabar daktaro) disertaciją „Pietų Pabaltijo ordoviko-silūro uolienų stratigrafija ir fauna“,

o 1973 m. – geologijos ir mineralogijos daktaro (dabar habilituoto daktaro) disertaciją „Pietų Pabaltijo ordoviko ir silūro biostratigrafija ir graptolitai“ tuo įgydamas daktaro ir habilituoto daktaro mokslinius laipsnius.

Tyrimų kryptys – paleontologija, stratigrafija, geologijos mokslų istorija, regioninė geologija.

Dalyvavo 10-je tarptautinių ir respublikinių geologinių ekspedicijų po Europą ir Aziją, ištyrė daugiau kaip 150 Lietuvos ir kaimyninių kraštų giliųjų gręžinių kerną, ordoviko ir silūro brachiopodų, graptolitų, trilobitų ir kitų gyvūnijos grupių genčių, rūšių ir porūšių fosilinę fauną, iš jų daugiau kaip 120 buvo paleontologiškai aprašytos, dalis iš jų yra naujos, paleontologijos mokslui iki tol buvo nežinomos.

Tuo remiantis sudarė naujas silūro ir ordoviko stratigrafines schemas, graptolitų zonines stratigrafines skales, kuriomis naudojasi Lietuvos gamybinės ir mokslinės organizacijos.

Sudarė Baltijos silūro baseino ekostratigrafinį modelį, geologinius, facijų, paleogeografinius ir struktūrinius žemėlapius, atrado Vidurio Lietuvos (ordoviko) ir Lietuvos (silūro) palaidotus tektoninius įlinkius, paskelbė 38 monografijas, knygas, atlasus.

Buvo Vilniaus universiteto geologijos specializuotos tarybos moksliniams laipsniams teikti pirmininkas (1975-1980), Lietuvos žurnalo „Geologija“ įkūrėjas ir vyriausiasis redaktorius išleido 36-erius jo numerius (1980–2002), vėliau vyr. redaktoriaus pavaduotojas ir vėliau redakcinės kolegijos narys. Taip pat yra Lietuvos geologų sąjungos garbės narys. Apdovanotas pasižymėjimo ženklu „Auksinis geologo plaktukas“ (2020).

Apdovanotas Garbės ženklo ordinu (1976), jam buvo paskirta Lietuvos valstybinė mokslo premija (1983) ir Lietuvos nacionalinė mokslo premija (1996), Juozo Dalinkevičiaus vardinė premija (1997), jis buvo pažymėtas Lietuvos SSR Aukštojo ir specialiojo vidurinio mokslo ministro ir Vilniaus universiteto Rektoriaus trylika garbės raštų (1978-2004) už vaisingą pedagoginį ir mokslinį darbą ir aktyvią visuomeninę veiklą, už gerą vadovavimą moksliniams darbams, už Geologijos muziejaus atkūrimą Vilniaus universitete.

2022 m. Teodoro Grotuso medaliu už geologijos ir paleontologijos mokslų plėtrą.

2023 m. už nuopelnus mokslui ir kultūrai bei ilgametį pedagoginį darbą apdovanotas pirmuoju didžiojo mineralogo ir švietėjo Ignoto Domeikos atminimo medaliu.

A S M E N Y B Ė

Akademikas Benediktas Juodka, sveikindamas Profesorijų pabrėžė, kad universiteto akademinę aurą, kuri iki šiol tebeplevena auditorijose, kūrė tokios išskirtinės asmenybės, koks yra Juozas Paškevičius. Įgimta Profesoriaus inteligencija, padorumas, atsidavimas profesijai buvo ir vis dar yra pavyzdžiu ištisoms jaunųjų geologų kartoms...

O geologų bendruomenė sako – jis buvo ir liks mūsų **MOKYTOJAS**.

dr. Eugenija Rudnickaitė

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

Profesoriaus Juozo Paškevičiaus – pedagogas, mokslininkas, asmenybė

Eugenija Rudnickaitė¹, Antanas Marcinonis²

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų instituto Geologijos muziejus*

²*UAB Grota*

Profesoriaus, habilituotas geologijos mokslų daktaras Juozas Paškevičiaus kaip pedagogas ir mokslininkas formavosi, tobulėjo Vilniaus universiteto mokslininkų bendruomenėje. Jam dėstė profesorius Mykolas Kaveckis, tuo metu dar docentas Juozas Dalinkevičius ir kiti senosios inteligentijos atstovai, turėję ne tik puikias dėstomų disciplinų žinias, bet ir atitinkamą išauklėjimą.

Pradėjęs dirbti Vilniaus universitete nuo 1952 metų rudens semestro dėstytoju valandininku, nuo 1953 metų jau dirbo pilnu etatu tuometinėje Geologijos katedroje. Nors dėstomų dalykų paskaitų valandų krūvis buvo didelis (per 42 pedagoginio darbo metus skaitė 20 skirtingų disciplinų, kartais turėdavo net 8 val. paskaitų ir laboratorinių darbų per dieną) 1958 metais apgynė geologijos ir mineralogijos mokslų kandidato (dabar daktaro) disertaciją „Pietų Pabaltijo ordoviko-silūro uolienų stratigrafija ir fauna“, o 1973 metais – geologijos ir mineralogijos daktaro (dabar habilituoto daktaro) disertaciją „Pietų Pabaltijo ordoviko ir silūro biostratigrafija ir graptolitai“ tuo įgydamas daktaro ir habilituoto daktaro mokslinius laipsnius.

Profesorius ne kartą yra sakęs ir rašęs, kad: „profesorius Juozas Dalinkevičius mano profesiniame gyvenime buvo lyg kelrodis, vadovas, bendradarbis, vyresnysis draugas, į kurio petį visada galėjai atsiremti“.

Taip pat apie profesorių Juozą Paškevičių atsiliepia jo buvę auklėtiniai. Jis palaikė ryšius su absolventais, visada dalyvaudavo kursų susitikimuose pažymint Universiteto baigimo apvalias sukaktis. Primindavo atsitikimus iš jų studijų laikų...

Lietuvos geologų bendruomenė vadino ir vadins jį savo Mokytoju, sėmėsi išminties ir patirties bendraudami su juo, galės ir toliau semtis iš jo parašytų mokslinių ar gyvenimiškos patirties kupinų knygų.

Mechaninis ryšys: nuo molekulių iki mašinų

Edvinas Orentas

Organinės chemijos katedra, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Mechaniniai ryšiai sudaromi ir suardomi visų mūsų kiekvieną dieną- užsidedant kuprinę, užsisegant saugos diržą automobilyje ar įsisegant auskarus. Šiuos buitinius pavyzdžius realizavus molekuliniam pasaulyje, atsiveria nauji būdai molekulių architektūrų kūrimui, nesudarant klasikinių cheminių ryšių dalyvaujant elektronams. Tokios, mechaniniu barjeru palaikomos molekulinės struktūros idealiai tinka kurti nanoįrenginius, kur molekulių dalių tarpusavio judėjimas generuoja funkcinį atsaką ar idealiu atveju, įgalina atlikti naudingą darbą. Mechaninio ryšio ištakos, pirmieji pavyzdžiai ir jų modernūs atitikmenys bei jų panaudojimas molekulinėje mašinerijoje bus trumpai aptarti paskaitoje.

Evoliucijai suprasti reikia erdvės ir ilgos atminties

Andrej Spiridonov

Chemijos ir geomokslų institutas, Vilniaus universitetas

Evoliucija yra daugialygis procesas, kuris vyksta tuo pat metu daugelyje erdvės ir laiko mastelių. Evoluicijuoti gali skirtingi biologiniai vienetai, kurie sudaro populiacijas, kurie pasižymi kintamumu ir kurie pasižymi paveldimumu. Tokiais vienetais gali būti ląstelės, kurių dauginimasis ir atranka vyksta minučių ir valandų laiko mastelyje, daugialąsčiai organizmai kurių evoliucijos trukmė varijuoja nuo dienų iki tūkstančių metų, o taip pat rūšys, kurios irgi yra istoriniai evoliuciniai individai, ir kurios atsiranda ir išnyksta laiko masteliuose nuo tūkstančių iki dešimčių milijonų metų. Evoliucijos tyrėjai suvokė, kad gali evoluicijuoti anksčiau išvardinti giminyse surišti kolektyvai, tačiau kur kas atviresnis ir sudėtingesnis klausimas yra – ar gali evoluicijuoti visos ekosistemos, sudarytos iš skirtingiausių, dažnai mažai giminingų rūšių? Ekosistemų ribos ne visad aiškios ir ne visad lengva suvokti jų veikimo mastelius ir dėl kokių priežasčių šie masteliai atsiranda. Dėl šios priežasties, ekosistemų evoliucija – sekantis žingsnis ekosistemų veikimo ir atsiradimo pažinime, buvo atidėliojamas ir nepasiekė žymaus progreso.

Šio pranešimo metu bus pristatyta nauja, taip vadinama Bretskio hierarchijos koncepcija, kuri paaiškina, koku būdu atsiranda ekosistemų individualumas. Esminis veiksnys apibrėžiantis biologinį individualumą yra barjerų buvimas. Barjerai atskiria priežastiniais ryšiais susijusias populiacijas. Tai gali būti ląstelių membranos, kurios neleidžia vykti atsitiktiniams genų mainams, taip pat tai gali būti rūšių reprodukcinės ribos palaikomos poravimosi atpažinimo sistemų (fiziologinių, morfologinių ir elgesio). Bet taip pat barjero vaidmenį gali atlikti ir įvairūs fiziniai geografiniai bruožai. Bretskio hierarchijos teorija numato, kad mažuose masteliuose ekosisteminiai vienetai, pvz., simbiozės tarp grybo ir dumblio (kerpė), arba žmogus ir jo vidinis mikrobiomas, integruojasi ir formuoja barjerus su kitomis panašaus mastelio sistemomis pasitelkiant biologines adaptacijas (grybas ir žmogus formuoja savo kūno ribas ontogenezės metu). Tokios sistemos vadinamos holobiontais. Tačiau, kai erdvės ir laiko masteliai didėja, biologinė daugelio skirtingų rūšių simbiozė tampa vis sudėtingesnė. Kartu pradeda didėti geografinių bruožų reikšmingumas. Kuo erdvės ir laiko masteliai tampa didesni, tuo svarbesnį vaidmenį pradeda vaidinti geografiniai bruožai formuojami geologinių procesų. Tokie biotos vienetai, kurių atskyrimas įvyksta dėl geologinių veiksmų, vadinami geobiomais. Jie yra biologiniai individai, kurie užima tam tikrą erdvę ir pasižymi evoliucine laiko trukme, kuri gali siekti milijonus metų. Geobiomų viduje vyksta kvazi-nepriklausoma nuo likusio pasaulio evoliucija ir vidinių vienetų integracija. Kuo didesni geobiomai, tuo ilgesnė ir gilesnė gali įvykti integracija. Tokiu būdu galime pamatyti, kad didžiausiuose masteliuose kertinį vaidmenį kontroliuojant koevoliucijos tempus turi geologinių procesų laiko ir erdvės masteliai. Dideliuose masteliuose biologija tampa fundamentaliai geologiška.

Dvisluoksnių fosfolipidinių membranų formavimas ant metalų oksidų paviršių ir jų pritaikymas biologinių jutiklių kūrimui

Inga Gabriūnaitė¹, Anastasija Aleksandrovič¹, Gerda Žižiūnaitė¹, Tomas Sabirovas², Aušra Valiūnienė¹

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

²Vilniaus universiteto Gyvybės mokslų centro Biochemijos institutas

Fosfolipidinės membranos yra kiekvienos ląstelės apsauginis barjeras. Ląstelėse ant šių membranų, paprastai, yra prikibę įvairiausių baltymų, polisacharidų, glikoproteinų. Dėl to tai yra puikus substratas imobilizuoti baltymus ir juos tirti. Fosfolipidinės membranos gali būti imobilizuojamos ant įvairiausių paviršių, tačiau šiame darbe yra iškeltas tikslas membranas formuoti ant elektrai laidžių metalų oksidinių paviršių. Tada šias membranas galima tyrinėti elektrocheminiais metodais, tokiais kaip elektrocheminio impedanso spektroskopija, ciklinė voltamperometrija.

Šiame darbe fosfolipidinės membranos prie paviršiaus buvo prikabinamos per savitvarkį monosluoksnį (SAM). Kadangi naudojami metalų oksidiniai paviršiai, SAM formavimui buvo pasirinkti trichlorosilanai, kurie sudaro stiprų kovalentinį ryšį su paviršiumi ir yra labai stabilūs. Membranos buvo formuojamos vezikulių liejimo metodu ir jas sudarė gyvoje ląstelėse dažniausiai aptinkamas lipidus 1,2-dioleoil-3-fosfogliceracholinas ir cholesterolis, kad stabilizuotų membranų struktūrą.

Suformuotos membranos buvo tiriamos imobilizuojant skirtingus baltymus - toksinus, tokius kaip α -hemolizinas (iš auksinio stafilokoko), melitinas (iš gyvačių nuodų) ar fosfolipazę A₂ (iš bičių nuodų). Šie toksinai ardo fosfolipidinę membraną, didindami defektų tankį joje. Tai galima lengvai stebėti elektrocheminio impedanso spektroskopijos metodu. Membranos pažeidimas priklauso nuo naudojamo toksino koncentracijos, todėl sukurtą sistemą galima pritaikyti kaip biologinį jutiklį skirtingų toksinų nustatymui.

Padėka. Šis tyrimas finansuotas Vilniaus universiteto Mokslo skatinimo fondo projekto MSF-JM-2/2022 lėšomis

Ar ateityje dėl klimato kaitos, kylančio jūros lygio ir žmogaus veiklos galėsime mėgautis Baltijos jūros smėlėtais krantais?

Donatas Pupienis

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Pietryčių Baltijos smėlėtų krantų juosta tęsiasi apie 1380 km nuo Svinouiscio (Lenkija) iki Pernu (Estija), iš kurių Lietuvai priklauso tik neilga (90,6 km) kranto atkarpa. Baltijos smėlėtų krantų raida priklauso nuo geologinės struktūros ir vietovės pobūdžio, sąnašų kiekio ir jų pernašos, klimato (ekstremalios audros), santykinio jūros lygio kaitos bei žmogaus veiklos (uostų rekonstrukcija ir plėtra, rekreacija, krantų tvirtinimas, sąnašų reguliavimas). Išskirtinio visuomenės dėmesio smėlėti krantai sulaukia po ekstremalių audrų, kai nukenčia infrastruktūra, o dėl pakilusio jūros lygio ir sustiprėjusių abraziųjų procesų būna nuardomos prieškopės.

Prognozuojama, kad klimato kaitos sukelti reiškiniai – ekstremalios audros dažnės ir stiprės, o iki 2100 m. Baltijos jūros lygis pakils apie 30-70 cm, be to žmogaus veikla (nešmenų pernašos procesų kontroliavimas) paspartins smėlėtų krantų eroziją. Tačiau prognozuoti ir įvertinti gamtinių ir antropogeninių veiksnių pokyčių įtaką krantams yra labai sunku, nes dažnai minėti veiksniai veikia kartu. Krantų erozijos prognozes apsunkina ir tai, kad dažnai neatsižvelgiama į galimą tendencijų pagreitėjimą, procesų erdvinį ir laiko kintamumą. Dažnai krantų erozija būna epizodinė arba pavėluota bei gali priklausyti nuo ankstesnių įvykių poveikio. Smėlėtų krantų raidos prognozes komplikuoja gamtinės sistemos neapibrėžtumas bei politinis ir ekonominis neapibrėžtumas susijęs su žmogaus veikla. Be to smėlėtų krantų raidos prognozes apsunkina ir tai, kad tarp antropogeninių ir gamtinių veiksnių egzistuoja grįžtamasis ryšys, kurio pasekmės dažnai būna nenusipėjamos bei išplintančios į gretimą kranto ruožus. Tai kelia visuomenės nerimą ir susirūpinimą, todėl natūraliai kyla klausimas ar ateityje galėsime mėgautis Baltijos jūros smėlėtais krantais.

Atsakymas priklauso nuo kiekvienos Pietryčių Baltijos regiono valstybės sprendimų priėmėjų pasirinktos krantotvarkos strategijos ir diegiamų krantotvarkinių priemonių. Kadangi intervencinis valdymas vis dažniau laikomas netvariu, todėl svarbu įgyvendinti tvarias pakrančių valdymo strategijas bei diegti krantotvarkines priemones, kurios remiasi gamta pagrįstais sprendimais. Lietuvoje laikomasi „nieko nedarymo“ arba „ribotos intervencijos“ krantotvarkos strategijos, be to Lietuvoje jau daugiau kaip 200 metų yra diegiamos gamta pagrįstais sprendimais taikomos krantotvarkinės priemonės. Minėtų strategijų ir krantotvarkinių priemonių pasirinkimas užtikrina, o ateityje tikėtina leis pajūrio lankytojams mėgautis smėlėtais krantais.

Aukso nanodalelės: nuo vitražinio stiklo iki galimo vėžio gydymo

Anton Popov, Benediktas Brasiūnas, Asta Kaušaitė-Minkštimienė, Almira Ramanavičienė

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

Spindintis aukso blizgesys žavėjo žmones nuo seniausių laikų. Tačiau pasitelkus chemiją ir išgaunant tokias mažas aukso daleles, kad jų matmenys tesiekia milijardines metro dalis (nanometrus), atsiveria visiškai naujas pasaulis. Pirmasis aukso nanodalelių panaudojimas glaudžiai susijęs su raudonos spalvos stiklu, kuris buvo gaminamas jau 1400-1300 m. pr. Kr. Egipte ir Mesopotamijoje. Pradedant nuo rubino stiklo gamybos, aukso nanodalelių taikymas išsiplėtė į mediciną ir ateityje gali tapti auksiniu vėžio gydymo standartu.

Aukso nanodalelės yra universali medžiaga, kurią galima naudoti įvairiose srityse. Taip yra todėl, kad jų elektroninės ir fizikinės savybės yra gerai ištirtos, o jų gamybos būdai yra gerai išvystyti. Jų paviršiaus savybės taip pat lengva keisti. Dėl šių savybių aukso nanodalelės yra viena iš dažniausiai tyrimuose naudojamų nanomedžiagų klasė ir jau rado savo pritaikymą medicinoje. Pavyzdžiui, aukso nanodalelės yra naudojamos gaminant greituosius SARS-CoV2 antigeno testus. Šiame darbe bus apžvelgta aukso nanodalelių istorija bei pristatyti skirtingi jų panaudojimo variantai.

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

Aeracijos zonos gruntų inžinerinių geologinių sąlygų tyrimo ypatumai

Gintaras Žaržojus, Vytautas Samalavičius, Ieva Lekstutytė, Domas Gribulis

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Klasikinėje gruntų mechanikoje fizinių ir mechaninių procesų paaiškinimui ir uždavinių sprendimui naudojami du ribiniai dvifaziai modeliai: absoliučiai sauso grunto ($S_r = 0$) ir pilnai prisotinto vandeniu ($S_r = 1$) modeliai. Tai teoriniai modeliai, tačiau darant tam tikras prielaidas, taikomi tais atvejais, kai nagrinėjamas smėlio sluoksnis yra žemiau gruntinio vandens lygio ar giliau slūgsantis smulkus gruntas, kurio S_r yra artimas 1, ar pakankamai rupus smėlis esantis arti žemės paviršiaus priimant, kad jo S_r yra artimas 0. Tačiau nemaža dalis inžinerinių geologinių tyrimų, sprendžiant įvairius statybų ir aplinkosauginius klausimus, atliekama aeracijos zonoje, kur gruntas yra trifazė sistema sudaryta iš kietosios dalies, vandens ir oro. Toks gruntas laikomas neprisotintu vandeniu arba tik iš dalies prisotintu ($0 < S_r < 1$). Trifazės sistemos, kuri sudaro aeracijos zonos gruntu, analizė reikalauja ypatingų žinių ir tyrimų. Ypač tai aktualu ten, kur gruntai yra smulkesni arba turi didesnę smulkių dalelių kiekį. Dėl grunto porose esančių oro ir vandens slėgių skirtumo, skirtingo fazių spūdumo ir jų sąveikos bei cheminio poveikio, šių gruntų elgsena yra sudėtinga. Aeracijos zonoje pasireiškia neigiamas porinis slėgis, kuris atsiranda dėl kapiliariškumo ir sukuria papildomą paviršiaus įtemptumą. Minėti procesai ir reiškiniai sąlygoja grunto įsiurbimo slėgio ψ atsiradimą, kurį sudaro du komponentai: matricos įsiurbimo slėgis ($u_a - u_w$) ir osmosinis slėgis (ϕ_s). Tai svarbus faktorius, formuojantis aeracijos zonos gruntų fizikines ir mechanines savybes. Šis įsiurbimo slėgis, ψ , pirmiausia yra kapiliariškumo rezultatas.

Atsižvelgiant į tai, gruntų mechanikos laboratorijoje buvo atlikti įvairios sudėties smėlio kapiliariškumo ir laidumo vandeniu tyrimai, kurie leido redukuoti aeracijos zonos grunto filtracijos koeficientų vertes (k_{wet}). Taip pat laidumo tyrimai buvo atliekami ir lauko sąlygose, įrengtuose kasiniuose ir paruoštuose aikštelėse. Pagal tyrimo rezultatus, juos sugretinant su teorinėmis prielaidomis bei kitų autorių darbais, buvo nustatyta, kad aeracijos zonos gruntų filtracijos koeficientas dešimt ir daugiau kartų yra mažesnis nei analogiškos sudėties prisotintų vandeniu gruntų. Koeficiento vertė priklauso nuo įsiurbimo slėgio ir drėgmės kiekio. Gauti rezultatai tiesiogiai aprobuoti ir pritaikyti praktikoje, sėkmingai sprendžiant iškilusias problemas Alytaus ligoninės infiltracinėms sistemoms, eilėje naujai statomų pramonės kompleksų arba sprendžiant neveikiančių infiltracinių sistemų problemas.

Anglies alotropinių atmainų įvairovė ir jų panaudojimas

Justina Gaidukevič^{1,2}, Rūta Aukštakojytė¹, Rasa Pauliukaitė²

¹*Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas*

²*Fizinių ir technologijos mokslų centras, Nanoinžinerijos skyrius*

Anglis yra pagrindinė gyvybės Žemėje sudedamoji dalis. Unikalus anglies ypatumas sudaryti C-C ryšius atveria galimybes suformuoti junginius, sudarytus iš ilgų grandinių ir įvairių žiedų. Anglis sudaro didžiausią šiandien žinomų stabiliausių alotropinių modifikacijų skaičių. Kai kurios anglies alotropinės atmainos, tokios kaip grafitas ir deimantas, aptinkami gamtoje, kitos, pavyzdžiui, anglies nanovamzdėliai ir fulerenai – sintetunami laboratorijoje. Pastaruoju metu dėl savo ypatingų fizikinių ir cheminių savybių anglies alotropinės modifikacijos tapo svarbiu nanotechnologijos sektoriaus tyrimų objektu.

Šiuo metu ypač didelio mokslininkų susidomėjimo sulaukė vienas iš sp^2 hibridizacijos anglies nanodarinių – grafenas. Ši anglinė medžiaga pasižymi itin išskirtinėmis savybėmis, lyginant su kitomis anglies alotropinėmis atmainomis ir neorganinėmis medžiagomis. Grafenui būdingas didelis elektronų judris, paviršiaus plotas, mechaninis stiprumas ir šiluminis laidumas. Šiai naujai anglies alotropinei atmainai taip pat būdingas geras cheminis, terminis ir elektrocheminis stabilumas. Dėl šių unikalių charakteristikų, grafeninės medžiagos yra vienos iš perspektyviausių medžiagų pramonėje, nes gali būti naudojamos, kuriant ne tik ličio jonų baterijas, superkondensatorius, saulės ar kuro elementus, bet ir elektrocheminius jutiklius. Jutikliai, pagaminti iš nanomedžiagų, vis plačiau naudojami įvairiose srityse – nuo paprastų nešiojamųjų ar medicininių jutiklių, skirtų naudoti namuose kasdienei sveikatos stebėsenai, iki sudėtingesnių jutiklių, naudojamų muitinėje ar aviacijoje.

Šiame darbe tarpusavyje palygintos skirtingos anglies alotropinės atmainos ir aptartas mūsų mokslinėje grupėje gautų grafeninių medžiagų taikymas gliukozės aptikimui. Terminiškai redukuoto grafeno oksido (rGO) mėginiai buvo paruošti, kaitinant grafeno oksidą (GO) 800 °C temperatūroje argono atmosferoje. Vėliau, siekiant rGO paviršių modifikuoti azoto funkcinėmis grupėmis, rGO buvo kaitinamas amoniako atmosferoje 850 °C (4 val.) ir 950 °C (8 val.) temperatūrose. Gautos anglinės medžiagos charakterizuotos Rentgeno fotoelektroninės spektroskopijos (XPS), Raman spektroskopijos ir azoto adsorbcijos-desorbcijos metodais. Chronoamperometrijos metodu įvertintas gautų mėginių jautrumas gliukozės aptikimui.

Ištyrus paruoštus mėginius XPS metodu, nustatyta, kad funkcionalizuoto rGO paviršiuje yra išsidėsčiusios N–C sp^3 , piridininio, amino arba piridono, pirolinio ir grafitinio azoto funkcinės grupės. Azoto adsorbcijos-desorbcijos rezultatai parodė, kad visi paruošti mėginiai yra mezoporėtos ar makroporėtos medžiagos. Galiausiai atlikti elektrocheminiai matavimai patvirtino, kad azotu modifikuoti rGO mėginiai yra perspektyvios elektrodinės medžiagos elektrocheminiam gliukozės nustatymui.

Neorganinių 3D darinių formavimo šviesa technologijos ir tendencijos

Greta Merkininkaitė¹, Edvinas, Aleksandravičius², Darius Gailevičius², Mangirdas Malinauskas², Simas Šakirzanovas¹

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto Lazerinių tyrimų centras*

Pastaraisiais dešimtmečiais keraminės medžiagos ir iš jų pagamintos 3D struktūros susilaukia vis daugiau dėmesio dėl išskirtinių mechaninių, cheminių ir terminių savybių. Didėjant susidomėjimui 3D keraminėmis mikro/nano struktūromis, didėja naujų pirmtakų ir 3D darinių gamybos procesų paklausa. Todėl šio tyrimo tikslas buvo zolių-gelių metodu susintetinti įvairius metalo organinius junginius ir pagaminti keramines/kristalines 3D mikro/nanostruktūras kombinuojant fotopolimerizaciją femtosekundiniais lazeriais ir pirolizę.

Šiame darbe pateikti didelės raiškos ir kietų 3D keraminių struktūrų gamybos būdai, apimantys naujų medžiagų sintezes bei jų pritaikymą 3D daugiafotoninėje litografijoje. Pirmą kartą pademonstravome tiesioginį 3D mikrostruktūrų kristalinės fazės matavimo būdą ir ištyrėme pagamintų objektų kristalinių fazių pokyčius po terminio apdirbimo. Taip pat pasiekėme 3D keraminio objekto raiškos rekordą. Keraminės $\text{SiO}_2/\text{ZrO}_2$ periodinės rastrinės struktūros linijos plotis buvo mažesnis nei 60 nm.

Sukūrėme naują unikaliomis mechaninėmis savybėmis pasižyminčią silicio-organinę medžiagą. Pritaikius šią medžiagą 3D litografijoje ir atlikus pagamintų objektų pirolizę, buvo nustatyta, kad susiformuoja amorfinė SiOC arba kristalinės SiC ir/arba $\alpha, \beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ struktūros, kurios nesideformuoja ir neturi jokių defektų, o kietumas ir tamprumo modulis yra net ≈ 15 GPa ir ≈ 105 GPa.

Apibendrinant galima teigti, kad naujų medžiagų sintezė, jų fotopolimerizacija lazeriu ir vėliau gautų objektų terminis apdirbimas yra puiki technologija kuriant daugiafunkcinius mikro-/nano 3D keraminius objektus, o pristatomi pasiekimai sprendžia kietų ir preciziškų 3D struktūrų gamybos iššūkius ir praplečia technologijos pritaikymo galimybes komercijoje.

Miestų žalinimo probleminiai klausimai ir jų sprendimo būdai klimato kaitos kontekste

Ieva Misiūnė, Ričardas Skorupskas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Remiantis įvairiais skaičiavimais šiuo metu yra urbanizuota 2-4 proc. pasaulio sausumos, o urbanizuotose teritorijose gyvena daugiau nei 62 proc. visų pasaulio gyventojų. Panašios ir vis labiau intensyvėjančios tendencijos vyrauja ir Lietuvoje. Remiantis strateginio planavimo dokumentais, vystoma kompaktiško miesto koncepcija, tačiau čia dėl nelygiaverčio miesto urbanistinę struktūrą formuojančių komponentų integravimo, besikeičiančio klimato kontekste vis dažniau ir intensyviau reiškiasi ekstremalaus pobūdžio problemos, tokios kaip užtvindymas intensyvių kritulių metu arba karščio salos efektas. Miestų žaliosioms erdvėms atliekant pagrindinį vaidmenį švelninant neigiamą klimato kaitos poveikį, užtikrinant sveiką gyvenamąją aplinką ir rekreacijos galimybes paminėtų reiškinų fone, jos pačios nuolatos ir daug stipriau nei užmiesto teritorijose, patiria stiprėjančių ekstremalių klimato reiškinų poveikį. Todėl visi aukščiau išvardinti procesai tampa pagrindine grėsme žaliųjų erdvių kiekybiniais bei kokybiniais rodikliais. Pagrindiniai probleminiai aspektai, susiję su miestų žalinimu, kyla dėl miestų tankinimo ir ten esančių žalių ar potencialių žalių erdvių užstatymo, tokiu būdu stiprinant urbanizuotoms teritorijoms būdingų problemų raišką bei, tuo pačiu, dėl riboto ploto ir netolygaus išdėstymo likusioms žalioms erdvėms sukuriant didesnę antropogeninį spaudimą. Paminėta urbanistinė tendencija – ypač dėl siauro teritorijų vystymo interesų dominavimo – žaliųjų erdvių planavimą ir tvarkymą daro neoptimaliu. Tai savo ruožtu didina jų išsidėstymo netolygumą, mažina socialinį prieinamumą, pačių ekosistemų atsparumą bei jų ekologinį potencialą.

Taikant geoerdvinius ir socialinius analizės metodus Vilniaus miesto pavyzdžiu, buvo siekiama nustatyti žaliųjų erdvių poreikį, jų erdvinius skirtumus bei naudojimo pobūdį. Buvo parinkti kertiniai žaliųjų erdvių ekologinį, rekreacinį potencialą bei antropogeninės apkrovos lygį apibūdinantys kokybiniai rodikliai, kurie pasižymi turinio kompleksiskumu, kai greta pagrindinio vertinamo požymio netiesiogiai indikuojama eilė kitų požymių.

Socialinės analizės atskleidė Vilniaus miesto parkų lankymo ypatumus bei skirtingą lankytojų poreikį. Tyrimo metu konstatuota, kad pagrindinis motyvas pasirenkant žaliąją erdvę yra susijęs su parkų artumu namų atžvilgiu, o tai dar labiau aktualizuoja želdynų prieinamumo klausimą. Šiuo metu yra taikytinos gana įvairios želdynų pasiekiamumo vertinimo metodologijos, kurių panaudojimas neretai lemia pastebimai kontrastingus rezultatus, kurie tenkina ne miesto kaip sudėtingos urbanistinės, socialinės ir ekologinės struktūros poreikius, bet siaurus vienpusius interesus. Todėl sprendžiant su tuo susijusias problemas ir su klimato kaita susijusius klausimus, būtina suformuoti bei aprobuoti mokliškai pagrįstą, nesudėtingą, miesto želdynų pasiekiamumo ir jų kokybės vertinimo sistemą, o svarbiausia integruoti ją į teritorijų planavimo dokumentus bei kasdieninio gyvenimo sprendinius.

Fosforilcholino šepetiniai kopolimerai: sintezė ir taikymas

Marijus Jurkūnas¹, Martynas Talaikis², Vaidas Klimkevičius¹, Vaidas Pudžaitis², Gediminas Niaura², Ričardas Makuška¹

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Fizinių ir Technologijos mokslų centras*

Hidrofiliniai polimerai su fosforilcholino funkcinėmis grupėmis, pavyzdžiui, poli(2-metakriloiloksietilfosforilcholinas) (pMPC), turi panašumo į fosfolipidus ir pasižymi ypatingomis savybėmis, tokiomis kaip biosuderinamumas, biolubrikacija, baltymų bei teršalų atstūmimas. Šios savybės ypač svarbios tokius polimerus taikant biologinėse sistemose. Polimerai, kuriuose yra MPC segmentų, veikia kaip veiksmingi paviršių biolubrikatoriai vandeninėje terpėje. Siekiant paviršius modifikuoti polimerais su MPC segmentais, reikia antrojo polimerinio bloko, kuris pasižymėtų stipria sąveika su paviršiumi. Šią funkciją gali atlikti polimeriniai blokai, turintys adhezinėmis savybėmis pasižyminčių katecholinių grupių.

Adhezinėmis savybėmis pasižymintys šepetiniai diblokiniai kopolimerai buvo sintetiniai pradėdant nuo pMPC bloko. MPC RAFT polimerizacija buvo gerai kontroliuojama, susintetintas pMPC pasižymėjo labai mažu dispersiškumo indeksu (Đ apie 1,1) bei polimerizacijos laipsniu, artimu teoriniam (PL apie 40). „Snaudžiančios“ pMPC grandinės buvo panaudotos kaip makroiniciatorius antrojo bloko sintezei, acetonido grupės apsaugoto dopamino metakrilamido (ADOPMA) RAFT polimerizaciją vykdant pMPC tirpale. Buvo susintetintas blokinis šepetinis kopolimeras pMPC-*b*-pADOPMA, kurio pMPC bloką sudarė 41 monomerinė grandis, o pADOPMA bloką 13 grandžių. ¹H BMR spektroskopijos ir DLS metodais buvo įrodyta, kad buvo gautas amfifilinis diblokinis kopolimeras be pMPC priemaišų. Kopolimerą veikiant trifluoracto rūgštimi, katecholinių grupių apsauga buvo pašalinta, susidarant adhezinėmis savybėmis pasižyminčiam kopolimerui pMPC-*b*-pDOPMA.

Diblokinių kopolimerų su apsaugotomis ir neapsaugotomis katecholio grupėmis adsorbcijos ant aukso paviršiaus dinamika buvo tiriama naudojant ATR-FTIR spektroskopiją, paviršiaus sustiprintą infraraudonosios spinduliuotės adsorbcijos spektroskopiją (SEIRAS) ir atspindžio-adsorbcijos infraraudonosios spinduliuotės spektroskopiją (RAIRS). Kopolimerai su apsaugotomis katecholio grupėmis pMPC-*b*-pADOPMA pasižymėjo fizikine adsorbcija, kuriai būdinga greita adsorbcija ir gana lengva desorbcija. Kopolimerams su laisvomis katecholio grupėmis pMPC-*b*-DOPMA buvo būdinga cheminė adsorbcija, kuri vyko lėčiau, tačiau pasižymėjo stipresne sąveika su aukso paviršiumi. Naudojant SEIRAS ir RAIRS metodus buvo įrodytas diblokinių kopolimerų konformacijos adsorbcijos metu pasikeitimas, pMPC blokui lėtai pakylant nuo aukso paviršiaus ir sudarant šepetinį sluoksnį.

Eolinio kraštovaizdžio transformacijos: stebėseną ir analizė

Linąs Bevainis, Algimantas Česnulevičius, Artūras Bautrėnas, Donatas Ovodas, Neringa Mačiulevičiūtė–Turlienė, Loreta Šutinienė, Rima Svilienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Po Nepriklausomybės atkūrimo Lietuvoje, ypač Kuršių nerijoje, pastebimai išaugo poilsiautojų skaičius. Tai lėmė didesnę susidomėjimą regiono gamtos ir kultūros paveldo objektais, įskaitant gausias pustomas kopas. Vienas iš tokių objektų – Naglių gamtinis rezervatas. Šis rezervatas, su savo unikaliu kraštovaizdžiu ir ekosistema, yra ne tik turizmo, bet ir mokslinių tyrimų objektas. Šiame kontekste šis tyrimas yra svarbus siekiant įvertinti rezervato reljefo pokyčius, nustatyti veiksnius, darančius įtaką smėlio judėjimui, ir pasiūlyti priemones stabilizuoti smėlio defliaciją.

Atlikto tyrimo tikslas yra įvertinti Naglių rezervato reljefo pokyčius veikiant natūraliems gamtiniams veiksniams, tokiems kaip vėjo greitis ir kryptis, ir antropogeninei lankytojų apkrovai. Be to, siekiama identifikuoti galimus sprendimus ir rekomendacijas smėlio defliacijos procesų stabilizacijai.

Tyrimo metodika buvo parengta siekiant objektyviai įvertinti Naglių rezervato reljefo pokyčius ir identifikuoti veiksnius, darančius įtaką smėlio judėjimui bei kopų deformacijoms. Pagrindinė metodikos dalis – tiesioginių matavimų palyginamoji analizė. Šie matavimai apėmė sezoniškus reguliarius tyrimus, naudojant elektroninius tacheometrus ir GPS imtuvus, siekiant gauti tikslius topografinius duomenis. Meteorologiniai duomenys, kaupiami iš autonominių meteorologinių stotelių, buvo naudojami analizuoti oro sąlygas, ypač vėjo greitį ir kryptį, temperatūrą bei kritulių kiekį. Šie duomenys leido nustatyti potencialius smėlio judėjimo laikotarpius ir įvertinti jų intensyvumą. Be to, aerofotogrametriniai matavimai, atlikti bepiločiais orlaiviais, ir termovizijos duomenys buvo naudojami vizualiai įvertinti smėlio paviršiaus temperatūrinius pokyčius ir galimus pustomo smėlio srautus. Lankytojų srauto analizė ir fizinės apkrovos matavimai su specialiais davikliais leido įvertinti žmonių įtaką smėlio paviršiui. Be to, smėlio gaudyklėse sukaupti duomenys apie pernešamą smėlį suteikė galimybę įvertinti smėlio judėjimo mastą ir identifikuoti pažeidžiamas teritorijas.

Rezultatai parodė, kad smėlio judėjimą ir kopų deformacijas veikia tiek gamtiniai, tiek antropogeniniai veiksniai. Pastebėta, kad meteorologiniai faktoriai, tokie kaip vėjo greitis, kryptis, oro temperatūra ir kritulių kiekis, turi didelės įtakos smėlio defliacijai. Lankytojų srautas taip pat vaidina svarbų vaidmenį, nes jų judėjimas prisideda prie smėlio judėjimo ir kopų deformacijų.

Remiantis gautais rezultatais, suformuluotos rekomendacijos, skirtos stabilizuoti kopų reljefo procesus ir apsaugoti Kuršių nerijos ekosistemą. Šios rekomendacijos apima ribojimus lankytojams. Taip pat svarbu stebėti klimato sąlygas ir smėlio judėjimo dinamiką, kad būtų galima laiku imtis tinkamų priemonių. Šie rezultatai ir rekomendacijos yra vertingi, siekiant ilgalaikio Kuršių nerijos kraštovaizdžio išsaugojimo ir ekosistemos stabilizavimo.

Medienos technologijų pažanga: medienos modifikavimo metodų, skirtų tvariai statybai ir naujoviškiems pritaikymams, tyrinėjimas

Denis Sokol

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos Institutas.

Mediena naudojama jau tūkstančius metų ir jos pagrindinis panaudojamas toliau išlieka svarbus kuro ir statybų, įrankių, baldų ar popieriaus gamybos pramonėse. Mediena – tai perdirbama, atsinaujinanti ir biologiškai suyranči medžiaga. Nors medžio gaminiai yra itin paklausūs, lengvai apdirbami ir mechaniškai stiprūs, pati medžiaga lengvai dega, yra neatspari drėgmei, įvairiems mikroorganizmams bei aplinkos poveikiui. Lyginant su plieno ar betono konstrukcijomis, medinės konstrukcijos reikalauja mažiausiai energijos išteklių gamybai, taip pat turi mažiausią šiltnamio efektą sukeliančių dujų emisijos lygį.

Siekiant išsaugoti medienos ilgaamžiškumą ir sumažinti kenkėjų bei aplinkos padaromus nuostolius, mediena įprastai yra apdorojama įvairiais būdais. Tai atliekama vienu iš pagrindinių trijų metodų – modifikuojant ląstelės sieną, impregnuojant arba padengiant medieną. Kiekvienas iš šių metodų turi savo privalumus ir trūkumus, todėl nuolat yra ieškoma naujų arba patobulintų kompleksinių medienos apsaugojimo priemonių.

Siekiant optimizuoti, atpiginti ir supaprastinti modifikavimą mes naudojame kelių stadijų vandeninių tirpalų pagrindu paremtą medienos mineralizaciją. Mediena apdorojama (modifikuojama) tokiais junginiais kaip kalcio fosfatai (CaP), magnio-aliuminio ar cinko-aliuminio sluoksniuotais dvigubais hidroksidais (SDH). Gauti mėginiai toliau testuojami skenuojančiu elektroniniu mikroskopu, atliekami medienos mechaniniai, termoizoliaciniai testai, tiriama modifikavimo įtaka degumui bei atliekami antibakteriniai ir antigrybeliniai bandymai.

Visos šios modifikacijos sukuria didelį potencialą gaminti aplinkai nekenksmingas, vandenyje netirpias, patvarias ir ilgaamžes hibridines biologines (bio-based) statybines medžiagas.

The image features a white background with decorative geometric elements. In the top right corner, there is a cluster of small, faint orange triangles connected by thin lines, resembling a network or constellation. 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.

STENDINIAI PRANEŠIMAI

1

Profesorius Juozas Paškevičius – Lietuvos geologijos korifėjus

Algimantas Grigelis

Lietuvos mokslų akademija

Minint įžymaus geologo, profesoriaus, habilituoto daktaro Juozo Paškevičiaus 100 metų gimimo sukaktį prisimintina jo septynis dešimtmečius trukusi mokslinė ir pedagoginė veikla Vilniaus universitete, kuomet 1952 metais, baigęs geologijos studijas, jis buvo paskirtas Gamtos mokslų fakulteto Geologijos ir mineralogijos katedros dėstytoju. Taip jau sutapo, kad 1952-1953 m. Vakarų Lietuvoje, Stoniškiuose buvo gręžiamas gilusis gręžinys, kuris pirmą kartą Lietuvoje kirta visą nuosėdinę storumę ir 2109,4 m gylyje įsigrėžė į prekambro kristalines uolienas. Paaiškėjo, kad po devono uolienomis čia slūgso dar virš 1000 metrų silūro, ordoviko ir kambro nuosėdinių uolienų, užpildančių paleozojinės Baltijos sineklizės dubumą. Štai šią didžiulę uolienų storumę katedros vedėjas profesorius Juozas Dalinkevičius ir pavedė tirti jaunajam dėstytojui J. Paškevičiui. Juolab, kad tuo metu krašte buvo gręžiama ir daugiau gręžinių, vadinamų struktūrinių ir parametrinių, tikslu tirti gelmių sandarą bei naftingumo perspektyvas.

Tai ilga istorija, aprėpianti šimtus uolienų kerno dėžių, tūkstančius imstų uolienų sudėčiai ir fosilijoms tirti, dienų dienas prie paleontologinio mikroskopo. J. Paškevičius iš pradžių rinko ir kambro, ir ordoviko, ir silūro fosilinę fauną, kuri buvo gausi radiniais, tačiau galiausiai pasirinko silūro graptolitus, gerai išlikusius silūro skalūnuose. Kitas fosilijų grupes pavedė tirti kitiems Katedros arba Geologijos instituto paleontologams. Jis pats laikui bėgant silūro graptolitų ir stratigrafijos tema parengė mokslų kandidato (1958), o po to ir mokslų daktaro (1973; dabar – habilituoto daktaro) disertacijas, surado naują gentį *Lithuanograptus* ir keletą naujų graptolitų rūšių, užmezgė plačius mokslinius ryšius, įgavo tarptautinį graptolitologo autoritetą. Kildamas pedagoginės karjeros laiptais, 1975 m. tapo VU GF Geologijos ir mineralogijos katedros vedėju, puoselėjo mokslinį personalą, palaikė klasikines geologų rengimo programas, atkūrė ir išplėtojo Vilniaus universiteto Geologijos muziejų. Plėtojo silūro sistemos tyrimus, sukūrė geologijos ir mineralogijos katedroje Silūro tyrimų mokyklą (vad. Silūro klubas).

Prof. Juozas Paškevičius buvo plataus diapazono mokslininkas, Lietuvos stratigrafinės komisijos pirmininkas, silūro graptolitų tyrimo pradininkas, monografijų autorius, parengė leidinį „Pabaltijo respublikų geologija“ (liet. ir anglų k.), daug rašė mokslo istorijos klausimais, eilę metų leido VU mokslinį žurnalą „Geologija“.

Mano kolega Juozas, su kuriuo teko bendrauti nuo 1953 m. ir kurį laiką dėstyti jo vedamoje katedroje, buvo šviesus žmogus, nuosaikaus būdo, labai darbštus ir kruopštus mokslininkas bei pedagogas. Kilęs iš kaimo aplinkos, turėjo stiprų gamtos ir asmenybės ryšį, laisvalaikiu mėgavosi sodininkystės, kurią išmanė profesionaliai, teikiamu gamtos vienybės pojūčiu.

Profesorius, habilituotas mokslų daktaras Juozas Paškevičius buvo savo laiko Lietuvos geologijos korifėjus. Jam vadovaujant, Universiteto geologai galėjo jaustis turintys stiprų sau stogą, tokį kaip mylimuose Dabužiuose „Dabužėliuose“ jaunuolis Juozas kadais buvo uždengęs tėviškės klojimą...

2

"Foto reportažas": iš profesoriaus Juozo Paškevičiaus gyvenimo

Eugenija Rudnickaitė

Vilniaus universitetas, ChGF, Geomokslų institutas, Geologijos ir mineralogijos katedra, Geologijos muziejus

Tam, kad bent minimaliai supažindinti su profesoriaus, habilituoto geologijos mokslų daktaro Juozo Paškevičiaus gyvenimu, reikėtų ne vieno fotoreportažo... Šimto, ko gero, pakaktų...

Iššūkis – atspindėti daugiabriaunį ilgametį Profesoriaus gyvenimo kelią šiame „foto reportaže“ - sprendžiamas skirstant atskirais etapais: „Vaikystė“, „Jaunystė“, „Geologijos ir mineralogijos katedroje“, „Gyvenimo pilnatvė“. Kiekvienas etapas išskaidomas pagal veiklos kryptis: mokymasis, studijos, dėstymas, moksliniai tyrimai, veiklos įvertinimas, šeima, laisvalaikis, etc...

Šiame reportaže išvysite nuotraukas iš asmeninio profesoriaus Juozo Paškevičiaus albumo bei didelio būrio autorių užfiksuotas Profesoriaus gyvenimo akimirkas, kurios skaitmeniniu formatu saugomos VU Geologijos muziejuje.

3

Svarbiausi profesoriaus Juozo Paškevičiaus publikuoti darbai

Eugenija Rudnickaitė

Vilniaus universitetas, ChGF, Geomokslų institutas, Geologijos ir mineralogijos katedra, Geologijos muziejus

Minėdami geologo, profesoriaus, habilituoto daktaro Juozo Paškevičiaus 100 metų gimimo sukaktį pažvelkime į jo knygų lentyną. Lentyna ažuolinė, nes iš kito medžio pagaminta neatlaikytų per septynis dešimtmečius trukusios mokslinės bei pedagoginės veiklos geologijos srityje Vilniaus universitete parašytų ir publikuotų mokslinių straipsnių, vadovėlių, monografijų, autobiografinių bei prisiminimų knygų. Pridėjus atlasus gauname 38. Lentynoje virš 300 mokslinių straipsnių. Jo įkurto ir ilgą laiką redaguoto žurnalo „Geologija“ 36 numeriai.

Puikuojami čia ir 10 metų darbo su bendraautoriais Viktoru Kemėšiu bei Augustinu Linčiumi rezultatas – dvitomis „Enciklopedinis geologijos terminų žodynas“.

Dvi apgintos disertacijos: geologijos mokslų kandidato (dabar daktaro) ir geologijos mokslų daktaro (dabar habilitacinė).

4

Formation of Prussian Blue thin coat – based biosensors

Gabija Adomaitė, Aušra Valiūnienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos instituto Fizikinės chemijos katedra

Iron hexacyanoferrate (Prussian blue (PB)) is an inorganic, electrochromic compound, which is selective for several monovalent ions (Cs^+ , Rb^+ , K^+ and NH_4^+). These ions (Cs^+ , Rb^+ , K^+ and NH_4^+) are incorporated in the crystal lattice of PB when PB is electrochemically reduced in Cs^+ , Rb^+ , K^+ or NH_4^+ ions containing solution. Moreover, the concentration of PB reduction promoting ions (Cs^+ , Rb^+ , K^+ and NH_4^+) affects the reduction potential of PB. For this reason, PB can be used as a signal transducer in optical and electrochemical analytical systems, such as electrochemical ion sensors. Furthermore, PB thin coat has the property of changing its electrochemical properties in the influence of pH. For the mentioned reasons, Prussian Blue is often used as a redox mediator and signal transducer in biosensors, for example urea and glucose biosensors.

In this research work, two type biosensors based on formation of glass/FTO/PB/enzyme type electrodes are introduced (Fig.1). Glucose analysis study is based on the glass/FTO/PB/GOx type of electrode and is used for optical glucose sensing. Urea analysis study is based on glass/FTO/PB/urease type electrode, which is used for electrochemical sensing of urea by using electrochemical impedance spectroscopy.

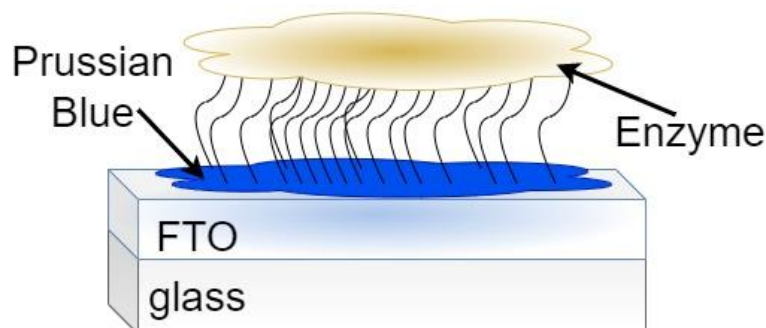


Figure 1. Scheme of glass/FTO/PB/enzyme type electrode construction.

5

Azoto, fosforo ir kalio koncentracijos kitimas biriuose organiniuose tręšiamuosiuose produktuose

Gabija Aleksaitytė, Odeta Pocienė, Rasa Šlinkšienė

Kauno technologijos universitetas Cheminės technologijos fakultetas Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra

ES žaliasis kursas – tai tvarios ekonomikos augimo strategija, kuri siekia, kad Europa taptų pirmuoju neutralaus poveikio klimatui žemynu. Greta pramonės ir transporto didelį poveikį klimato kaitai daro ir žemės ūkis. Augalininkystės sektoriuje ilgus metus buvo vykdoma intensyvi žemdirbystė ir naudojama daug koncentruotų mineralinių trąšų, todėl dirva tapo labai nualinta, joje sumažėjo organinių medžiagų kiekis, o paviršinis vanduo tapo užterštas cheminiais elementais, kurių augalai nespėjo pasisavinti. Tuo tarpu maisto pramonėje susidaro didelis kiekis biomasės, t. y. bioskaidžių organinių atliekų, turinčių augalams reikalingų maisto medžiagų. Šios atliekos, po tinkamo apdorojimo, gali būti naudojamos kaip tręšiamieji produktai dirvos organiniai daliai atstatyti.

Vienos tokių atliekų yra grikių kruopų gamybos atliekos. Įmonė „Ekofrisa“, kuri yra įsikūrusi Lietuvoje, turi sukaupti biomasės atliekų ir siekia efektyviai jas panaudoti. Paprasčiausias biomasės panaudojimo būdas – kompostavimas. Tačiau iš jų galima pagaminti aukštesnės pridėtinės vertės produktus, nes nevalytoje biomasėje, grikių lukštuose ir jų pelenuose yra įvairių cheminių elementų: N, P, K, Ca, Mg ir C. Taip pat juose yra mikroelementų Zn, Fe, Mn ir Cu, o sunkiųjų metalų (Cd, Pb, Cr) randama tik po apdorojimo rūgštinti. Norint pagaminti organines trąšas šias biomasės atliekas reikia sugrąnuluoti. Naudojant įvairias žaliavų (pelenuų, grikių lukštų, nevalytos biomasės) kompozicijas ir rišiklius (pvz., melasą) būgniniu granulatoriumi-džiovykla buvo sugrąnuluotos biriosios trąšos.

Šio darbo tikslas – išanalizuoti tokio granuluoto produkto cheminę sudėtį ir įvertinti jo tinkamumą augalams tręšti. Produkto analizei buvo naudojami cheminės ir instrumentinės analizės metodai. K ir Ca koncentracija trąšose nustatyta naudojant liepsnos fotometrą (Jenway PFP7), P koncentracija – spektrometrą (UV/VIS T70+), N koncentracija amoniakinėje (NH_4^+), nitratinėje (NO_3^-) ir amidinėje ($-\text{NH}_2$) formoje – automatinę Kjeldalo sistemą (Vapodest 45s Gerhardt). Naudojant skenuojančią elektronų mikroskopiją (SEM-EDS, Hitachi S-3400N su Bruker Quad 5040 EDS detektoriumi) buvo užrašyti elementų žemėlapiai. Gauti cheminės analizės rezultatai parodė, jog tokiose trąšose kalio (perskaičiuoto į K_2O) yra nuo 6,21 iki 10,06 %, amidinio azoto (NH_2) yra nuo 1,20 iki 2,10 %, fosforo (perskaičiuoto į P_2O_5) yra nuo 0,04 iki 1,55 %, o kalcio (perskaičiuota į CaO) yra nuo 0,03 iki 0,32 %. SEM-EDS rezultatai šiek tiek skiriasi nuo cheminės analizės rezultatų, tačiau tendencijos išlieka tos pačios. Priklausomai nuo naudotų žaliavų, trąšose yra labai daug anglies (~26–39 %), daug kalio (~5–20 %), mažiau fosforo (~0,5–1,6 %), kalcio, sieros, magnio ir kitų elementų.

Todėl apibendrinant galima daryti išvadą, kad iš minėtų grikių kruopų pramonės atliekų pagaminti birūs organiniai tręšiamieji produktai būtų naudingi ir augalams, ir dirvai.

6

Selective Electrochemical Detection of Dopamine Using Nitrogen-Modified Reduced Graphene Oxide

Rūta Aukštakojtė¹, Rasa Pauliukaitė^{1,2}, Justina Gaidukevič^{1,2}

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

²*Department of Nanoengineering, Center for Physical Sciences and Technology*

Dopamine (DA) is a vital neurotransmitter, which abnormal levels in human blood are associated with neurological diseases such as schizophrenia, depression, Parkinson's, and Alzheimer's diseases. Recently, electrochemical methods have been recognized as efficient tools for detecting DA due to their simplicity, cost-effectiveness, high sensitivity, and rapid response time. Graphene-based derivatives such as graphene oxide (GO) and reduced graphene oxide (rGO) are gaining attention as promising electrode materials for electrochemical sensors owing to their efficient synthesis and unique physicochemical characteristics. Although rGO offers advantages such as high surface area, chemical and thermal stability, mechanical strength, and electrical conductivity, achieving high sensitivity and rapid response in rGO-based sensors remains challenging. Doping with heteroatoms presents a strategy to improve the structural and electrochemical properties of rGO by increasing charge carrier density, wettability, sensitivity, and creating new electrocatalytically active sites, thereby ensuring a rapid electrochemical response for precise DA detection.

This study focuses on the preparation of N-doped reduced graphene oxide (N-rGO) samples and their electrochemical performance in detecting DA. N-rGO samples (rGO_BB20 and rGO_BB50) were synthesized via a one-pot hydrothermal treatment of GO, employing the organic dye Bismarck Brown (BB) as a novel N source. Characterization techniques including Brunauer-Emmett-Teller analysis, scanning electron microscopy, electrical conductivity measurements, X-ray photoelectron (XPS), and Raman scattering spectroscopies were performed. Cyclic voltammetry, chronoamperometry, and interference studies were carried out to analyse the sensitivity and selectivity of N-rGO samples toward DA detection. XPS analysis revealed the increased N content in rGO_BB20 (3.8 at.%) and rGO_BB50 (10.6 at.%), indicating successful N-functionalization during BB-assisted hydrothermal synthesis of GO. Raman spectroscopy showed higher FWHM(G) values for both samples, suggesting enhanced structural defects due to N incorporation. Particularly, rGO_BB20 exhibited a higher concentration of quaternary nitrogen species (6.1%), a larger specific surface area ($52 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$), and greater electrical conductivity than rGO_BB50. Consequently, rGO_BB20 demonstrated superior electrochemical performance with a lower detection limit (45 nM), higher sensitivity ($0.61 \mu\text{A } \mu\text{M}^{-1} \text{ cm}^{-2}$) in a 0–15 μM linear range, and sensitivity of $0.39 \mu\text{A } \mu\text{M}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ in a wider 15–476 μM linear detection range compared to rGO_BB50.

7

Skystosios trąšos su huminėmis medžiagomis, gautomis iš durpių

Ieva Bagamulskytė, Rasa Paleckienė

Kauno technologijos universiteto Cheminės technologijos fakulteto Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra

Įgyvendinant ES planuojamas tvaresnes žemės ūkio praktikas būtini pokyčiai trąšų rinkoje. Pastaraisiais metais sparčiai plėtojami biologiškai aktyviomis medžiagomis praturtintų tręšiamųjų produktų gamybos ir naudojimo tyrimai. Vienos iš efektyviausių biologiškai aktyvių medžiagų yra huminės ir fulvinės rūgštys. Tokių medžiagų gavimui kaip žaliava gali būti naudojamos durpės. Durpių pritaikymas huminių medžiagų gaminimui leistų padidinti vietinių gamtinių išteklių naudojimą ir plėsti durpių panaudojimo galimybes.

Šio darbo tikslas – eksperimentiškai išanalizuoti huminių medžiagų gavimo iš durpių sąlygas, ištirti gautų produktų savybes ir įvertinti jų taikymo galimybes. Tyrime buvo naudotos Rėkyvos, Ežerėlio ir Palių durpynų žemapelkių ir Šilutės (Klasman-Deilmann) telkinio aukštapelkių durpės. Šie durpių ėminiai buvo analizuojami naudojant standartines metodikas (LST 1957:2022 Durpės, skirtos daržininkystei, sodininkystei ir dekoratyvinei sodininkystei. Savybės, tyrimo metodai, techninės tiekimo sąlygos). Buvo nustatytos savybės: elektrinis laidis, pH, susiskaidymo laipsnis pagal r vertę, pelenų ir organinės anglies kiekis. Taip pat atlikta bandinių rentgeno spinduliuotės difrakcinė (XRD), Infraraudonojo spektro molekulinė absorbcinė spektrinė (FTIR) ir vienalaikė termogravimetrija–diferencinė skenuojamoji kalorimetrinė (VTA) analizė. Įprastiniais ir trąšų srityje pripažįstamais metodais buvo tirama bandinių cheminė sudėtis, nustatyta makroelementų (N, P, K) ir mikroelementų koncentracija. Vertinant gautus rezultatus pastebėta, kad Palių durpyno durpių ėminių rezultatai yra geriausiai atsikartojantys ir statistiškai patikimiausi, todėl tęsiant tyrimus buvo naudojamos Palių (Paežerės k. Igliaukos sen. Marijampolės sav.) durpyno durpės. Pasirinktos durpės buvo naudojamos huminių medžiagų išgavimui šarminės ekstrakcijos būdu, naudojant KOH tirpalus. Huminės ir fulvinės rūgštys atskiriamos į skystąją fazę, o huminai ir neorganinės medžiagos liko kietojoje fazėje. Tirta kalio šarmo koncentracijos (5 %, 10 %), sąveikos trukmės (1 h, 2 h, 3 h), temperatūros (20 °C, 40 °C), durpių ir kalio šarmo tirpalo santykio (1:20, 1:30) ir maišymo (mechaninio ir ultragarsinio) įtaka huminių medžiagų išsiskyrimui. Tyrimo, esant skirtingoms sąlygoms, rezultatai parodė, jog vykdant durpių ekstrakciją ultragarsinėje vonelėje 2 val esant 20°C temperatūrai išgaunamas maksimalus huminių ir fulvinių rūgščių kiekis. Tirtos ekstraktų savybės (el. laidis, tankis, klampa, lūžio rodiklis) ir huminių medžiagų (organinės anglies) kiekis. Taip pat, įvertintas pagamintų ekstraktų stabilumas.

Kadangi huminių medžiagų ekstraktai yra stipriai šarminiai, nuspręsta juos neutralizuoti fosforo rūgštimi. Tokiu būdu gaunamos skystosios fosforo – kalio trąšos su huminių medžiagų priedu. Pagaminti trąšų bandiniai išanalizuoti ir atliktas jų agrocheminio efektyvumo vertinimas taikant adaptuotą mikrovegetacinį metodą. Eksperimentiškai gauti rezultatai leidžia sukurti skystų tręšiamųjų produktų gamybos technologijos iš durpių principinę schemą bei rekomendacijas produkto gamybai ir naudojimui.

8

MXenų pritaikymas kolorimetriniam sidabro jonų nustatymui

Raminta Bajarūnaitė¹, Anton Popov¹, Martynas Talaikis², Gediminas Niaura², Almira Ramanavičienė¹, Simonas Ramanavičius³

¹*NanoTechnas – Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas*

²*Organinės chemijos skyrius, VMTI Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras*

³*Elektrocheminės medžiagotyros skyrius, VMTI Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras*

Sidabro jonai, patenkantys į geriamąjį vandenį bei paviršinius vandens telkinius, kelia didelį pavojų žmonių ir gyvūnų sveikatai ir gerovei. Sidabro ir kitų metalų jonai gali būti aptinkami atominės absorbcijos/emisijos spektrometrijos (AAS/AES), induktyviai susietos plazmos masės spektrometrijos (ICP-MS), fluorimetrijos, elektrocheminiais ir kolorimetriniais analizės metodais. Tarp visų šių metodų kolorimetrija yra patogiausias metodas, kadangi nereikalauja sudėtingos įrangos bei yra lengvai pritaikomas analizei mėginių paėmimo vietoje.

MXenai – tai santykinai neseniai atrasta 2D medžiagų klasė. Jų panaudojimas kolorimetriniuose jutikliuose yra labai patrauklus antrankiam metalų jonų nustatymui vandens mėginiuose. MXenai pasižymi tokiomis savybėmis kaip lengvai funkcionalizuojamas paviršius, hidrofiliškumas, didelis neigiamas dzeta potencialas, leidžiantis formuoti stabilius koloidinius tirpalus vandenyje. Be to, būtina atkreipti dėmesį į tai, kad MXenai pasižymi dideliu paviršiaus plotu, todėl jie puikiai adsorbuoja įvairias molekules ir jonus. Šio darbo tikslas yra parodyti, kaip $Ti_3C_2T_x$ MXenų nanoplazmoninis jutiklis, gali būti pritaikomas aptikti sidabro jonus vandenyje.

Tyrimo metu MXenų sąveika su sidabro jonais buvo tiriama citratiniuose buferiniuose tirpaluose pH intervale nuo 3 iki 6. Taip pat, tyrimai atlikti realiuose žinomos sudėties mėginiuose. Nors kolorimetrinė reakcija tarp MXenų ir sidabro jonų įvyksta žaibiškai, o spalvos pokytis matomas plika akimi, tirpalų spalvos pokyčiui įvertinti panaudotas spektrofotometras. Iš gautų rezultatų galima teigti, kad buferinis tirpalas neleidžia vykti sidabro jonų redukcijai, sukeldamas reikšmingą absorbcijos smailės mažėjimą bei pasislinkimą į ilgesnių bangų pusę nuo 450 nm iki 650 nm, lyginant su matavimais atliktais dejonizuotame vandenyje. Vis dėl to, tyrimų rezultatai realiuose mėginiuose rodo pakankamai didelį jautrumą ir tiesinę analizinio signalo priklausomybę nuo sidabro jonų koncentracijos.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. P-ST-357.

9

Pleistoceno žinduolių bendrijų sąranga: Bajeso tinklų analizė

Simona Bekeraitė, Ivona Juchnevičiūtė, Andrej Spiridonov

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų instituto Geologijos ir mineralogijos katedra

Bendrijų sąrangos kilmė yra vienas seniausių ekologijos klausimų. Stebima fosilijų bendrijų sudėtis yra nulemta daugelio aplinkos, biogeografinių ir tafonominių procesų, veikiančių skirtinguose laiko ir erdvės masteliuose. Naudodami Bajeso tinklų analizės metodus, nustatėme sąryšius ir jų stiprius tarp 12 pleistoceno žinduolių šeimų bei jų lokalsios aplinkos sąlygų, globalios temperatūros, radimvietės amžiaus ir geografinės padėties.

Bajeso tinklas yra kryptinis aciklinis grafas, moduliariai atvaizduojantis bendrą visų jį sudarančių viršūnių tikimybių skirstinį. Bendras tikimybių skirstinys yra lokalių (kiekvienos viršūnės) sąlyginių tikimybių sandauga. Tinklo struktūra vaizduoja kintamųjų kokybinius ryšius, o lokalūs sąlyginių tikimybių skirstiniai leidžia kiekybiškai įvertinti ryšius tarp kintamųjų.

Išskyrus Hominidae šeimos atvejį, neradome reikšmingų sąryšių tarp išorinių veiksnių, tokių kaip platumas, amžius, vidutinė paviršiaus temperatūra, ir tirtų didelių žinduolių šeimų, o tai parodo, kad dauguma šeimų buvo atsparios ekstremaliems pleistoceno klimato pokyčiams. Žinduolių šeimų ryšiai yra išsidėstę pagal plėšrūnų ir visaėdžių visaėdiškumo lygmenį bei žolėdžių prisitaikymą prie atvirų ar miško buveinių. Taip pat neradome neigiamų sąveikų tarp tirtų žinduolių šeimų, o tai reiškia, kad konkurencija tarp kladų vyksta žemesniuose taksonominiuose lygmenyse. Šiuo metu kaip tik atliekame biotinių sąveikų tyrimus genčių ir rūšių taksonominiuose lygmenyse.

Mūsų žiniomis, tai yra pirmoji judrių sausumos gyvūnų paleobendruomenių Bajeso tinklų analizė, kuri gali būti naudinga tolimesniems biotinių ir aplinkos veiksnių įtakos paleobendruomenėms tyrimams.

10

Eu jonais legiruoto stroncio chlorapatito sintezė bei optinės savybės

Simona Bendžiūtė, Inga Grigoravičiūtė, Artūras Katelnikovas, Aleksej Žarkov

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Optinės medžiagos bei jų liuminescencinės savybės sulaukia didelio dėmesio dėl galimo plataus pritaikymo. Junginiai, legiruoti Eu^{2+} jonais, dažniausiai sintetunami redukuojančioje atmosferoje, tačiau tam tikros neorganinės matricos stabilizuoja Eu^{2+} oksidacinę būseną ir oro atmosferoje. Savaiminės redukcijos reiškinys stebimas boratų, silikatų bei fosfatų junginiuose. Visgi fosfatinės medžiagos plačiausiai naudojamos ruošiant lantanoidais aktyvuotus fosforus. Daugiausiai žadantis junginys yra stroncio chlorapatitas ($\text{Sr}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$). Ši cheminė struktūra pasižymi tuo, jog gali adaptuoti įvairaus valentingumo jonus įskaitant ir lantanoidus.

Šiame tyrime buvo sintetunami bei analizuojami Eu legiruoti $\text{Sr}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ milteliai su skirtingu Eu kiekiu. Sintezės optimizavimo etapai susidėjo iš skirtingų temperatūrų, laiko, prekursoriaus-druskos santykio ir Eu koncentracijos įtakos tyrimų. Gautų sintezės produktų fazinis grynumas bei kristalinė struktūra analizuota pasitelkiant Rentgeno spindulių difrakciją (XRD) bei Fourier transformacijos infraraudonąją spektroskopiją (FTIR). Morfologinės savybės stebėtos naudojant skenuojantį elektronų mikroskopą (SEM). Fotoluminescenciniai matavimai parodė liuminescencinius ypatumus. Nagrinėti mėginių sužadinimo bei emisijos spektrai. Taip pat atlikti fotoluminescenciniai tyrimai parodantys priklausomybę nuo temperatūros.

11

Vandenyje tirpūs beta-karoteno kompleksai: sintezės sąlygų optimizavimas

Indrė Bernatavičiūtė¹, Rūta Gruškienė¹, Erika Celitan¹, Tatjana Kavleiskaja², Jolanta Sereikaitė¹

¹*Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Vilnius, Lietuva*

²*Polimerų chemijos katedra, Chemijos institutas, Vilniaus universitetas, Vilnius, Lietuva*

Beta-karotenas – organinis raudonai oranžinės spalvos pigmentas, priklausantis karotenoidų šeimai, yra labai svarbi molekulė žmogaus sveikatai. Jis plačiai naudojamas maisto pramonėje, ypač kuriant funkcinį maistą ir maisto papildus. Tačiau β-karotenas yra nestabilus ir jautrus aplinkos pokyčiams, tokiems kaip pH, temperatūra, deguonis bei šviesa. Dar vienas svarbus limituojantis faktorius yra tai, kad β-karotenas yra hidrofobinis junginys, kuris netirpsta vandenyje, todėl jį sunkiau pritaikyti maisto, farmacijos ar kitose pramonės srityse. Siekiant įveikti šiuos apribojimus, kuriamos įvairios pernašos sistemos. Šiuo tikslu gali būti naudojami ciklodekstrinai - cikliniai oligosacharidai, sudaryti iš α-(1→4) sujungtų D-α-gliukopiranozės vienetų, ir turintys nepolinę vidinę ertmę, kurios dėka gali sudaryti kompleksus su lipofiliniais junginiais. β-karoteno įtraukimas į ciklodekstrinų agregatus yra patrauklus dėl netoksiškumo, mažo higroskopiškumo, stabilumo ir nebrangių ciklodekstrinų. Šiame darbe naudojamas geresniu tirpimu vandenyje pasižymintis 2-hidroksipropil-β-ciklodekstrinas.

Vandeniniai β-karoteno/2-hidroksipropil-β-ciklodekstrino agregatai buvo paruošti remiantis organiniame tirpiklyje ištirpinto karoteno pridėjimu į kaitinamą 2-hidroksipropil-β-ciklodekstrino dispersiją vandenyje ir po to sekančiu momentiniu organinės medžiagos išgarinimu. Norint, kad β-karotenas būtų kuo efektyviau įterpiamas į 2-hidroksipropil-β-ciklodekstrino molekulės vidinę ertmę, tiriami skirtingi tirpikliai β-karoteno tirpinimui (acetonas, heksanas, etanolis, dichlorometanas), reakcijos temperatūros (65, 75 ir 80 °C), bei skirtingos 2-hidroksipropil-β-ciklodekstrino koncentracijos (0,5; 5; 25 ir 50%). Remiantis įterpto β-karoteno kiekiu bei gautų kompleksų santykinio stabilumu nustatyta, kad geriausios sąlygos vandeniniams karoteno kompleksams ruošti yra šios: 25% 2-hidroksipropil-β-ciklodekstrino koncentracija vandenyje, 65 °C temperatūra ir acetonas β-karoteno tirpinimui. Šiuo atveju įterpimo efektyvumas siekia 88%. Procedūra patraukli dėl pakankamai trumpo agregatų paruošimo laiko, o gauti kompleksai gali rasti platesnį pritaikymą maisto pramonėje.

12

Magnio vitlokito sintezės iš amorfinio kalcio fosfato parametru optimizavimas

Gabrielė Eglė Budžytė, Rūta Raišlienė, Inga Grigoravičiūtė, Aivaras Kareiva, Aleksej Žarkov

Chemijos institutas, Vilniaus universitetas

Kalcio fosfatai yra dažniausiai naudojama keraminių biomedžiagų klasė, skirta kaulų regeneracijai dėl jų puikaus biologinio našumo ir cheminės sudėties panašumo į natūralų kaulą. Magnio vitlokitas (Mg-WH , $\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$) gali būti laikomas magniu pakeistas kalcio fosfatas, kuris natūraliai egzistuoja žmogaus organizme ir laikomas antru gausiausiai randamu biomineralu. Nepaisant didelio Mg-WH kiekio žmogaus organizme, jis nėra plačiai naudojamas klinikose, pagrindinės priežastys yra susijusios su šios medžiagos paruošimo iššūkiais. Vis dėlto pastaraisiais metais Mg-WH pritraukė žymiai daugiau dėmesio, nes daugelis tyrimų pranešė apie įvairias sintezės metodus ir Mg-WH charakteristikas. Buvo įrodyta, kad Mg-WH turi kai kurių pranašesnių savybių, palyginti su dažnai naudojamomis biomedžiagomis, tokiomis kaip kalcio hidroksiapatitas (HAp, $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) ar trikalcio fosfatas (TCP, $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$). Taip pat, išskirtinis kalcio fosfatų šeimos narys yra amorfinis kalcio fosfatas (ACP), kuris yra nestabilus ir labai reaktyvus dėl savo nekristalinės prigimties. Dėl šios priežasties ACP gali būti naudojamas kaip pirmtakas kitų fosfato pagrindo medžiagų sintezei, kaip šiuo atveju Mg-WH.

Šiame darbe nagrinėjama Mg-WH sintezė, naudojant ACP kaip pradinę medžiagą. ACP fazės konversija į Mg-WH vyksta vandeninėje terpėje esant Mg jonams. Terpė sudaroma iš Na_2HPO_4 ir NaH_2PO_4 tirpalų mišinio, kurios pH siekia 6,64. Sintezės vykdomos uždaruose buteliukuose džiovavimo spintoje ir purtiklyje. Išsamiai išnagrinėtas sintezės parametru, tokių kaip temperatūra, trukmė ir Mg jonų koncentracija, poveikis. Fazės kristališkumas ir grynumas buvo analizuoti naudojant rentgeno spindulių difrakciją ir FTIR spektroskopiją. Sintetintų produktų morfologiniai bruožai ir cheminė sudėtis buvo ištirti naudojant SEM/EDX analizę.

13

Investigation of microplastic sorption parameters and removal efficiency using lignin nanomaterials

Austėja Burbulytė, Ieva Uogintė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research

In the environment, various toxic pollutants such as heavy metal ions, dyes, and drugs. All of them have a hazardous effect due to their carcinogenicity and non-biodegradability. Nowadays, microplastic particles have received more and more attention. These particles can also be classified as pollutant due to their small size (from 1 μm to 5 mm), their ability to enter another organism, and their attraction to toxic compounds. Microplastic particles have been detected in the atmosphere, land, and water. In order to reduce the amount of microplastic particles in water, it is important to ensure efficient and sustainable removal of these particles. One possibility is to apply the sorption process.

The principal aim of this study was to investigate the removal efficiency of low-density polyethylene (LDPE) particles by changing the sorption time, solution pH, sorbate concentration, and amount of sorbent. The LDPE and lignin nanosorbent during sorption form a complex in water. The experiment was performed in the UV chamber. The sorption system was collected from water, LDPE granules, and lignin nanomaterial. The amount of water was constant 10 mL. The dependence of sorption on time was investigated by choosing different times from 5 minutes to 8 hours. Another parameter solution pH was selected in the ranges of pH 2 to pH 9. Different concentrations of LDPE granules were used for the sorbate concentration. Finally, the removal efficiency of LDPE was calculated by the mass differences before and after water filtration.

The primary results showed that lignin can be used to remove low-density polyethylene (LDPE) from water samples. The removal efficiency showed a dependence on time; for example, in 1 hour, it showed an efficiency of about 21%.

Acknowledgment. The project is co-financed from the funds of the European Social Fund (project No.09.3.3-LMT-K-712-23-263) under grant agreement with the Research Council of Lithuania (LMTLT).

14

Metilintų heterociklinių bazių sintezė ir jų metabolizmo tyrimai

Aušrinė Čekytė, Gabrielė Slaboševičiūtė, Aistė Ramanauskaitė, Vilija Lapinskaitė, Jaunius Urbonavičius, Daiva Tauraitė

Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Chemijos ir bioinžinerijos katedra

Modifikuoti nukleotidai, esantys ribonukleorūgščių (RNR) sudėtyje, yra labai svarbūs ląstelės išgyvenimui. Tam, kad RNR galėtų atlikti savo funkcijas, visose RNR rūšyse ji pasižymi didele chemine įvairove. Daugiausia modifikuotų nukleozidų randama transportinėje RNR – virš 170 modifikuotų nukleotidų rūšių. Uracilas yra viena iš labiausiai chemiškai modifikuojamų nukleobazių tRNR, jo dariniai sudaro apie 40% visų tRNR modifikacijų. Modifikacijos yra svarbios tRNR metabolizmui, stabilumui, struktūrai palaikyti, lokalizacijai bei pernešimui (Boccaletto et al., 2022). Šiuo metu RNR modifikacijos tyrinėjamos dėl jų svarbaus vaidmens sergant mitochondrijų defektų sukeltomis ligomis, piktybiniais navikais, esant neurologiniams sutrikimams (Suzuki, 2021). Nors tokios modifikacijos yra svarbios įvairių ligų atvejais, tačiau vis dar labai mažai žinoma apie modifikuotų nukleotidų ir atitinkamų heterociklinių bazių metabolizmą bei grįžimą į medžiagų apykaitą.

Šio mokslinio tyrimo metu buvo susintetintos metilintos pirimidino (uracilo ir citozino) bei purino (adenino ir guanino) heterociklinės bazės ir panaudotos fermentų, dalyvaujančių modifikuotų heterociklinių bazių katabolizme, atrankai. Tam panaudotos uracilo bei purino auksotrofija pagrįstos atrankos sistemos, kurios panašios į anksčiau aprašytas (Aučynaite et al., 2018). Jų pagalba galima atrinkti fermentus, paverčiančius atitinkamai modifikuotus pirimidinus ir purinus nemodifikuotais dariniais. Atrankos vykdymui sukurtos naujos metagenominės bibliotekos, išskiriant DNR iš aplinkos mėginių ir klonuojant į daugiakopijinius klonavimo vektorius. Gautos metagenominės bibliotekos yra naudojamos fermentų, dalyvaujančių modifikuotų heterociklinių bazių metabolizme, atrankai.

Padėka. Šis tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos (LMT) projektų S-ST-23-36 bei S-MIP-22-71 lėšomis.

Literatūros sąrašas

- Boccaletto, P., Stefaniak, F., Ray, A., ... & Bujnicki, J. M. (2022). MODOMICS: a database of RNA modification pathways. 2021 update. *Nucleic Acids Research*, 50(D1), D231–D235.
- Suzuki, T. (2021). The expanding world of tRNA modifications and their disease relevance. *Nature Reviews. Molecular Cell Biology*, 22(6), 375–392.
- Aučynaitė, A., Rutkienė, R., Tauraitė, D., Meškys, R., & Urbonavičius, J. (2018). Discovery of bacterial deaminases that convert 5-fluoroisocytosine into 5-fluorouracil. *Frontiers in Microbiology*, 9, 375129.

15

Ankstyvojo devono naujos kaulinių žuvų genties radimas Sibiro platformoje (Rusijoje)

Darja Dankina¹, Jonas Šečkus²

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Vytauto Didžiojo universiteto Gamtos mokslų fakultetas

Šiame darbe pristatoma viena iš ankstyvojo devono Actinopterygii genčių iš Diukaro upės atodangos Sibiro platformoje. Analizuojama medžiaga surinkta detaliai peržiūrėjus Lietuvos geologės ir paleontologės habil. dr. Valentinos Karatajūtės-Talimaa privačią žuvų fosilijų kolekciją. Ankstesniuose tyrimuose šios žuvų fosilijos buvo taksonomiškai identifikuotos kaip *Dialipina* (Schultze, 1968). Iš tikrųjų, *Dialipina* žvynai turi tam tikrus morfologinius karūnos panašumus, tokius kaip forma, dydis, storis ir jos ornamentas (daliniai). Tačiau, atlikti histologiniai tyrimai atskleidė šių fosilijų vidinės sandaros ypatumus ir esminius skirtumus su anksčiau lyginta *Dialipina* gentimi. Remiantis šiais tyrimais, buvo išsamiai aprašytos kaulinio audinio kaulinių ląstelių struktūra. Taipogi, buvo pastebėti itin stambūs pagrindinės sistemos dentininiai kanalai ties kaulinio ir ortodontinio audinio riba. Tokie histologiniai fosilijos ypatumai yra svarbūs genties taksonominiai požymiai, leidžiantys išskirti naują stipinpelekių žuvų gentį.

Rytų Sibiro platformos analizuojama medžiaga stratigrafiškai priklauso apatiniam devonui, Lochovskio aukštui, Kureikos svitai. Naujas stipinpelekių žuvų genties pavadinimas yra *Diukaria* gen. nov. Toks pavadinimas atspindi ichtiofaunos radimvietę, kurioje V. Karatajūtė-Talimaa atrado šias unikalias žuvų fosilijas. Habil. dr. Valentinos Karatajūtės-Talimaa kolekcijoje buvo rasti 226 analogiški žuvų žvynai. Šių paleoniskų šeimos žuvų žvynai yra dideli, masyvūs ir stori. Jų išorinis ganoino sluoksnis ornamentuotas ilgomis, tiesiomis ir skerspjūvyje apvaliomis keteromis. Šių žuvų fosilijų rinkinio nagrinėjimo metu, visa medžiaga buvo suskirstyta į šešis morfotipus pagal žvynų karūnos išorinius bruožus bei keterų kiekį, jų formą ir karūnos ornamentą. Šie morfotipai buvo aprašyti dr. Jono Šečkaus dar 2002 metais (Šečkus, 2002). Po ilgų diskusijų ir svarstymų buvo nuspręsta visus šešis morfotipus taksonomiškai identifikuoti ir priskirti prie naujos *Diukaria rectacostata* gen. et sp. nov. Iš lotynų kalbos žodis „*rectus*“ verčiasi kaip tiesus, o „*costa*“ (lot.) – ketera. Toks rūšies pavadinimas atspindi karūnos ornamento išskirtinius bruožus.

Atsižvelgus į paskutinius mokslinius persvarstymus dėl stipinpelekių žuvų fosilijų iš Diukaro upės atodangos (Rytų Sibiro regione) ir remiantis šioms fosilijoms atliktų histologinių tyrimų rezultatais, daromos tokios pagrindinės išvados: apatiniame devone, Lochovskio aukšte, Kureikos svitoje rasta ir taksonomiškai išskirta nauja paleoniskų žuvų gentis – *Diukaria* gen. nov. kartu su nauja šios genties rūšimi – *D. rectacostata* gen. et sp. nov.

Literatūra

Schultze H. P. 1968. Palaeoniscoidea-Schuppen aus dem Unterdevon Australiens und Kanadas und aus dem Mitteldevon Spitzbergens. *Bulletin of the British Museum, Geology*, 16: 341–368.

Šečkus J. 2002. Globalus Actinopterygii išplitimas remiantis literatūriniais duomenimis. Lietuvos devono Actinopterygii. Nauja apatinio devono gentis iš Diukaro upės atodangos (Sibiro platforma). Magistrinis darbas. Vilniaus Universitetas. Vilnius.

16

Analysis of Undoped and Europium-Doped Barium Borate

Marius Dzvinka, Martynas Misevičius

Institute of Chemistry, Vilnius University, Lithuania

Barium borate is a popular nonlinear optical material. It is often used to change the wavelength of laser light. This work concentrates on optical properties of europium-doped barium borate.

Specimens of undoped and europium-doped (concentrations ranging from 0,5% to 16%) barium borate were synthesized by solid-state synthesis. Barium carbonate, boric acid and europium (III) oxide were used as precursors. The samples were heated twice for one hour at 800 °C.

X-ray analysis showed that almost all samples were single-phased. Impurities were only observed in the specimen with 16% europium. The impurities could not be identified. Rietveld method was used to refine the unit cell of undoped barium borate (the model is shown in Figure 1).

The optical properties of the europium-doped samples were also measured. Europium(III)-doped samples exhibited usual luminescence. The strongest emission peak was observed at 611 nm wavelength (excited with 393 nm wavelength). The europium(II)-doped samples did not exhibit wide luminescence emission bands, thus it can be concluded that the europium ions were not fully reduced to divalent state during the synthesis.

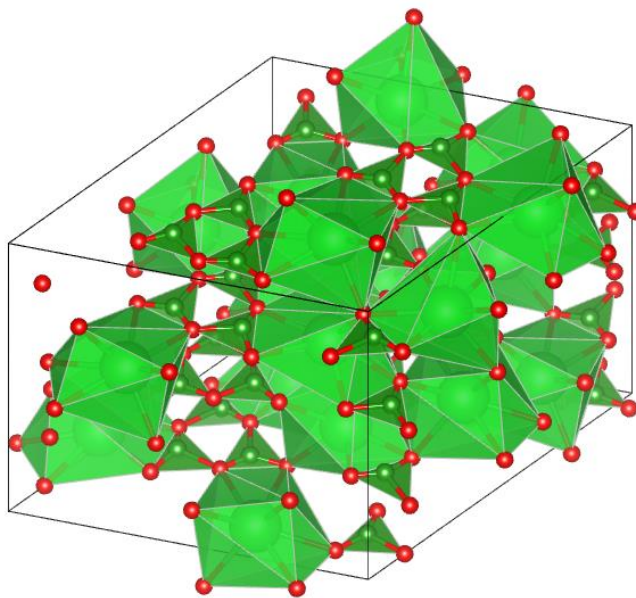


Figure 1. The refined model of the barium borate crystal unit cell.

17

Daugiaspalvė $\text{NaGdF}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Eu}^{3+}$ nanodalelių liuminescencija

Eglė Ežerskytė, Viktorija Vrubliauskaitė, Artūras Katelnikovas, Vaidas Klimkevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Šio tyrimo tikslas buvo ištirti Tb^{3+} ir Eu^{3+} jonų poros liuminescencines savybes NaGdF_4 matricoje, todėl, pirmiausiai, terminio konusodinimo metodu buvo susintetinti aštuoni $\text{NaGdF}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Eu}^{3+}$ junginiai, keičiant $[\text{Tb}^{3+}]:[\text{Eu}^{3+}]$ molinį santykį. Susintetintų junginių struktūrinės savybės bei dydis buvo ištirtos Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) ir skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM) metodais. Sužadinimo ir emisijos spektrai bei liuminescencijos gesimo kreivės buvo išmatuoti Edinburgh Instruments FLS980 moduliniu spektrometru.

XRD duomenų analizė patvirtino, kad susintetintos $\text{NaGdF}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Eu}^{3+}$ medžiagos yra heksagoninės kristalinės struktūros. Iš SEM nuotraukų nustatyta, kad skirtingos sudėties nanodalelės yra monodispersinės ir sferinės formos, o jų skersmuo neviršija 20 nm. Atlikus liuminescencijos tyrimus, nustatyta, kad $\text{NaGdF}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Eu}^{3+}$ nanodaleles galima sužadinti ne tik per Tb^{3+} ar Eu^{3+} jonus, bet ir per Gd^{3+} jonus. Nanodaleles žadinant per Eu^{3+} ($\lambda_{\text{ex}} = 394 \text{ nm}$), visi tirti mėginiai skleidžia raudoną šviesą, o žadinant per Gd^{3+} ($\lambda_{\text{ex}} = 272 \text{ nm}$) ar Tb^{3+} ($\lambda_{\text{ex}} = 368 \text{ nm}$) jonus, mėginių suminė emisijos spalva dėl įvairių energijos pernašos procesų nuosekliai kinta nuo žalios iki raudonos, priklausomai nuo $[\text{Tb}^{3+}]:[\text{Eu}^{3+}]$ molinio santykio mėginuose. Be to, iš $\text{NaGdF}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Eu}^{3+}$ junginių liuminescencijos gesimo kreivių buvo apskaičiuotos Tb^{3+} ir Eu^{3+} emisijos gesimo trukmės bei įvertintas $\text{Tb}^{3+} \rightarrow \text{Eu}^{3+}$ energijos pernašos efektyvumas, kuris siekė net 87%.

Tiriamas $\text{NaGdF}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Eu}^{3+}$ nanodaleles siekiama pritaikyti ląstelių ir audinių vaizdinimui arba panaudoti kaip saugos pigmentus, skirtus išvengti dokumentų, pinigų ar vaistų/vakcinų klastojimo.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. [S-MIP-22-68].

18

Air Quality and Environmental Health: Evaluating Pollution Sources and Mitigation Strategies

Mina Adel Shokry Fahim, Jūratė Sužiedelytė Visockienė

Department of Geodesy and Cadastre, Environmental Engineering Faculty, Vilnius Gediminas Technical University

The issue of air pollution has become more important leading to the need for comprehensive measures to assess and combat it. This research delves into sources of air pollution distinguishing between anthropogenic and natural sources and evaluates their effects on both health and the environment. It also explores the use of technologies like Geographic Information Systems (GIS) and Artificial Intelligence (AI) for monitoring air quality. Additionally, it examines international efforts to tackle air pollution. The study focuses on Vilnius's historic district old town analyzing levels of Particulate Matter (PM₁₀) Carbon Monoxide (CO) and Nitrogen Dioxide (NO₂). It assesses the success of implemented strategies and their impact on trends in this area.

This study examines the air quality in Vilnius Old Town, a UNESCO World Heritage site by analyzing more than 25,000 data points for CO, NO₂ and PM₁₀ from January 2020 to December 2022. It focuses on pollution patterns and the effects of regulations that have been adopted in the study area. The methodology starts with preparing the data importing time-based observations converting it for analysis and filtering out missing values. Outliers are then eliminated using the Interquartile Range method. A first degree polynomial curve fitting is applied to show the relationship between time and values using MATLAB.

The results show that there has been an improvement in the air quality during the time of the experiment study. The polynomial model demonstrates these patterns indicating a decrease in PM₁₀ and CO levels over time represented by coefficients for time at 0.0060 of the slope for PM₁₀. The Root Mean Square Error (RMSE) is 7.9644 µg/m³ and the Mean Absolute Error (MAE) is 6.3808 µg/m³ for PM₁₀, also showing a reduction with an RMSE of 0.095107 mg/m³ and a MAE of 0.076629 mg/m³ for CO. The NO₂ data followed a curve with RMSE and MAE values of 8.7975 µg/m³ and 7.0939 µg/m³ respectively noting relative stability over time, shed light on the importance of monitoring technologies and policy initiatives both in Lithuania and globally to tackle air quality issues emphasising the need for progress and collaborative efforts, underscoring the significance of monitoring and regulatory measures to further combat air pollution.

19

Lanthanum content effect on the crystalline composition for the $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ system

Giedrė Gaidamavičienė, Artūras Žalga

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

The synthesis of multi-component oxides is a complex and challenging task for many scientists. The different volatility and reactivity of the individual components of the synthesized metal oxide system influence the mechanism and intensity of the occurring reaction. Thus, the efficiency of the high-temperature solid-state reaction and the formation of the final oxide is determined by mixing the initial compounds, i.e., the degree of homogeneity. For this reason, the aqueous sol-gel synthesis technology is an excellent tool for the preparation of a homogeneous mixture of starting materials. This synthesis does not require expensive equipment and complex instrumentation. The aqueous environment creates favorable conditions for enhancing environmental friendliness. Furthermore, the main advantage of the aqueous sol-gel method is focused on achieving homogenization of the reaction mixture at the atomic level. Moreover, the inexpensive and environmentally friendly synthesis medium uses simple inorganic salts as starting reagents, often including elemental metal oxides. The low cost of these reagents significantly reduces the overall synthesis expenses and eliminates the need for organometallic compounds, which are characterized by increased volatility and cost.

Moreover, the control of the appropriate stoichiometry, which corresponds to the composition of the synthesized product, provides favorable conditions for obtaining a single-phase homogeneous multicomponent oxide. For this reason, in this work, the tartaric acid-assisted aqueous sol-gel synthesis of La–Mo–O tartrate gel precursor and the formation of high-temperature ceramic for $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ composition at 1000 °C were performed. To assess the influence of the metal ratio on the final ceramic formation and crystallization, this study also investigated the effect of lanthanum excess and deficiency on the composition of the crystalline mixture. In this case, the crystalline composition of the obtained ceramic was investigated by X-ray diffraction (XRD), and the obtained diffractograms were analyzed by applying the Rietveld refinement technique. The XRD results revealed the stabilization tendencies for the high-temperature $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ cubic phase at room temperature. It was also demonstrated that even a slight deviation from the ideal stoichiometry of the double oxide resulted in the formation of side crystalline phases for $\text{La}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ and La_2MoO_6 composition.

20

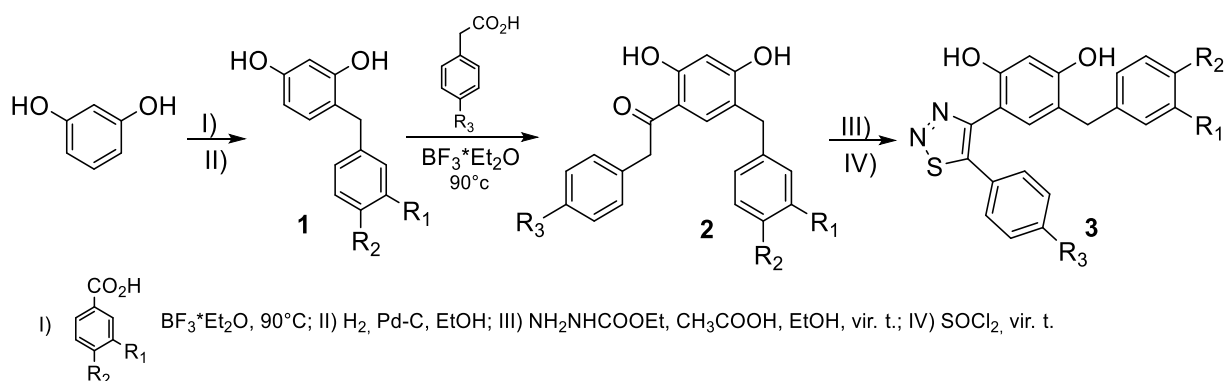
Tikslinių 6-(5-aryl-1,2,3-tiadiazol-4-il)-(4-benzil)benzen-1,3-diolių sintezė Hsp90 slopiklių paieškai

Gabija Griškonytė, Algirdas Brukštus, Ieva Žutautė

Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas

Šaperoninio baltymo Hsp90 slopikliai turi daug potencialo kuriant priešvėžinius vaistus. Hsp 90 kliento baltymai atlieka svarbų vaidmenį reguliuojant įvairias žmogaus ląstelių atliekamas funkcijas tokias kaip signalo perdavimas, baltymų pernaša ir ląstelės proliferacija. Tačiau šie baltymai yra linkę mutuoti ir per didelę jų ekspresiją yra pastebima vėžinėse ląstelėse, todėl Hsp90 slopinimas daug žada kovoje su vėžiu (Garg et al., 2016). Klinikinių ir ikiklinikinių tyrimų rezultatai rodo, kad Hsp90 slopikliai gali pagerinti kitų vėžio gydymo būdų, tokių kaip chemoterapija ar imunoterapija, efektyvumą (Li & Luo, 2023). 4,5-Diaril-1,2,3-tiadiazolai yra perspektyvios priešvėžinės aktyviosios medžiagos, o daugelis panašių junginių dar net nėra ištirti (Irfan et al., 2021). Šio tyrimo tikslas yra susintetinti 6-(5-aryl-1,2,3-tiadiazol-4-il)-(4-benzil)benzen-1,3-diolius **3**, kurie galėtų veikti kaip Hsp90 slopikliai.

Tikslinių junginių sintezė atliekama penkiais etapais. Pirmasis ir trečiasis sintezės etapai yra panašūs, jų metu atliekamas Friedelio-Craftso acilinimas. Atlikus pirmąją reakciją gauti ketonai yra redukuojami su Pd/C, H₂ dujų atmosferoje ir gaunami 4-(benzil)benzen-1,3-dioliai **1**. Paskutinis sintezės etapas yra Hurd-Mori ciklizacijos reakcija. Į išskirtus junginius **2** pridedama etilkarbazato, penkianaris žiedas ciklizuojamas tionilo chloridu ir sėkmingai išskiriami reakcijos produktai **3**.



1 pav. Sintezės schema.

Literatūra

Garg G., Khandelwal A., Blagg B. S.J. (2016). Anticancer Inhibitors of Hsp90 Function: Beyond the Usual Suspects. *Adv Cancer Res.*, 129, 51–88.

Irfan A., Ullah S., Anum A., Jabeen N., Zahoor A. F., Kanwal H., Kotwica-Mojzzych K., Mojzzych M. 2021. Synthetic Transformations and Medicinal Significance of 1,2,3-Thiadiazoles Derivatives: An Update, *Appl. Sci.*, 11, 5742.

Li Z., Luo Y. (2023). HSP90 inhibitors and cancer: Prospects for use in targeted therapies (Review), *Oncology Reports*, 49 (1), 6.

21

Skirtingą paviršiaus krūvį turinčių nizinu kapsuliuotų dalelių tyrimas

Rūta Gruškienė¹, Jolita Pachaleva¹, Alma Bočkuvienė², Tatjana Kavleiskaja², Jolanta Sereikaitė¹

¹Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas

²Polimerų chemijos katedra, Chemijos institutas, Vilniaus universitetas

Dėl išaugusio vartotojų susidomėjimo minimaliai apdorotu maistu ir „žalesniais“ maisto ir gėrimų priedais, daugiau dėmesio sulaukia ir natūralios antimikrobinės medžiagos, išskiriamos iš augalų ar mikroorganizmų. Viena iš tokių medžiagų yra nizinas - bakteriocinų klasei priklausantis natūralus antimikrobinis peptidas, kurį gamina *Lactococcus lactis* kamienų porūšis *lactis*.

Nizinas yra vienintelis bakteriocinas įteisintas kaip maisto priedas E234 ir patvirtintas kaip saugus. Tačiau proteolizė, aplinkos stresas ar kitos maisto produktuose esančios medžiagos gali susilpninti jo bakteriocidinį poveikį. Siekiant išvengti šių šalutinių procesų ir praplėsti nizino panaudojimo galimybes gali būti pritaikomos kapsuliuavimo technologijos, kai aktyvi medžiaga įterpiama į apsauginės medžiagos matricą, ar apgaubiamą jos apvalkalu. Vienas iš bakteriocino kapsuliuavimo būdų yra biopolimerų panaudojimas. Kapsuliuavimui gali būti naudojami tokie biopolimerai kaip chitozanas, alginatas, celiuliozė, pektinai ir kt., bei jų deriniai.

Šio darbo tikslas – sukurti skirtingo krūvio trikomponentes nizino-pektino-chitooligosacharidų daleles, ištirti jų savybes ir stabilumą. Pirmiausia kompleksavimo metodu paruošiamos dvikomponentės nizinu kapsuliuotos pektino nanodalelės. Dalelių sintezei naudojami trys skirtingo metilinimo laipsnio pektinai. Vėliau nizino-pektino dalelės dengiamos skirtingos koncentracijos chitooligosacharidais. Komponentų sąveika įrodyta FT-IR spektroskopijos pagalba. Tolimesnei analizei pasirinktos dvikomponentės nizino-pektino, bei teigiamą ir neigiamą paviršiaus krūvį turinčios trikomponentės nizino-pektino-chitooligosacharidų dalelės, kur chitooligosacharidų koncentracija atitinkamai yra 0,025 ir 0,3 mg/mL. Atliekami gautų dalelių dydžio, zeta potencialo, proteolitinio stabilumo tyrimai. Nanodalelės pasižymi ilgalaikiu stabilumu 4 °C temperatūroje, be to, kapsuliuavimas padidina nizino proteolitinį stabilumą. Skirtingą paviršiaus krūvį turinčios nizino dalelės taip pat galėtų pasitarnauti tiriant kokią įtaką krūvis turi antimikrobinių peptidų atsipalaidavimui ar sąveikai su mikroorganizmais.

22

Synthesis and Investigations of Boron and Cerium Doped Lutetium and Gadolinium Aluminum Garnets

Greta Inkrataitė¹, Jan-Niklas Keil², Thomas Jüstel², Ramūnas Skaudžius²

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

²*Department of Chemical Engineering, Münster University of Applied Sciences*

In order to convert high-energy radiation, such as gamma or X-rays, into visible light scintillators are needed. Cerium or praseodymium doped lutetium aluminum garnets have high density, thermal stability, rather efficient luminescence processes which are needed for a good scintillator. However, further optimization of short decay time is needed. Luminescence decay is important because if it is very short then more signals can be measured within a defined timeframe, resulting in a better resolved and higher quality image in CT devices. One way to improve materials' properties is to doping compounds with different elements. One of these elements is boron. Boron can be used as a flux, also B^{3+} has a suitable neutron capture cross section and can help absorb gamma radiation. Lutetium aluminum scandium garnets doped with Ce^{3+} and/or B^{3+} were obtained as a result. These garnets are synthesized and studied for the first time. In this work, the phase purity and morphology of the samples were analysed with X-ray diffraction, SEM. Photoluminescence properties such as emission, excitation spectra, decay curves, quantum efficiency and temperature dependency spectra have been investigated. Radioluminescence was also measured. The positive impact of boron addition into the garnet structure on the luminescence properties will be discussed in detail.

Acknowledgments. The study was supported by German Academic Exchange Service (DAAD) scholarship.

23

Na_{1-x}AlGe_{1-0,5x}O₄, x= Bi³⁺, Ce³⁺, Dy³⁺, Eu³⁺, Pr³⁺, Sm³⁺, Tb³⁺ legiruotų mėginių liuminescencijos tyrimas

Gabija Janušauskaitė, Martynas Misevičius

Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

Baltos šviesos diodai (LED) yra nepaprastai svarbūs šiuolaikiniame apšvietime dėl savo efektyvumo ir ilgaamžiškumo. LED'ai plačiai naudojami ne tik šviesos šaltiniams, tačiau ir įvairiems elektroniniams įrenginiams, todėl siekiama ieškoti naujų medžiagų ir inovacijų, siekiant padidinti LED efektyvumą bei sumažinti energijos sąnaudas. Legiruoti germanatai gali tapti potencialūs kandidatai tobulinant LED technologiją, be to gali būti pritaikomi skirtingoms šviesos spektro reikmėms, kas leidžia kurti pritaikytus sprendimus įvairioms panaudojimo sritims.

Natrio aliuminio germanatas NaAlGeO₄ yra monoklininės struktūros, turintis simetrijos erdvinę grupę P2₁/n. NaAlGeO₄ gardelės parametrai a = 8,783 Å, b = 15,432 Å, c = 8,252 Å, o gardelės kampai alfa = 90,00°, beta = 90,00°, gama = 90,09°. NaAlGeO₄ pasižymi unikaliomis optinėmis ir elektroninėmis savybėmis, įskaitant didelį šiluminį stabilumą, stiprią fotoluminescenciją ir didelį skaidrumą regimajame ir artimajame infraraudonajame diapazone. Dėl savo sudėties ir kristalinės struktūros NaAlGeO₄ legiruotas retųjų žemių jonais, gali būti pritaikomas šviesos diodams.

Šio tyrimo metu, taikant kietafazių reakcijų sintezės metodą, buvo susintetinta seka Na_{1-x}AlGe_{1-0,5x}O₄:X bandinių, legiruotų įvairiomis X=Bi³⁺, Ce³⁺, Dy³⁺, Eu³⁺, Pr³⁺, Sm³⁺ ir Tb³⁺ jonų koncentracijomis. Gauti mėginiai charakterizuojami taikant rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) metodą ir fotoluminescencijos (PL) matavimus, įskaitant sužadavimo ir emisijos spektrus, liuminescencijos gesimo laiką ir kvantinį našumą. XRD analizė parodė, kad visus jonus pavyko įterpti į NaAlGeO₄ kristalinę struktūrą be priemaišinių fazių. PL matavimų rezultatai atskleidė specifines kiekvieno jono emisijos charakteristikas: Eu³⁺ pasižymi raudona emisija legiruotuose bandiniuose, Dy³⁺ skleidžia geltoną šviesą, Bi³⁺ ir Ce³⁺ mėlyną, Pr³⁺ raudonai oranžinę, Sm³⁺ oranžinę ir Tb³⁺ žalią emisiją.

Padėka. Šis tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos (LMT) Studentų mokslinės praktikos projekto Nr. S-ST-23-193 lėšomis.

24

Aqueous sol-gel synthesis and XRD investigation of lanthanide orthoferrite series

Justinas Januškevičius, Živilė Stankevičiūtė, Aivaras Kareiva

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

Rare-earth elements and compounds containing them have become an irreplaceable part of many modern technologies. This is mostly due to their unique electronic structure enabling properties that are difficult to achieve otherwise, such as excellent luminescence, magnetic properties, catalytic properties and many others.

Nevertheless, despite their widespread use and scientific interest, the field of rare-earth is large enough that more research is still needed in all areas – discovering new materials, new synthesis routes, or even wider trends in their property-to-structure relation, which can sometimes be lacking even to seemingly well-established and well-known materials.

Orthoferrites are one of the classes of compounds containing rare-earth elements. They are compounds with an orthorhombic perovskite structure and a general formula of $RFeO_3$, where R is the rare-earth element. Due to the malleable nature of the perovskite structure, it is in theory quite possible to fine-tune the lattice parameters and electronic structure by carefully choosing the right constituents, or their combinations, in turn enabling new and interesting properties. As such, there is always a need for more exploration in this area.

In this work, a series of lanthanide orthoferrites were chosen for synthesis using a simple aqueous sol-gel synthesis method. Metal nitrates were used as precursors (or metal oxides first converted into nitrates) and ethylene glycol as the complexing agent. The general synthesis method involved first dissolving the nitrates, then adding ethylene glycol, and allowing the solution to stir for 2 hours at 60°C. Then, the solution was evaporated until a gel formed, which was then dried, ground up and calcinated, resulting in the final material. The final material was then investigated by XRD, analysis of data and emergent trends was performed.

Tranzitinės klimato kaitos rizikos

Justina Kapilovaitė¹, Darius Daugvila²

¹*Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Geomokslų institutas*

²*Vilniaus universitetas, Matematikos ir informatikos fakultetas, Matematikos institutas*

Pereinamojo laikotarpio (tranzitinės) rizikos kyla pereinant nuo iškastinio kuro ar kitos šiltnamio efektą sukeliančias dujas (ŠESD) išskiriančios veiklos prie švarios ir atsinaujinančios energetikos. Tranzitines rizikas galima suskirstyti į 4 subkategorijas: teisinė ir politinė rizika, technologijų rizika, rinkos rizika ir reputacijos rizika.

Šio tyrimo tikslas apžvelgti klimato kaitos tranzitines rizikas, kylančias Lietuvos ekonominiams sektoriams, ir jas įvertinti naudojantis šio darbo autorių sudaryta metodika. Tyrime pasirinkta analizuoti paslaugų sektorių, kadangi jis Lietuvos ekonomikoje užima didžiausią dalį. Iš paslaugų sektoriaus analizei atrinktos šešios didžiausią pelną turinčios ekonominės veiklos rūšys: (1) apdirbamoji gamyba, (2) didmeninė ir mažmeninė prekyba, (3) elektros, dujų, garo tiekimas ir oro kondicionavimas, (4) informacija ir ryšiai, (5) statyba bei (6) transportas ir saugojimas. Kiekvienai ekonominės veiklos rūšiai atrinkta 30-ies įmonių, kurios 2021 metais gavo didžiausias pajamas, imtis. Iš atrinktų įmonių atmestos tos, kurių veikla tiesiogiai susijusi su žaliaja energetika, todėl tranzitinių rizikų analizė atlikta 155 įmonėms. Tyrime nagrinėtos atrinktų įmonių 2030-2050 klimato ir energetikos strategijos, tikrinta ar ŠESD ataskaitose skaičiuojamas CO₂ pėdsakas pagal tris sritis, taip pat patikrinti finansiniai rodikliai - įmonių grynas pelningumas bei skolinto ir nuosavo kapitalo santykis. Papildomas balas buvo skiriamas dukterinėms įmonėms, kurios gali tikėtis finansinės paramos pereinamuoju laikotarpiu bei spartesnio naujos politikos įgyvendinimo visoje korporacijoje. Taip pat remiantis Europos centrinio banko tyrimo rezultatais (ECB/ESRB, 2021) kiekvienai ekonominės veiklos rūšiai buvo priskirtas balas spartaus perėjimo nuo iškastinio kuro ilgalaikio poveikio vertinimui. Atlikus analizę kiekvienai įmonei priskirta tranzitinė rizika: labai didelė, didelė, vidutinė, maža arba labai maža. Gauti rezultatai pateikiami apibendrinus rizikas pagal ekonominės veiklos rūšis.

Tyrimo rezultatai rodo, jog Lietuvos paslaugų sektoriuje labai didelė tranzitinė rizika kyla įmonėms užsiimančioms transporto ir saugojimo bei statybos veiklomis. Nustatyta, jog statybos veikla užsiimančios Lietuvos įmonės dažniausiai neturi 2030-2050 klimato ir energetikos strategijų bei neatsižvelgia į galimas rizikas susijusias su klimato kaita. Didelė rizika kyla didmenine ir mažmenine prekyba bei energetine veikla užsiimančioms Lietuvos įmonėms. Mažiausia rizika (maža) nustatyta informacijos ir ryšių veiklą vykdančioms įmonėms. Informacinių technologijų įmonių finansiniai rezultatai geri, daugelis jų turi parengusias 2030-2050 klimato ir energetikos strategijas bei joms kylanti ilgalaikio poveikio rizika nedidelė. Atliktas tyrimas svarbus kaip ankstyvojo įspėjimo indikatorius apie egzistuojančias tranzitines rizikas ir didėjančią poreikį joms tinkamai pasiruošti.

Literatūra

ECB/ESRB Project Team on climate risk monitoring (2021). Climate-related risk and financial stability. ESRB.

26

Essential oil chemistry from the geological standpoint: influence of the biological effect

Greta Kasputė¹, Urtė Prentice^{1,2}

¹Department of Nanotechnology, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology

²Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry, Vilnius University

Essential oils (EOs) are volatile liquids that are derived from plants. These oils possess unique compositions that are influenced by geography and environmental conditions. As a result, biological effects of EOs, such as antimicrobial, antiparasitic, antiviral, anti-inflammatory, anti-tumor, antioxidant, or spasmodic activities, vary based on the plant's origin. Despite many positive biological effects, EOs have sparked debates on their sustainability and impact on microalgae, crustaceans, and fishes. Therefore, exploring the chemistry of EOs related to geological factors impact is crucial.

To identify the scientific literature regarding the biological impact of EOs, we conducted a comprehensive search as the main method. Special attention was given to exploring the association between EOs and specific plant regions, as well as their potential adverse effects on the natural environment.

The composition of EOs can vary significantly due to environmental conditions, geographical factors, climate variations, and seasonal fluctuations. These factors necessitate meticulous standardization processes during oil production to ensure consistent quality. For instance, the quantitative and qualitative composition of *Lippia alba* L. EO differs between monthly leaf regrowth harvests within the same region or across different regions, exhibiting variations in constituents such as geranial, linalool, carvone, limonene, piperitone, 1,8-cineole, caryophyllene oxide, and p -cymene. Consequently, these compositional variances give rise to variations in biological activity corresponding to changes in the concentrations of these chemical constituents.

In conclusion, the findings of this study shed light on several important aspects of EOs. Firstly, it is evident that the chemical composition of EOs is greatly influenced by geological factors such as climate variability, geographical location, and environmental conditions encompassing temperature, light exposure, and drought. Secondly, the biological activities of EOs are tied to their specific chemical composition. Alterations in the concentrations of particular components within EOs can either enhance or diminish their medicinal properties. Finally, substantial evidence supports the notion that EOs can have detrimental effects on aquatic and terrestrial organisms alike. Therefore, responsible utilization of EOs is of utmost importance in order to minimize any potential harm caused by these substances.

27

Kompleksiniai klimato įvykiai rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje 1950–2022 metais

Laurynas Klimavičius, Egidijus Rimkus

Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Pastaraisiais metais nustatyta, kad didžiausias neigiamas socioekonominis poveikis, susijęs su klimato ar orų reiškiniais, sukiamas, kai keli fiziniai procesai vyksta tuo pat metu (pvz. sausra ir karščio banga) arba prieš tai prasidėjęs procesas sustiprina kito reiškinio poveikį (pvz. šalnos vėlyvą pavasarį, prasidėjus vegetacijos sezonui). Tokie įvykiai vadinami kompleksiniais klimato įvykiais, o trys iš jų analizuojami šiame tyrime: kompleksiniai sausros ir karščio bangos, kompleksiniai vėjo greičio ir kritulių kiekio bei vėlyvų šalnų įvykiai. Šio darbo tikslas – įvertinti šių kompleksinių įvykių pasikartojimą 1950–2022 metais rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje.

Darbe tirta teritorija nuo 53.5° iki 59.5° š. pl. ir nuo 20.0° iki 28.5° r. ilg. Tyrime panaudoti ERA–5 reanalizės paros vidutinės, maksimalios, minimalios oro temperatūros, kritulių kiekio ir maksimalaus vėjo greičio duomenys. Duomenų gardelės dydis 0,25 x 0,25°. Kompleksinės sausros ir karščio bangos tirtos birželio–rugpjūčio mėnesiais, vėlyvos šalnos – kovo–birželio mėnesiais, o kompleksiniai vėjo greičio ir kritulių kiekio įvykiai – visais metų mėnesiais.

Sausros išskirtos naudojant SPI (angl. *Standardized Precipitation Index*), o karščio bangos – apskaičiavus maksimalios oro temperatūros 90-to percentilio reikšmę kiekvienai vasaros dienai kiekvienai tyrimo arealo gardelei. Jei ir sausra, ir karščio banga buvo tą pačią dieną – atitinkamoje gardelėje išskirtas kompleksinis įvykis. Analogiškam kompleksinio vėjo greičio ir kritulių kiekio įvykio išskyrimui kiekvienai tyrimo arealo gardelei apskaičiuotos viso tyrimo laikotarpio maksimalaus vėjo greičio bei kritulių 98-to percentilio vertės. Kompleksinis įvykis fiksuojamas kai abi reikšmės viršijamos vienu metu. Vėlyvos šalnos įvykiai – atvejai, kai tų metų paskutinė šalna fiksuota jau prasidėjus vegetacijos periodui. Siekiant įvertinti bendrą visų kompleksinių įvykių pasikartojimą atskirais tyrimo laikotarpio metais bei skirtingose gardelėse, kiekvieno darbe tiriamo kompleksinio įvykio pasikartojimas atskirose gardelėse bei visoje tyrimo teritorijoje normalizuotas taikant *min–max* metodą.

Kompleksinis sausros ir karščio bangos įvykis didžiausią tiriamos teritorijos dalį apėmė ir ilgiausiai truko 1994 ir 2002 metais, o kompleksiniai vėjo greičio bei kritulių kiekio ir vėlyvos šalnos įvykiai – 1962 metais. Iš viso daugiausiai kompleksinių klimato įvykių fiksuota 1994, 1971 ir 2005 metais. Tyrimo laikotarpio metu jų skaičius išaugo, tačiau gauti pokyčiai nedideli ir statistiškai nereikšmingi. Dažniausiai kompleksiniai klimato įvykiai pasikartojė Žemaičių aukštumoje. Ypač daug čia buvo kompleksinių vėjo greičio ir kritulių kiekio įvykių. Kompleksiniai sausros ir karščio bangos įvykiai daugiausiai kartų fiksuoti rytinėje tyrimo arealo dalyje, o vėlyvos šalnos – centrinėje Estijoje bei pietvakariniame tiriamo regiono pakraštyje.

Cartographic reconstruction of administrative boundaries for the Catholic Church

Samanta Klusytė

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

The Catholic Church is administered based on its territorial units. This is defined by the Catholic Church's *acquis* also known as the Code of Canon Law (1983). The structure of the administrative division of the Catholic Church (hereinafter, the administrative territories of the Catholic Church – ATCC) begins with the smallest administrative unit – a parish. The number of parishes and the location of each parish depend on the configuration of the ATCC. Number of available maps of parishes is limited not only in Lithuania, but also in the world. The study examines the availability, completeness, and quality of a data of parish boundaries in Lithuania. This study contributed to the creation of a unified ATCC geospatial database in Lithuania that would contribute to more convenient administration of territories and allow residents to know exactly which parish they are assigned to. Also, ATCC geospatial data will be applicable to historical, genealogical and sociological researches, because detail information about residents is stored in parishes. The data that describes boundaries of separate parishes consists of lists of settlements and topographical descriptions for boundaries. The datasets are stored in different dioceses (the higher tier ATCC which consists of parishes) or in separate parishes. All the data is stored as paper documents or as verbal evidence. Only three out of seven of all dioceses have published information about boundaries of their parish. The typical information, that is published on websites run by parishes, consists of list of settlements, enriched by several topographical descriptions of the boundaries. These are the main sources of information that have been used to prepare geospatial data to determine boundaries. All settlements of parishes were searched and checked against the available information in the geographical database of the Register of Address of the Republic of Lithuania. All settlements found in the official register have been classified as settlements that belong to certain parish and form an area of a parish. When assessing the quality of the data, it was noted that the data are not accurate and it was difficult to interpret. Inaccuracies cannot be avoided when data of parish boundaries is based solely on the settlement lists. Uninhabited areas intervene between settlements. Then boundaries are drawn according to permanent natural objects or a network of roads. However, such interpretation requires additional adjustments and updates. The clergy that administers the ATCC must contribute to adjusting the boundaries of parishes. Unfortunately, the dioceses of the Catholic Church of Lithuania are reluctant to actively take part in the digitization of the ATCC boundaries. Semi structured interviews demonstrated that reluctance may be linked to the idea that it would be an extremely resource-intensive and not necessarily successful task. Nevertheless, an online map is a tool for observing and analysing the ATCC boundaries. Web Feature Service enables us to edit, change parish boundaries at any time. The Cartographic reconstruction of administrative boundaries for the Catholic Church does not have a timeframe for implementation. Is sought for as accurate data as possible, which would not be possible without active involvement of Catholic Church clergy.

Skystos kompleksinės trąšos ir pagrindinės jų savybės

Karina Kuzborskaja, Kristina Jančaitienė

Kauno technologijos universiteto Cheminės technologijos fakulteto Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra

Vis dažniau visuomenėje galima išgirsti susirūpinimą išmetamų atliekų kiekiais ir energijos nuostoliais, paremtą žaliosios (tvariosios) chemijos ir žiedinės ekonomikos principais, kurie kalba apie gamybos procesų optimizavimo svarbą. Pramonėje gaminat mineralines trąšas, kaip gamybos atlieka susidaro skystoji fazė, kurioje lieka augalų augimui ir vystymuisi reikiamų makroelementų: azoto (N), fosforo (P), kalio (K). Dėl šios priežasties šią gamybos proceso liekaną galima laikyti šalutiniu produktu, kurį būtų naudinga panaudoti skystosioms kompleksinėms trąšoms (SKT) gauti. SK trąšos yra efektyvesnės negu biriosios, nes augalai lengviau ir greičiau pasisavina reikiamas maisto medžiagas per šaknų sistemą ar lapus. Taip pat SKT reikalauja mažesnių gamybos kapitalinių įdėjimų, nes yra pritaikytos paprastesnės ir universalesnės technologijos ir techninė priežiūra (Sviklas ir kt., 2008).

Šio darbo tikslas – ištirti skystųjų kompleksinių trąšų, pagamintų iš kalio dihidrofosfato trąšų gamybos metu susidariusių šalutinių produktų – skystosios fazės – chemines ir fizikines savybes. Tyrimui buvo naudoti keturi SKT mėginiai pagaminti tokiomis pačiomis sąlygomis, skyrėsi tik gamybos temperatūra (30 °C, 40°C, 50°C, 60°C) ir trukmė (1,5 h arba 2 h).

Atliekant eksperimentą buvo nustatytos gana aukštos tirpalų kristalizacijos temperatūros, kurios neleidžia patogiai laikyti ir naudoti šių trąšų, todėl kristalizacijos temperatūrą buvo bandoma mažinti pridėdant azoto turinčių medžiagų, tuo pačiu praturtinant trąšas azotu.

Tyrimo metu nustatyta SKT azoto, fosforo ir kalio koncentracijos, tirpalų pH, tankis, klampa bei kristalizacijos temperatūra. Pastebėta, kad 40 °C temperatūroje gautos SKT išsiskyrė savo fizikinėmis savybėmis (žemiausia kristalizacijos temperatūra) ir chemine sudėtimi (azoto ir fosforo kiekiai neženkliai, bet skyrėsi nuo kitų). Taip pat pavyko nežymiai sumažinti SKT kristalizacijos temperatūrą pridėjus į trąšas karbamido.

Literatūra

Sviklas A. M., Paleckienė R., Šlinkšienė R. *Sudėtinės trąšos*. Vilnius, 2008.

30

Poliesterinių plėvelių gavimas, tyrimas ir taikymas audinių inžinerijai

Evaldas Kvietkauskas, Saulutė Budrienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Audinių inžinerijos pagrindinis tikslas yra sukurti funkcionalius karkasus, kurie atkurtų bei palaikytų pažeistų audinių ar organų struktūrą ar juos pagerintų. Svarbu, jog šie karkasai būtų biosuderinami, bioskaidūs ir pasižymėtų reikiamomis mechaninėmis savybėmis (O'Brien, 2011). Iš poliesterių pagaminti karkasai yra bioskaidūs, biosuderinami, o jų mechanines savybes galima modifikuoti. Svarbu, jog šie poliesteriai galėtų sudaryti tinklinę struktūrą, o destrukcijos metu susidarę junginiai nebūtų pavojingi organizmui ir pasišalintų iš jo arba dalyvautų medžiagų apykaitoje (Bettinger, 2011). Siekiant gauti elastingas ir hidrofilines plėveles, poliesterių sintezei tikslinga būtų papildomai naudoti a,w-dihidroksi-poli(dimetilsiloksana) (PDMS) ir obuolių rūgštį (OR). Šio darbo tikslas – susintetinti nesočiuosius poliesterus, pagaminti plėveles ir ištirti jų savybes.

Darbe atlikta poliesterių sintezė naudojant azelaino rūgštį, OR, maleino rūgšties anhidridą, dietilenglikolį bei PDMS. Poliesterių struktūra įrodyta BMR ir FT-IR analize. Dervų BMR rodo, jog jų sudėtis yra analogiška pradiniam mišiniui. FT-IR spektre matomos būdingos naudotų pradinio mišinio medžiagų juostos.

Plėvelės gautos susiuvant nesočiuosius poliesterus su kietinimo priedais – monomerais, naudojant fotoiniatorių bei UV spinduliuotę. Atlikti plėvelių brinkumo laipsnio ir tirpumo heksane, etanolyje bei vandenyje tyrimai, FT-IR analizė. Gautų plėvelių mechaninės savybės priklauso nuo jų formavimo sąlygų. Plėvelių Jungo modulis, priklausomai nuo kietinimo priedų, svyruoja nuo 0,2 MPa iki 170 MPa, santykinis pailgėjimas – nuo 0% iki 190%. Plėvelių kontaktinis kampas yra mažesnis už PDMS ir svyruoja nuo 70° iki 99°. SEM analizė parodė, jog plėvelės yra lygios, silicis pasiskirstęs tolygiai. Iš termogravimetrinės analizės duomenų matyti, jog plėvelių terminis skaidymas vyksta dvejomis stadijomis.

Literatūra

- O'Brien, F. J. (2011). Biomaterials & scaffolds for tissue engineering. *Mater. Today*, 14 (3), 88–95.
- Bettinger, C. J. (2011). Biodegradable elastomers for tissue engineering and Cell–Biomaterial interactions. *Macromol. Biosci.*, 11 (4), 467–482.

31

Porosity of silica synthesized using different silica precursors

Gerardas Laurinavičius, Vilius Poškus

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Porous materials play an important role in material science, especially in sample preparation techniques like solid phase extraction and microextraction. These methods rely on interaction between two different phases – a solid sorbent and a liquid or a gas – because of that, surface area of the sorbent plays an important role. This can be achieved by making a material with porous structures.

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 or TEOS orthosilicates) porogen and a catalyst. After the reaction, organic porogen is removed by heating or using a solvent extraction method. The latter steps involve surface modification via variable reactions which can give a desired functionality and selectivity. One functionality can be an amino group which is usually introduced using an amino functionalized silane APTES after the synthesis of porous silica monolith. In this study we tried to make porous silica using different synthesis methods that involved: three different silica sources (TMOS, TEOS and APTES), different reaction catalysts (acid, urea, and self-catalysis) and two different porogens P123 and CTAB. The synthesis methods were selected and modified according to the porogens used in the original scientific publications.

Moreninių smulkių gruntų dinaminės savybių nustatymas geofiziniais metodais

Rytis Lažaunikas, Domas Gribulis, Saulius Gadeikis, Vytautas Samalavičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Šiuolaikinių inžinerinių objektų projektavime būtina įvertinti pačių statinių arba išorinių vibracijų – seisminių reiškinių, vėjo, bangų įtaką būsimam pagrindui. Projektuojant pamatus statiniams, kurie bus veikiami dinaminės apkrovos, reikia žinoti rečiau naudojamus rodiklius: šlyties modulį prie itin mažų deformacijų G_{max} , Puasono koeficientą μ , dinaminę deformacijų modulį E_{dyn} . Šiuos dinaminis parametrus galima nustatyti tiesioginiais metodais laboratorijoje ir netiesiogiai atliekant bandymus lauko sąlygomis (*in situ*). Žinant išilginės V_p ir skersinės V_s bangų greičius, dinaminiai parametrai gali būti apskaičiuoti empirinėmis formulėmis.

Sekliosios seismikos gręžinyje bandymais gaunami skersinės ir išilginės bangų greičiai, kurių pagalba galima įvertinti grunto tipą, jo tankumą ar stiprumą, poringumą, prisotinimo vandeniu laipsnį, gebą praskysti ir standumą.

Šio tyrimo tikslas – nustatyti viršutinio pleistoceno moreninių smulkių gruntų, esančių Alytaus, Anykščių, Naujosios Akmenės ir Telšių rajonuose, išilginės V_p ir skersinės V_s bangų greičius bei nustatyti jų koreliaciją su nedrenuotu kerpamuoju stipriu c_u , poringumo koeficientu e ir gamtine drėgme w .

Pagal laboratorinius rezultatus tiriamasis gruntas yra mažo plastiškumo smėlingas molis (moreninis), standžios ir labai standžios konsistencijos. Išmatavus V_p ir V_s bangų greičius buvo atlikta turimų duomenų analizė ir nustatyta glaudi priklausomybė tarp šių bangų greičių bei nedrenuoto kerpamojo stiprio c_u , poringumo koeficiento e ir gamtinės drėgmės w .

Šiame darbe sekliosios seismikos gręžinyje metodu nustatyti V_s ir V_p bangų greičiai, sudarytos koreliacinės lygtys – stiprus teigiamas ryšys tarp nedrenuoto kerpamojo stiprio c_u ir abiejų bangų greičių: $V_s R$ (koreliacijos koeficientas) = 0,88 ir $V_p R$ = 0,8; stiprus neigiamas ryšys tarp poringumo koeficiento ir abiejų bangų greičių: $V_s R$ = 0,84 ir $V_p R$ = 0,81; stiprus neigiamas ryšys tarp gamtinės drėgmės ir abiejų bangų greičių: $V_s R$ = 0,86 ir $V_p R$ = 0,83.

Lake Macrophytes Abundance and Reflectance Relationship

Yahor Levachou, Edvinas Stonevičius

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

Aquatic plants play an important role in the ecosystem of water bodies, serving as indicators of overall health. Being both measurable and visible, these plants become valuable subjects for monitoring. High-resolution satellite imagery enables the detection of large concentrations of macrophytes, although their distribution is often confined to narrow coastal zones. Considering the uneven growth of these plants, it is essential to assess the impact of macrophyte abundance on the reflectance of the water body to use it for precise macrophyte determination. This study aims to elucidate the relationship between macrophyte abundance and the reflectance of the water surface.

To evaluate the relationships between abundance and reflectance, Sentinel 2 satellite data, drone imagery, and in-situ observations were used for numerous lakes: Želva, Želvikštis, Lielukas, Žuvuntas, Salote. The studied lakes represent a diverse range of submerged and emergent macrophytes. Field data collection occurred from July to September 2023 and reflectance data were obtained from the nearest cloud-free satellite imagery. Using RGB drone images, a threshold in the green range was determined manually for the purpose to separate plants from the rest of the surface accurately. GIS technologies were then employed to calculate the area occupied by plants. The green range was chosen as the most suitable for vegetation representation. For each 10 m² pixel of the satellite image, areas occupied by vegetation were calculated and considered as abundance for this study. The determination of plant area was influenced not only by the color of the plants but also by their background, adding contrast. Consequently, water lilies in deeper areas were identified more accurately than in shallower ones. Statistical methods were used to analyze relationships between vegetation abundance and reflectance.

The abundance of aquatic vegetation has a noticeable impact on the reflectance of the water body. The reflectance of the surface exhibits a relatively smooth transition with varying levels of vegetation abundance. As green plants become visible on the surface, the spectral curve becomes more pronounced, particularly in the green and infrared ranges. There is a discernible trend towards an increase in reflectance with the expansion of the area occupied by aquatic plants.

The most substantial changes in spectral brightness are observed when vegetation attains an abundance level of 10 percent. A strong positive correlation is evident between vegetation abundance and reflectance in both the visible and infrared spectra. The presence of such a correlation suggests the possibility of dimensionality reduction for more stable analyses.

Investigating Photogenerated Charge Carrier Lifetimes by Open Circuit Voltage Decay and Intensity Modulated Photovoltage Spectroscopy

Ramūnas Levinas¹, Roman Viter², Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė¹, Eugenijus Norkus¹

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Catalysis

²University of Latvia, Institute of Atomic Physics and Spectroscopy

In the renewable energy field, conversion of solar light into electrical or chemical energy is considered essential in order to move towards a green energy economy. Solar energy can be harnessed not just by generating electricity with photovoltaic cells, but also by driving photoelectrochemical (PEC) reactions. As discovered by *Fujishima & Honda* in their work “*Photoelectrolysis of water using semiconducting TiO₂ crystals*”, certain materials generate electrical current when illuminated with light of sufficient energy. These materials are used in photo-/electrocatalytic processes, such as water splitting to produce H₂ and O₂, or pollutant degradation in aqueous media. In particular, transition metal oxides (e.g., WO₃, TiO₂) are a subject of active research due to their favorable semiconductor properties, electrochemical stability and relative abundance. However, their large variance in structure, morphology and composition results in varying levels of photogenerated charge carrier lifetimes, which limits overall efficiency.

Therefore, this study presents the characterization of heterostructured TiO₂ by two methods that are used to approximate photogenerated charge carrier lifetimes: Open-Circuit Voltage Decay (OCVD) and Intensity Modulated photoVoltage Spectroscopy (IMVS). Both of these methods are based on the transient extinction of near-surface photogenerated charge carriers when illumination is cut off. For an n-type photoanode, this results in the photovoltage returning to open circuit potential in OCVD (Fig. 1a). Whereas in IMVS, the frequency at the apex of the semicircle in the complex coordinate plane corresponds to an average charge carrier lifetime τ_n (Fig. 1b).

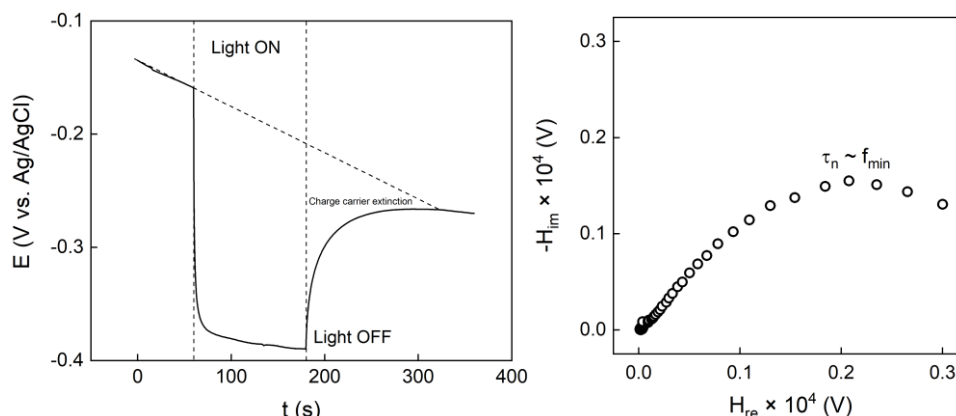


Figure 1. Open circuit voltage decay of TiO₂ in 0.1M KHCO₃ (a) and intensity modulated photovoltage spectra at same conditions (b); 25 mW cm⁻² 365 nm light.

Acknowledgement. This research has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. S-PD-22-5 (TICAL).

Multicolor Colorimetric Method for Cyanide Detection

Viktorija Lisyte, Almira Ramanaviciene, Anton Popov

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

In contemporary contexts, nanomaterials play an increasingly pivotal role across diverse applications. Within analytical chemistry, they facilitate electron transfer and enhance signal strength, thereby augmenting sensor sensitivity, reproducibility, and stability. Nanomaterials also function as substrates for immobilization of molecules, thereby expanding their applications. Among such materials are gold nanoparticles (AuNPs), which possess unique optical and thermal properties dependent on size and shape, as well as versatile functionalization and targeting capabilities. These properties make them indispensable tools in numerous scientific and technological fields, including diagnostics, drug delivery, imaging, sensor development, and synthesis of organic compounds.

Gold nanorods (AuNRs), a subgroup of AuNPs, have garnered significant attention in the field of sensing and due to their distinctive surface plasmon resonance (SPR) characteristics. Optimizing the surface of AuNRs is crucial for maximizing their potential in such applications. Due to their asymmetrical structure, AuNRs exhibit two distinct plasmon bands: a transverse band typically falling within the 520–540 nm range in the visible spectrum, and a longitudinal band whose spectral range can be finely tuned, spanning from the visible to the near-infrared (NIR) region (beyond 1300 nm), by adjusting the aspect ratio of the AuNRs – the ratio of length to width.

The main objective of this study was to employ AuNRs etching to develop an optical method for quantifying cyanide ions. HRP inhibition reaction was utilized for cyanide ion concentration detection. The synthesized AuNRs were characterized using UV/Vis spectroscopy and scanning electron microscopy (SEM) techniques. Parameters such as solution pH, concentration of 3,3',5,5'-Tetramethylbenzidine (TMB), and sulfuric acid (H₂SO₄) concentration, which influence the HRP enzymatic reaction, were optimized. The impact of reaction duration on AuNRs etching was also evaluated. The investigated optical analytical system is promising for cyanide detection by visual observation.

36

Synthesis and characterization of LnMnO₃ (Ln = Sm, Gd, Nd, Tb, Eu) nanoparticles

Evaldas Lugauskas, Dovydas Karoblis, Aivaras Kareiva

Institute of Chemistry, Vilnius University

In this study, the synthesis and characterization of several lanthanoid manganites (LnMnO₃) were investigated. These materials have the perovskite structure, which can be generalized to the ABX₃ formulaic unit, where A and B are cations and X is either O (perovskite oxides) or a halogen (organic perovskites). Manganites have recently become materials of interest not only due to their unique magnetic properties, but also their colossal magnetoresistance, ability to catalyze photochemical reactions, spin-glass behavior and so on (Xia et al., 2020). For example, in the case of LaMnO₃, the magnetic properties are only due to the orientation of the MnO₆ octahedron in the crystal structure, while in our LnMnO₃ series the interaction between both cation magnetic moments could be seen and thus produce unique magnetic properties (like anti-)ferromagnetism) (Mantilla et al., 2020).

The sol-gel polyacrylamide route was selected for the preparation of these manganites. This method is a modification of the widely used sol-gel method by the inclusion of a polymeric carcass. The carcass is a crosslinked polymer made up of acrylamide chains, connected by 2,2'-methylenebisacrylamide strands. This polymer provides a large surface area for the formation of a large amount of crystallization centers, which inhibits the growth of those centers and provides an optimal system for the creation of nanoparticles. This method is very attractive due to it not requiring any complicated and expensive equipment or reagents, being environmentally friendly and the low toxicity of the reagents.

In our research, the relation between phase purity, morphology and annealing temperature was analyzed. The assessment of phase purity was conducted using obtained X-Ray diffraction data. Scanning electron microscopy was used to determine surface morphology and particle size.

References

- Xia, W., Pei, Z., Leng, K., & Zhu, X. (2020). Research Progress in Rare Earth-Doped Perovskite Manganite Oxide Nanostructures. *Nanoscale Research Letters*, 15, 9.
- Mantilla, J., Morales, M. A., Venceslau, W., Corredor, L. T., Morais, P., Aragón, F., Da Silva, S., & Coaquira, J. A. H. (2020). Field-driven spin reorientation in SmMnO₃ polycrystalline powders. *Journal of Alloys and Compounds*, 845, 156327.

Conformational Analysis of Cyclopropyl, Chloromethyldifluorosilane by Vibrational Spectroscopy

Jogilė Mačytė¹, Lucas Licaj², Gamil A. Guirgis², Valdas Šablinskas¹

¹*Institute of Chemical Physics, Vilnius University, Saulėtekio av. 3, 10257 Vilnius, Lithuania*

²*Department of Chemistry and Biochemistry, College of Charleston, Charleston, USA*

Conformational analysis aims to establish a connection between the structure of conformers and their energy levels, thereby determining their relative stabilities. A cyclopropyl group is a chemical structure derived from cyclopropane, due to the unfavoured angles between the chemical bonds (60°), cyclopropyl groups are highly strained. Chloromethyl is a functional group derived from the methyl group with one hydrogen atom replaced by a chlorine atom. Difluorosilane is a gaseous chemical compound, it can be considered as a derivative of silane containing two fluorine atoms replacing two hydrogen atoms. Difluorosilane finds use in dental varnish to prevent tooth cavities (Brambilla, 2001) also used in chemical vapour deposition to deposit silicon nitride films.

This work concerns conformational diversity of Cyclopropyl, chloromethyldifluorosilane, a newly synthesized molecular compound. The conformers may differ in their physical properties, reactivity, etc., therefore a detailed conformational analysis of the molecule is needed to predict its behavior (Dragojlovic, 2015). The aim of our study is to determine the possible stable conformations Cyclopropyl, chloromethyldifluorosilane using vibrational spectroscopy and DFT calculations.

Four different techniques of vibrational spectroscopy were employed to study the molecule. Firstly, liquid phase ATR infrared absorption spectra were recorded in order to get the first view of the vibrational spectra of the molecule. To complement this data Raman spectra were recorded as well. Finally, for deeper inside into possible conformational dynamics, gas phase and low temperature matrix isolation infrared spectra were recorded. The interpretation of spectroscopic data was carried out using DFT calculations. DFT calculations were performed utilizing B3LYP functional and augmented Dunning correlation-consistent valence double zeta basis set and assessing anharmonicity.

The calculations reveal that Cyclopropyl, chloromethyldifluorosilane has seven staggered conformations, but only 4 of them are stable enough to be observable in real samples. The most stable conformer possesses C₁ symmetry with C-Cl chemical bond being eclipsed with C_{ring}H bond.

The computations were performed with supercomputer "VU HPC" located in NFTMC.

References

- Brambilla, E. (2001). Fluoride-Is It Capable of Fighting Old and New Dental Diseases?.an overview of existing fluoride compounds and their clinical applications. *Caries Research*, 35, 6.
- Dragojlovic, V. (2015). Conformational analysis of cycloalkanes. *ChemTexts*, 1(3), 14.

Miesto-kaimo-gamtos gradiento erdvinė analizė Europoje palydoviniais žemės dangos duomenimis

Julius Mačiulaitis, Darijus Veteikis

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Intensyvėjantis antropogenizacijos procesas lemia kraštovaizdžio struktūros ir jo funkcijų kitimą (Chapin et al., 2002). Stiprėjant urbanizacijai, plečiantis urbanistiniam karkasui, kuris įsiterpia į visų tipų kraštovaizdžius, nauja erdvinė konfiguracija naikina aiškų kontrastą tarp antropogeninių ir natūralių žemės naudmenų (Inostroza et al., 2019). Sudėtingėjant urbanizacijos erdviniai raiškai, dabartinius kraštovaizdžius darosi vis sunkiau vertinti naudojant standartinius Būlio klasifikacija paremtus žemės dangos modelius (Inostroza et al., 2019), kurie vertina binarinius žemės dangos kintamuosius. Siekiant integraliai suvokti kraštovaizdžio struktūrą, galima remtis prielaida, kad kraštovaizdis yra vientisas, kaip audinys, kuriame energijos ir materijos srautai tarp heterogeniškų struktūrinių elementų pasireiškia gradientais. Kitaip tariant, kraštovaizdžio gradientiškumas gali būti išreiškiamas pagal kraštovaizdyje veikiančių dviejų pagrindinių jo struktūrą formuojančių jėgų – antropogenizacijos ir natūralizacijos stiprumą (masyvumą) ir kryptį. Miesto-kaimo-gamtos gradiento požiūriu galima analizuoti erdvinius žemės dangos pokyčius pereinamoje (transektinėje) kraštovaizdžio struktūroje. Tai leidžia geriau suprasti antropogenizacijos ir natūralizacijos procesų koegzistavimo erdvinius dėsningumus, antagonistinių kraštovaizdžio tendencijų santykį erdvėje.

Šio darbo tikslas – atskleisti erdvinius miesto-kaimo-gamtos gradiento ypatumus Europoje. Tyrime naudojami ES Copernicus Land Monitoring Service progamos palydoviniai CORINE žemės dangos duomenys (2018 m.). Tyrimui atlikti naudojama ESRI ArcGIS Pro 3.2.2 programinė įranga. Pagrindiniai tyrimo metodai – literatūros šaltinių analizė, kartometrinė (GIS) analizė ir kartografinis (GIS) metodas.

Darbe analizuojami antropogeninių ir natūralių žemės dangų erdviniai struktūriniai aspektai, vertinamas skirtingos genezės žemėnaudos santykis, erdviniai dėsningumai Europoje. Kartoschemose pateikiama pagal erdvinį bruožų visumą išskirta kraštovaizdžio gradientų struktūra Europoje.

Literatūra

Chapin, F. S., Matson, P. A., & Mooney, H. A. (2002). *Principles of Terrestrial Ecosystem Ecology*. Springer New York, NY.

Inostroza, L., Hamstead, Z., Spyra, M., & Qureshi, S. (2019). Beyond urban–rural dichotomies: Measuring urbanisation degrees in central European landscapes using the technomass as an explicit indicator. *Ecological Indicators*, 96(1), 466-476.

FT-IR ir FT-RS spektrometrija gintaro ir kitų iškastinių dervų nustatymui

Gintarė Martinkutė-Baranauskienė, Petras Šinkūnas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Iškastinės dervos – tai natūralios kilmės polimerinės medžiagos, pasižyminčios unikaliomis biologinėmis, fizikinėmis ir cheminėmis savybėmis. FT-IR ir FT-RS spektrometrija yra puikiai tinkama norint identifikuoti organines, polimerines ir kai kuriais atvejais neorganines medžiagas. Per pastaruosius kelis dešimtmečius tiriant dervas šiais analitiniais metodais, buvo pasiekta didelė pažanga ryšio tarp dervų formavimosi mechanizmo, botaninio šaltinio ir dervų fizikinių ir cheminių savybių supratime.

Gintarai ir kitos iškastinės dervos, kurios buvo tirtos FT-IR ir FT-RS spektrometrais, pasižymi skirtingomis cheminėmis ir fizikinėmis savybėmis, amžiumi, botaniniu šaltiniu, formavimosi, aplinkos, klimato ir palaidojimo geologinėmis sąlygomis.

IR spektroskopija pasirodė ypač tinkama Baltijos gintarui identifikuoti, taip pat šis metodas sėkmingai taikomas tiriant ir kitas dervas bei plastikus. Gintarų ir kitų dervų IR spektrai buvo analizuojami remiantis sugerties juostomis, susijusiomis su įvairių šiuose junginiuose esančių funkcinių grupių vibracijos dažniu. Analizuojant FT-RS spektrometro užrašytus spektrus, nustatyta, kad kai kuriais atvejais pagal šių juostų intensyvumo santykį galima įvertinti iškastinės dervos amžių ir jos brandumo laipsnį.

SAR Data Analysis for Permanent Grasslands Monitoring

Gustė Metrikaitytė Gudelė, Jūratė Sužiedelytė Visockienė

Vilnius Gediminas technical university, Department of Geodesy and Cadastre

Long-term monitoring of changes in land cover and land use (LCLU) has shown that the area of permanent grasslands has been decreasing throughout Europe in recent years. Permanent grasslands are important in many ways: biodiversity conservation, soil health, organic carbon sequestration, groundwater and surface water regulation and quality, culture and landscape, agriculture, climate change and mitigation. Under the obligations of the European Union, permanent grasslands must be protected. The decrease in these areas is often related to anthropogenic factors. Due to this fact the continuous monitoring is needed to keep, protect or restore these areas.

The study aimed to assess the suitability of electromagnetic coherence and intensity bands extracted from Synthetic Aperture Radar (SAR) satellite images for continuous monitoring of permanent grassland areas. The study was based on official vector data, which indicated known permanent grasslands, and the use of optical RGB combination satellite data for accuracy assessment.

The SAR data processing method for monitoring LCLU changes was chosen for the study. 5 years of mid-season raw satellite SAR data were used, which were pre-processed and calculated coherence, average intensity and difference intensity bands. These three bands, extracted from SAR images of two time periods, were used in an RGB composite. Created composite shows that blue-shaded areas are areas where land cover or land use change occurred during the study period, magenta-shaded areas are areas where there was no change, yellow-shaded areas - urbanized areas, green-shaded areas - forests and vegetation areas. Given that permanent grasslands are areas that have not changed for 5 years or more, this results in the expectation that areas known as permanent grasslands will be covered in magenta shades.

To assess the effectiveness of the methodology, a precision study was conducted. The precision assessment gave high-reliability results, the calculated metrics of precision, recall and F1 revealed a high accuracy of the model: precision metric reached 0.96, recall – 0.97, and F1 value – 0.97. The results of the study confirm that the application of coherence and intensity bands composite of SAR images is an effective method for continuous monitoring of permanent grasslands.

41

2 – alkinilbenzoilo darinių sintezės kelių paieška

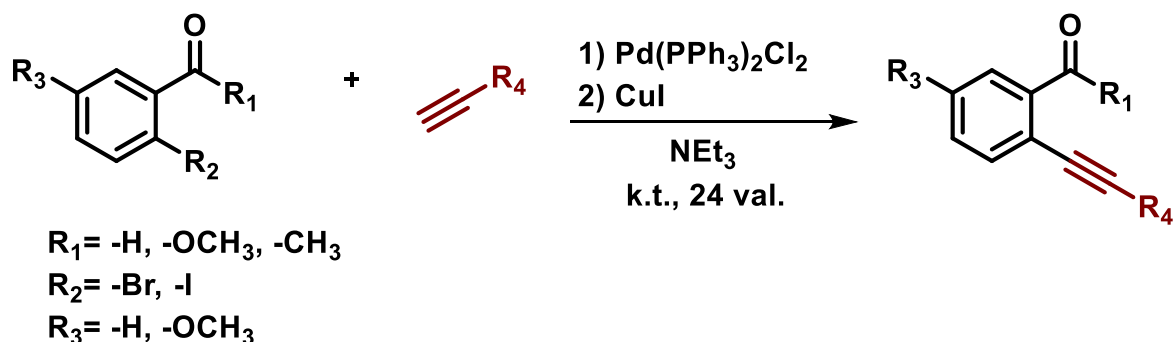
Urtė Milerytė, Rita Bukšnaitienė, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Amiloidai yra amorfiniai baltymų agregatai, kurių ypatybė – netirpi fibrilinė morfologija, atsirandanti dėl neteisingo β klosčių susilankstymo. Šie agregatai kaupiasi įvairiose organų ir audinių vietose, tokiu būdu sukeldami klinikinį sindromą, žinomą kaip amiloidozė (Orobets & Karamyshev, 2023). Geriausiai žinomos amiloidozės – Alzheimerio ir Parkinsono ligos bei II tipo cukrinis diabetas. Šiandien, išskyrus II tipo diabetą, nėra efektyvių ligos eigą modifikuojančių mažamolekulinių vaistų, skirtų amiloidinės agregacijos slopinimui ir jos sukeltoms ligoms gydyti. Tačiau pastarųjų metų intensyvūs tyrimai parodė, kad kurkumino metabolitas vanilinas, priklausantis fenoliniams aldehidams, pasižymi gebėjimu slopinti amiloidinių baltymų agregaciją *in vivo* (Iannuzzi et al., 2017).

Remiantis vanilino struktūra, šio tyrimo metu siekiama susintetinti įvairius 2 – alkinilbenzoilo darinius, kurie potencialiai slopintų amiloidų agregaciją, ir nustatyti sąlygas, kurioms esant šių junginių sintezė yra efektyviausia.

Sintezė vykdyta taikant paladžio katalizuojamą kryžminio sujungimo reakciją, kurioje jod – ir brombenzoilo darinių halogenai buvo keičiami alifatiniais bei aromatiniais acetilena. Pastebėta, kad reakcija geriausiai vyko su metil-2-jodbenzoatu – jo produktų išieigos siekė 90 – 95 %. Sonogashiros reakcija prastai vyko su 2-brom-5-metoksibenzaldehidu. Jo produktų išieigos svyravo nuo 5 iki 22 %. Prasčiausios išieigos stebėtos su 1-(2-bromfenil)etanonu, jos nesiekė net 1 %.



1 pav. Bendrinė 2 – alkinilbenzoilo darinių sintezės schema.

Literatūra

Iannuzzi, C., Borriello, M., Irace, G., Cammarota, M., Di Maro, A., & Sirangelo, I. (2017). Vanillin Affects Amyloid Aggregation and Non-Enzymatic Glycation in Human Insulin. *Scientific Reports*, 7(1), Article 1.
Orobets, K. S., & Karamyshev, A. L. (2023). Amyloid Precursor Protein and Alzheimer's Disease. *International Journal of Molecular Sciences*, 24(19), 14794.

42

Release of Remnant Magnetization in BiFeO₃ by Means of Rhenium Doping

Andrius Pakalniškis¹, Dominika Zákutná², Marianna Gerina², Ramūnas Skaudžius¹, Aivaras Kareiva¹

¹Institute of Chemistry, Vilnius University

²Department of Inorganic Chemistry, Charles University, Prague, Czech Republic

When certain materials combine at least two of the primary ferroic orders, they are referred to as multiferroics. In an ideal case, a coexistence of ferroelectricity and ferromagnetism with interplay between them is desired, such interaction is called magnetoelectric coupling. However, there are still significant challenges that need to be overcome beforehand. Mainly conflicting origins of ferroelectricity and ferromagnetism, weak interplay between these orderings, and both transitions temperatures occurring above room temperature. As such amount of room-temperature multiferroic compounds is quite scarce, however bismuth ferrite (BiFeO₃, BFO) has shown the most potential.

BiFeO₃ is a distorted perovskite compound with a rhombohedral symmetry and an *R3c* (#161) space group. Property-wise is a room-temperature multiferroic compound with ferroelectric and antiferromagnetic orderings above room temperature. For pristine BFO, the Curie temperature is $T_C \sim 1100$ K, and Neel Temperature is $T_N \sim 640$ K. In the case of BFO, the problem of conflicting magnetic and electric ordering nature is resolved by separating the origin of these orders into different atoms. The Fe³⁺ ions are responsible for the antiferromagnetic structure. While ferroelectricity arises from lone-pair ferroelectricity mechanism. However, BiFeO₃ possesses significant drawbacks that need as well. The first problem is caused by the difficulties in the preparation of pure BFO. This is due to the volatility of bismuth under higher temperatures, which results in impurities during synthesis. Furthermore, bismuth ferrite suffers from large leakage currents that prevent the existence of closed ferroelectric hysteresis loops. Lastly, the existence of the modulated cycloidal antiferromagnetic sublattice results in a zero net remnant magnetization and a reduced magnetoelectric coupling.

The main goal of this work was to develop a new low-temperature synthesis procedure, to obtain single-phase BFO compounds. Furthermore, the aliovalent nature of Re doping was also investigated in hopes of obtaining released remnant magnetization. The obtained samples were investigated employing XRD, SEM, XPS, and VSM. Results revealed that single-phase BFO can only be obtained up to 0.75 % of Re, further doping results in impurity formation. Lastly, even sub-one % doping of Re showed promising results, as remnant magnetization was observed.

Fliuvioglacialinių nuogulų sedimentacijos Rimučių ir Alekniškių telkiniuose analizė remiantis granulometrija, tekstūra ir sandara

Miglė Paškevičiūtė, Petras Šinkūnas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Tyrimai atlikti Rytų Lietuvoje, Molėtų rajone, vėlyvojo Nemuno ledynmečio Baltijos stadijos fliuvioglacialinių nuogulų paplitimo zonoje, įsiterpusioje tarp ledyno kraštinių darinių. Tyrimo tikslas – atliktus Alekniškių ir Rimučių nuogulų telkinių sedimentologinę analizę, skiriant didesnę dėmesį nuogulų tekstūrai ir struktūrai, nustatyti čia paskutiniojo apledėjimo metu vykusius procesus, nuogulų kilmę bei pagrindinius veiksnius įtakojusius fliuvioglacialinių nuogulų telkinių susidarymą. Tam atlikta sedimentologinė ir geomorfologinė analizė. Sluoksnius sudarančių sluoksnelių polinkio dydžio ir krypties matavimai atlikti nuogulas transportavusių paleosrautų kryptims ir dinamikos kaitai nustatyti. Telkinių paviršiaus pobūdis įvertintas pasitelkus LiDAR duomenis.

Gauti preliminarūs rezultatai rodo, kad tyrimų plote, kur dominuoja fliuvioglacialinės nuogulos – įvairaus stambumo smėlis, žvirgždas ir gargždas, heterogeninėje hidrodinaminėje aplinkoje vyko itin aktyvūs procesai. Alekniškių telkinyje fliuvioglacialinių nuogulų storis kinta nuo 6,9 iki 24,7 m, kai tuo tarpu Rimučių telkinyje – 8,5 - 15,8 m intervale. Vertikaliame pjūvyje fliuvioglacialinės nuogulos smulkėja su gylių, o viršutinėje dalyje daugiausiai slūgso smulkus žvirgždas ir gargždas. Visa fliuvioglacialinių nuogulų storumė daugiausiai slūgso ant eroduoto moreninio priemolio pagrindo. Paviršiuje po dirvožemiu slūgso masyvaus stambaus molingo smėlio su žvirgždu netolygiai paplitę sluoksniai. Į neryškiai subhorizontaliai sluoksniuotą žvirgždą daug kur įsiterpia smulkaus ir vidutinio stambumo, daugiausiai horizontaliai sluoksniuoto smėlio tarp sluoksniai, kurie rodo hidrodinaminį pokyčius laike ir gali būti siejami su sezoniniu ledyno tirpsmo svyravimu. Giliau aptiktas lygiagrečiai įkypai sluoksniuotas smėlio sluoksnis rodo stabilesnes sedimentacines ir hidrodinamines sąlygas, siejamas su išreikštos krypties fliuvioglacialine pernaša. Paleosrovės krypties matavimų duomenys rodo, kad dominavo šiaurės rytų, rečiau rytų – pietryčių vandens srautų kryptys. Nuogulų litologija Alekniškių telkinyje yra vientisesnė ir mažiau tekstūriškai bei granulometriškai kaiti nei Rimučių telkinyje, tačiau pasižymi panašiu sluoksnių kaitos dėsningumu, kai giliau dominuoja įvairaus smėlio su smulkiu žvirgždu lygiagrečiai įkypo sluoksniuotumo tekstūra, o aukščiau ją keičia žvirgždo ir gargždo su smulkaus ir vidutinio stambumo smėlio tarp sluoksniais subhorizontalaus ir horizontalaus sluoksniuotumo tekstūra, bet arčiau Žemės paviršiaus stebimas ir kryžmiškai įkypas sluoksniuotumas. Remiantis preliminariais tyrimo rezultatais galima daryti prielaidą, kad Rimučių ir Alekniškių fliuvioglacialinių nuogulų telkiniai sudaro vientisą kompleksą, kuriame sedimentacija vyko veikiant šiaurės rytų – pietryčių krypties ledyno tirpsmo vandens srautams kaičioje subaplinkoje tarp ledyno pakraščio ir prieledyninės zonų.

Di-*tert*-alkyl phosphine synthesis and investigation of chemoenzymatic synthesis of their precursors – tertiary acetates

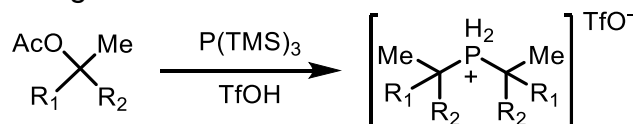
Jonas Paukštys^{1,2,3}, Tomas Paškevičius¹, Ringailė Lapinskaitė¹, Nina Urbelienė², Linas Labanauskas¹, Rolandas Meškys²

¹Department of Organic Chemistry, Center for Physical Sciences and Technology

²Department of Molecular Microbiology and Biotechnology, Institute of Biochemistry, Life Sciences Centre, Vilnius University

³Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Sterically demanding di-*tert*-alkylbiaryl phosphines are widely used in palladium catalysis. They have been shown to promote a wide variety of cross-coupling reactions such as the Buchwald-Hartwig (C-N), Suzuki-Miyaura (C-C), Heck (C-C) and others (C-F, C-O, C-S). Modification of the di-*tert*-alkyl groups can alter the electronic and steric properties of the ligands which could lead to a more efficient catalysis. However, the synthesis of secondary phosphines not only requires the use of highly reactive and toxic reagents over multiple steps, but also involves some non-trivial manipulations to be performed. These challenges are partially overcome with our new method for di-*tert*-alkyl phosphine synthesis using easier to handle tris(trimethylsilyl)phosphine (P(TMS)₃). P(TMS)₃ reaction with triflic acid generates a phosphine nucleophile *in situ* which attacks carbocation formed from tertiary acetate under the acidic reaction conditions. Products formed in this reaction are air-stable di-*tert*-alkyl phosphine triflates that can be directly used in the C-P cross-coupling reaction in the subsequent synthesis of phosphine ligands.



Currently tertiary acetates used in these reactions are synthesized chemically. A more energy efficient and eco-friendly approach would be chemoenzymatic synthesis. However, due to steric hindrances of tertiary alcohols, acetylation is highly unfavorable. In our experiments a wide variety of esterases were tested for acetylation and hydrolysis reactions of tertiary alcohols and esters, respectively. Most efficient enzymes were selected for further investigation.

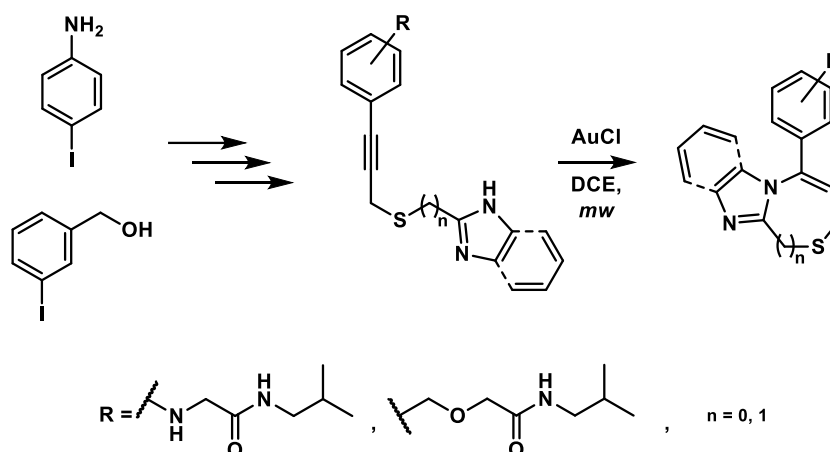
Tikslinių kondensuotų tioimidazolų sintezė

Martyna Paulauskaitė, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Biotechnologijų mokslų srityse vis labiau domimasi baltymų agregacijos ir amiloidinių struktūrų susidarymo tyrimais. Tokį padidėjusį susidomėjimą paskatino amiloido agregacijos sąsajos su daugeliu sunkių sveikatos sutrikimų, tokių kaip Alzheimerio ir Parkinsono ligos, II tipo diabetu bei daugeliu sisteminių amilodozių. Šiuolaikiniame pasaulyje šie sutrikimai kelia didelę grėsmę žmonių sveikatai ir gerovei, todėl yra atliekama nemažai tyrimų su įvairiais junginiais, nukreiptais prieš savaime susiformuojančius amiloidogeninius baltymus (Chiti & Bobson, 2017).

Mūsų laboratorijoje pirmą kartą susintetinti imidazotiazinai su įvairiais pakaitais, parodė potencialų amiloidų agregacijos slopinimą. Todėl šio darbo tikslas yra susintetinti imidazotiazinus ir imidazotiazepinus su parinktomis tikslinėmis grupėmis skirtingų baltymų amiloidų agregacijos tyrimams. Pasirinkus komerciškai prieinamus pradinis junginius 4-jodoaniliną ir 3-jodobenzilo alkoholį, per kelias stadijas buvo susintetinti atitinkami 2-alkiniltioimidazolai, o atlikus jų ciklizacijos reakcijas naudojant AuCl kaip katalizatorių buvo gauti norimi imidazotiazinai ir imidazotiazepinai.



1 pav. Tikslinių imidazotiazinų ir imidazotiazepinų sintezės schema

Literatūra

Chiti, F., & Bobson, C. M. (2017). Protein Misfolding, Amyloid Formation, and Human Disease: A Summary of Progress Over the Last Decade. *Annual Review of Biochemistry*, 86(1), 27-68.

Organinių dažų pašalinimas panaudojant MXenų nanostruktūras: pH įtaka ir kinetinis tyrimas

Germante Paulikaite¹, Martynas Talaikis², Anton Popov³, Simonas Ramanavicius², Gediminas Niaura²

¹Fizikinės chemijos katedra, Chemijos institutas, Chemijos ir Geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas

²Organinės chemijos skyrius, VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras

³NanoTechnas - NanoTechnas - Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos institutas, Chemijos ir Geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas

Vandens tarša kelia didelę grėsmę ekosistemoms, žmonių sveikatai ir bendrai mūsų planetos gerovei. Užterštumas pasiekė kritinį lygį, todėl būtina ieškoti greitų ir efektyvių sprendimo būdų (Senthil Rathi et al., 2021). Viena iš medžiagų, tinkamų vandens valymui, yra 2D MXenų nanostruktūros, turinčios didelį paviršiaus plotą funkcionalizuotą įvairiomis funkcinėmis grupėmis. Vienas iš populiariausių būdų MXenų nanostruktūrų sintezei yra pirmtako Ti_3AlC_2 išdininimas koncentruotoje vandenilio fluoro (HF) rūgštyje, kuomet suformuojamos sluoksniuotos nanostruktūros, pritaikomos įvairiose srityse, pavyzdžiui, sustiprintoje Ramano spektroskopijoje (Adomavičiūtė-Grabusovaitė et al., 2021) ar biokuro elementuose (Ramanavicius & Ramanavicius, 2020). Šio tyrimo tikslas nustatyti ir įvertinti MXenų efektyvumą pašalinant organinius teršalus, tokius kaip Metileno mėlynasis ir Azure A iš vandeninių mėginių, kurių pH yra nuo 4 iki 6. Pirminiai rezultatai rodo didelį MXenų efektyvumą adsorbuoti ir pašalinti organinius dažus. MXenų adsorbcijos efektyvumas ir adsorbcijos koeficientai buvo apskaičiuoti abiemis dažams, esant skirtingiems pH. Maža to, kinetiniai reakcijos tyrimai parodė greitą ir efektyvią organinių dažų adsorbciją. Apibendrinant galima teigti, kad pigių ir efektyvių sprendimų poreikis globaliai vandens taršos problemai spręsti auga, ir MXenai galėtų būti puiki išeitis. Atlikto tyrimo rezultatai rodo, kad MXenai gali būti panaudoti kaip adsorbentai organiniams teršalams pašalinti.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-PD-22-155.

Literatūra

Senthil Rathi B., Senthil Kumar P., Dai-Viet N. 2021. Vo. Critical review on hazardous pollutants in water environment: Occurrence, monitoring, fate, removal technologies and risk assessment, *Sci Total Environ*, 797: 149134.

Adomavičiūtė-Grabusovaitė S., Ramanavicius S., Popov A., Šablinskas V., Gogotsi O., Ramanavicius A. 2021. Selective enhancement of SERS spectral bands of salicylic acid adsorbate on 2D Ti_3C_2Tx -based MXene film. *Chemosensors*, 9: 223.

Ramanavicius S, Ramanavicius A. 2020. Progress and Insights in the Application of MXenes as New 2D Nano-Materials Suitable for Biosensors and Biofuel Cell Design. *Int J Mol Sci*, 21(23), 9224.

47

Europio jonais legiruoto $\text{Ca}_2\text{PO}_4\text{Cl}$ sintezė bei optinių savybių tyrimas

Paulina Pažerauskaitė, Artūras Katelnikovas, Aleksej Žarkov

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakultetas

Šiuo metu mokslininkų bendruomenėje kilo didelis susidomėjimas medžiagomis su reguliuojama liuminescencija, dėl jų galimo plataus pritaikymo. Eu^{2+} jonai yra vieni iš labiausiai paplitusių ir veiksmingiausių aktyvatorių, kadangi pasižymi tokiomis savybėmis kaip plasti absorbcija regione nuo UV iki mėlynos spalvos bei daugiaspalvė emisija.

Kalcio fosfatai yra neorganinių junginių šeima, turinti platų panaudojimą įvairiose srityse, kaip pavyzdžiui optinių medžiagų kūrimas. Kalcio chloropatitas (ClAp , $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$) ir goryainovitas ($\text{Ca}_2\text{PO}_4\text{Cl}$) yra kalcio halofosfato mineralai, kurie randami gamtoje. Sintetinis ClAp naudojamas vandens bei nuosėdų valymui nuo sunkiųjų metalų, o legiruotas lantanoidų jonais ClAp tiriamas būtent dėl optinių savybių. $\text{Ca}_2\text{PO}_4\text{Cl}$ yra mažiau ištirtas junginys. Kol kas didžiausias dėmesys kreipiamas į lantanoidais legiruoto $\text{Ca}_2\text{PO}_4\text{Cl}$ paruošimą bei optinių savybių tyrimą.

Pristatomame darbe, europiu legiruoto $\text{Ca}_2\text{PO}_4\text{Cl}$ milteliai, su skirtingais Eu kiekiais buvo susintetinti bei visapusiškai aprašyti. Fazinis grynumas bei kristalinė struktūra ištirta pasitelkiant rentgeno spindulių difrakciją (XRD) bei infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR). Gautų miltelių morfologija buvo ištirta naudojant skenuojantį elektronų mikroskopą (SEM). Liuminescencinės savybės buvo tiriamos fotoluminescencinių matavimų pagalba. Ištirti mėginių sužadinimo bei emisijos spektrai.

Teigiamų krūvininkų parneša pasižymintys trifeniletano dariniai ir jų panaudojimas perovskitiniuose saulės elementuose

Julius Petrulevičius¹, Yi Yang³, Cheng Liu³, Matas Steponaitis¹, Egidijus Kamarauskas², Maryte Daškevičienė¹, Abdulaziz S. R. Bati³, Tadas Malinauskas¹, Vygintas Jankauskas², Kaspars Rakštys¹, Mercouri G. Kanatzidis³, Edward H. Sargent^{3,4}, Vytautas Getautis¹

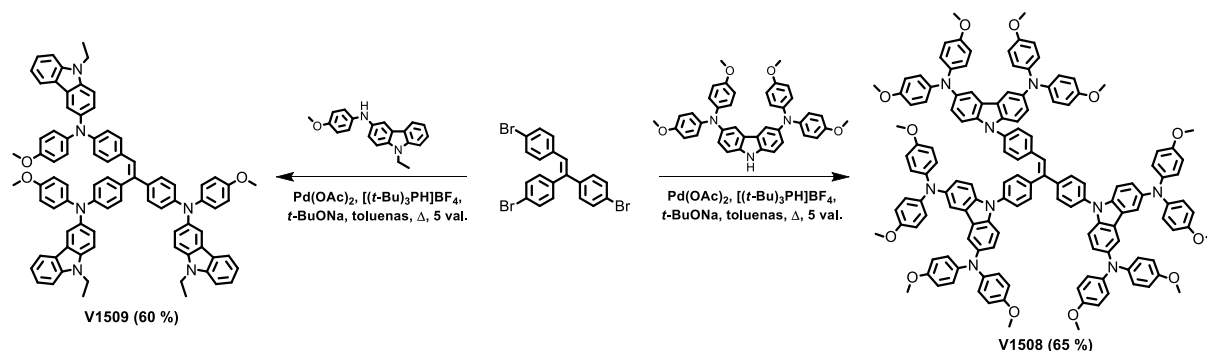
¹Kauno technologijos universitetas, Organinės chemijos katedra

²Vilniaus universitetas, Cheminės fizikos institutas

³Northwestern universitetas, Chemijos katedra, Evanstonas, Ilinojus, JAV

⁴Northwestern universitetas, Elektros ir kompiuterių inžinerijos katedra, Evanstonas, Ilinojus, JAV

Vienas svarbiausių perovskitinių saulės elementų (PSE) komponentų yra skyles transportuojanti medžiaga (STM), kuri lemia įrenginio kainą, energijos konversijos efektyvumą ir ilgaamžiškumą (Pham et al, 2020). Dauguma STM turi trūkumų, tokių kaip sudėtinga ir brangi sintezė, savaiminė molekulių agregacija, dėl kurios pablogėja skylių transportinio sluoksnio kokybė bei sumažėja įrenginio stabilumas. Todėl toliau dedamos pastangos sintetinant efektyvesnes STM, pasižyminčias geru suderinamumu su perovskito valentine ir laidumo juostomis, minimalia saulės spektro absorbcija, pakankamu skylių judrumu, terminiu ir fotocheminiu stabilumu, paprastesne sinteze ir mažesne kaina.



1 pav. STM V1508 ir V1509 sintezė.

Šiame darbe taikant paprastą dviejų ar trijų pakopų sintezę buvo gauti nauji junginiai V1508 ir V1509 bei iširtos jų terminės, optinės ir fotoelektrinės savybės. Naujos medžiagos buvo išbandytos kaip STM ir sėkmingai pritaikytos PSE, kurių efektyvumas viršijo 23%. Prietaisas, kuriame buvo panaudota geriausiai veikianti STM V1509, parodė geresnį ilgalaikį stabilumą, lyginant su PSE, kuriame kaip STM naudota spiro-MeOTAD.

Literatūra

Pham, H. D., Yang, T. C. J., Jain, S. M., Wilson, G. J., & Sonar, P. (2020). Development of dopant-free organic hole transporting materials for perovskite solar cells. *Advanced Energy Materials*, 10(13), 1903326.

Determination of potential migrants in food contact polyethylene

Toma Petrulionienė¹, Tomas Murauskas²

¹Center for Physical Sciences and Technology, Department of Organic Chemistry

²Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University

Polyethylene finds extensive application across various industries, particularly in food packaging, because of its easily modifiable properties. Renowned for its remarkable chemical resistance, high tensile strength, and low density, it is used as a preferred material. However, to produce the desired packaging, all kind of additives are used. These additives, including antioxidants, pose the risk of migrating through the packaging's functional barrier and contaminating the food, potentially leading to health concerns. Antioxidants represent just one among several groups of additives with migration potential. Assessing the levels of antioxidants in food packaging aids in elucidating the migration patterns of these compounds and evaluating potential health hazards.

An objective of this study was to determine levels of mostly used antioxidants Irganox 1010 and Irgafos 168-ox in food packages made from polyethylene. Composition of selected food packages was identified by attenuated total reflectance Fourier-transform infrared spectrometry (ATR-FTIR), and the analysis of antioxidant levels were carried out using liquid chromatography tandem mass spectrometry (LC-MS/MS).

The findings indicated the presence of Irgafos 168-ox in all examined samples, while Irganox 1010 was detected in 95 % of them. Ongoing investigations are focusing on the migration of Irganox 1010 and Irgafos 168-ox into food simulants.

Time-dependent photodegradation of low-density polyethylene microplastic particles using TiO₂ nanoparticles

Sonata Pleskytė, Ieva Uogintė, Steigvilė Byčenkienė

Department of Environmental Research, Center for Physical Sciences and Technology

Microplastics are particles that originate from plastic products and have a size of 1 – 5000 μm. As these particles are not biodegradable and are highly resistant to environmental influences, they can be transferred or accumulate in various environments (e.g.: water bodies, soils) over hundreds of years. Nevertheless, microplastics are already found in fish, birds, and mammalian organisms. Due to its small size and potential physical and toxicological risks, microplastics are classified as an emerging pollutant.

There are different plastic disposal ways, such as chemical treatment or recycling processes which are usually used for large plastic items but are not suitable for microplastics due to their small size. Photocatalysis in an aqueous medium is proposed as an alternative to combat microplastic pollution. The photocatalytic mechanism is able to degrade organic pollutants into water, CO₂ and mineral acids. TiO₂ semiconductors are used for the degradation of organic pollutants including many different plastic polymers.

The aim of this research is to determine the efficiency of photodegradation of low-density polyethylene (LDPE) microplastics under different time intervals of UV irradiation with TiO₂ nanoparticles (NPs). The TiO₂ NPs were synthesized by sol-gel method using titanium tetrachloride (TiCl₄). The chemical and physical properties of TiO₂ were determined by X-ray diffraction (XRD) analysis, transmission electron microscopy (TEM) while the band gap energy was evaluated by Tauc Plot approach.

The research presents a percentage weight loss of up to 60% for LDPE microplastics after 8 hours of UV irradiation with TiO₂. Our results indicate the potential use of TiO₂ as a photocatalyst for the degradation of microplastics. However, complete degradation was not achieved, indicating the necessity to improve microplastic mitigating and removal technologies.

Late Silurian fish fossils from western Lithuania

Morta Plyčiuraitytė Plyčiūtė, Darja Dankina, Andrej Spiridonov

Department of Geology and Mineralogy, Vilnius University

Milaičiai-103 borehole is located in the southwestern part of Lithuania. Stratigraphically, the core of Milaičiai-103 is represented by rocks from the Pridoli, Upper Silurian. Previous research examining conodont and brachiopod fossil material from Milaičiai-103 revealed a new "Šilalė Event" extinction (Spiridonov et al., 2020). In this study, we focused on ichthyofaunal assemblage and analysed 204 samples from the Milaičiai-103 borehole. Sample depth intervals range from 1159.0 metres to 1039.5 metres. The distribution and taxonomy of ichthyofauna before, during, and following the "Šilalė Event" are reflected in this interval.

The lithology of the studied samples is composed of argillite, marlstone, and limestone (Gelūnaitė & Spiridonov, 2015). The microfossils were selected using a binocular microscope because of their size, which ranges between 1.2 mm and less than 0.4 mm. Acanthodian and thelodont isolated remains were the most often discovered here. The total number of fish fossils has reached 355 units. All fish material was divided into groups according to the morphological characteristics (crown microstructure, neck development, foramina, and base shape). As a result, 28 groups were identified, documented, and illustrated. In addition, 144 scolecodont fragments, gastropods, conodont teeth elements, crinoids, and ostracods were found. Photos were taken with a scanning electron microscope (SEM) for taxonomic identification of fish fossils on genus and species levels. These new findings will be contrasted with earlier conodont and brachiopod data (Spiridonov et al., 2020) to further comprehend oceanic occurrences during the early Pridoli.

References

- Gelūnaitė, A., & Spiridonov, A. (2015). The preservation of total organic carbon of the Silurian Pridoli strata in the Milaičiai-103 well core of Western Lithuania. *Geologija, Geografija*, 1(2), 69–77.
- Spiridonov, A., Stankevič, R., Gečas, T., Brazauskas, A., Kaminskas, D., Musteikis, P., Kaveckas, T., Meidla, T., Bičkauskas, G., Ainsaar, L., & Radzevičius, S. (2020). Ultra-high resolution multivariate record and multiscale causal analysis of Pridoli (late Silurian): Implications for global stratigraphy, turnover events, and climate-biota interactions. *Gondwana Research*, 86, 222–249.

Savaime džiūstančių aliejų mikrokapsulės

Ernest Potapov, Liepa Pastarnokienė, Tatjana Kochanė, Ričardas Makuška

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Savaime užsigydančios medžiagos yra tokios medžiagos, kurios, atsiradus pažeidimui, geba atkurti pažeistą struktūrą ir medžiagos funkcionalumą (Mashkoor et al., 2022). Savaiminis medžiagų užsigydymas gali vykti, jei į medžiagą yra įterptos mikrokapsulės su viduje esančiu aktyviu agentu. Kai medžiaga yra pažeidžiama, mikrokapsulės viduje esantis aktyvus komponentas yra atpalaiduojamas, reaguoja pažeidimo vietoje su pačioje medžiagoje ar kito tipo kapsulėse esančiomis aktyviomis medžiagomis (Aïssa et al., 2012). Mikrokapsulių sistema dominuoja dėl technologijos paprastumo, lyginant su kitomis savaiminio užsigydymo sistemomis (Cuvellier et al., 2017). Savaime džiūstantys aliejai gali būti naudojami kaip savaiminio užsigydymo medžiagos, kurios esant pažeidimui kietėja oro deguonies poveikyje, sudarydamos kietą plėvelę.

Šiame darbe buvo siekiama optimizuoti linų sėmenų aliejaus mikrokapsulių polikarbamido apvaskalės sintezės sąlygas. Mikrokapsulės buvo susintetintos tarpfazinės polimerizacijos būdu naudojant aliejus – vanduo emulsiją. Polikarbamidinis mikrokapsulių apvaskalas buvo formuojamas iš tris(*p*-izocianatofenil)tiofosfato ir trietilentetramino. Taguchi eksperimento dizaino metodas buvo naudojamas siekiant nustatyti emulsiklio tipo, įkapsuliuotos medžiagos ir apvaskalo santykio, homogenizavimo greičio įtaką mikrokapsulių dydžiui.

Sėkmingas linų sėmenų aliejaus įkapsuliuojimas į polikarbamidinį apvaskalą buvo patvirtintas FT-IR analize. Terminės mikrokapsulių savybės įvertintos TGA analize. Optiniu mikroskopu buvo įvertinti mikrokapsulių dydžiai, jų vertės svyravo tarp 30 – 140 nm. Įkapsuliuotos medžiagos kiekis mikrokapsulėse siekė 70 %. Taguchi „optimalus yra geriausias“ metodu nustatyta, kad optimalaus dydžio kapsulės (50 nm) gaunamos naudojant įkapsuliuotos medžiagos ir apvaskalo santykį – 5:1, emulsikliu naudojant 7 % gumiarabiko tirpalą, homogenizuojant 4000 apsk./min greičiu.

Literatūra

Aïssa, B., Therriault, D., Haddad, E., & Jamroz, W. (2012). Self-Healing Materials Systems: Overview of Major Approaches and Recent Developed Technologies. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2012, 1–17.

Cuvellier, A., Torre-Muruzabal, A., Van Assche, G., De Clerck, K., & Rahier, H. (2017). Selection of healing agents for a vascular self-healing application. *Polymer Testing*, 62, 302–310.

Mashkoor, F., Lee, S. J., Yi, H., Noh, S. M., & Jeong, C. (2022). Self-Healing Materials for Electronics Applications. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(2), 622.

Design and synthesis of molecular building blocks for modular supramolecular cavitands

Nojus Radzevičius, Edvinas Orentas

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

Cavitands are macrocyclic molecules containing a permanent intramolecular cavity that is large enough to allow for non-covalent binding of guest molecules both in solutions and in the solid state. Such compounds have many potential and existing applications as synthetic enzymes, drug delivery systems, or filters for removing polyaromatic contaminants from aqueous systems. However, existing cavitand designs suffer from high symmetry and poor capabilities of functionalization and cavity size modification, which severely limits their potential.

Our current research is based around a system that enables the modular synthesis of various different-sized cavitands from a small selection of molecular building blocks through cyclocondensation reactions. The system is centered around derivatives of bicyclo[3.3.1]nonane-2,6-dione **1**. Macrocyclization of such compounds with aromatic linkers would allow for synthesis of rectangular cavitands, while incorporation of both enantiomers of the bicyclic compound could be used to create even more complex cavitands, having both positive and negative internal curvature, thus allowing for increased selectivity for host-guest binding. Alternatively, introducing ureidopyrimidinone moieties would allow for synthesis of dynamic supramolecular cavitands.

Bifunctionalized symmetric synthons **5** and **6** for Friedlander and Fischer cyclocondensations have also been successfully synthesized and tested in the corresponding condensation reactions. However, synthesis of cavitands has been unsuccessful due to solubility problems and self-condensation side reactions emerging after functionalization with bulky solubilizing groups. Future plans include alternative routes of functionalization and synthesis of model cavitands.

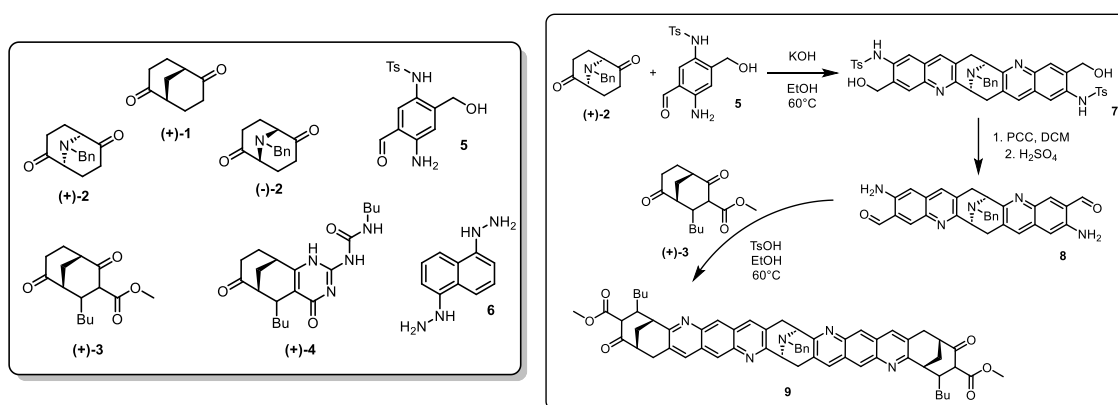


Figure 1. Currently prepared molecular building blocks (left) and current progress of model cavitand synthesis (right).

54

Aplinkai draugiška didelio kiekio magnio vitlokito miltelių sintezė

Rūta Raišalienė, Greta Linkaitė, Aleksej Žarkov, Aivaras Kareiva, Inga Grigoravičiūtė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Magnio vitlokitas (Mg-VTL, $\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$) – mineralinė kaulinio audinio medžiaga, skatinanti osteogeninę diferenciaciją ir greitą kaulo formavimąsi. Dėl minėtų savybių Mg-VTL svarbus medicinoje kaulų atstatymo, gydymo procedūrose.

Mūsų mokslinio tyrimo tikslas – žemoje temperatūroje atlikti paprastą, ekonomišką, nekenksmingą aplinkai didelio kiekio Mg-VTL miltelių sintezę tirpinimo–nusodinimo metodu. Pradiniu reagentu buvo pasirinktas gipsas ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), gamtoje aptinkamas mineralas. Tyrimo metu buvo atliktos 24, 48 ir 72 valandų trukmės sintezės iš 5,00 g gipso, pridodant 31,25 ml 0,2330 M $\text{Mg}(\text{CH}_3\text{COO})_2(\text{aq})$ tirpalo ir 500,0 ml mišinio, sudaryto iš vienodomis tūrinėmis dalimis sumaišytų vienmoliarių $\text{Na}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$ ir $\text{NaH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$ tirpalų, 80°C temperatūroje.

Gautų produktų sudėtys nustatytos Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) analizės metodu. 24 ir 48 valandas susintetintuose mėginiuose aptikta monetito (CaHPO_4) fazė, ilginant laiką iki 72 valandų, gautas grynas Mg-VTL junginys. 72 valandas sintetinto mėginio funkcinės grupės atpažintos Furje transformacinės infraraudonųjų spindulių spektroskopijos (FTIR) metodu. Junginio morfologija bei elementų pasiskirstymas mėginyje tirti skenuojančia elektronine mikroskopija (SEM) bei energijos dispersine rentgeno spektroskopija (EDX), atitinkamai. Susintetinto produkto paviršiaus plotas išmatuotas N_2 adsorbcijos–desorbcijos metodu.

Šiame darbe paprastu, ekonomišku tirpinimo–nusodinimo metodu iš aplinkai draugiško, nebrangaus gipso pirtako per 72 valandas buvo susintetintas didelis kiekis Mg-VTL (3,00 g, reakcijos išeiga 89,0 %) miltelių.

Ar Lietuva kapinių kraštas?

Augustas Reikertas, Neringa Mačiulevičiūtė–Turlienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Nuo pat mūsų tautos susiformavimo ištakų atsisveikinimas su mirusiuoju yra svarbus reiškinys bendruomenės gyvenime. Tai dinamiškas procesas, kurį veikia gyventojų migracija, urbanizacija ir kitos demografinės tendencijos. Kapinių erdvinis pasiskirstymas Lietuvoje yra aktuali tema, kuri verta didesnio dėmesio nei jo sulaukiama dabar. Kapinės įvairiuose darbuose nagrinėjamos kaip kraštovaizdžio elementas, archeologinis ar kultūros paveldo objektas, tačiau išsamesnių tyrimų jų erdvinio pasiskirstymo tema daryta mažai. Todėl temos nagrinėjimas ir tolimesnis analizavimas yra tikslingas, nes leidžia apibendrinti visos Lietuvos kapinių statistiką bei sudaryti žemėlapius, kurie atskleidžia kapinių erdvinį pasiskirstymą Lietuvoje.

Svarbiausias Lietuvos kapinių žemėlapių sudarymo tikslas yra aiškiai ir suprantamai perteikti informaciją bei išsiaiškinti kapinių erdvinį paplitimą Lietuvoje. Sudaryti žemėlapiai leidžia geriau suprasti ne tik kapinių erdvinio pasiskirstymo tendencijas, bet ir padeda išsiaiškinti tam tikrų rodiklių dydžio priežastingumą. Tam, kad būtų įvertintas Lietuvos kapinių erdvinis pasiskirstymas, buvo inventorizuotos visos Lietuvos kapinės, pagal pateikiamus savivaldybių duomenis bei kultūros vertybių registro sąrašą. Lietuvos kapinių žemėlapių sudarymui buvo pasitelkti keli kartografavimo metodai: kartogramų, lokalizuotų diagramų bei taškų metodai. Kartogramų metodu buvo pasirinkta atvaizduoti Lietuvos kapinių kiekybinius rodiklius savivaldybių lygmeniu, vertinant jų skaičių 100 kv. km. Lokalizuotų diagramų metodas leido atvaizduoti kapines pagal jų veikimo statusą. Kartografuojamų kapinių kokybinės informacijos kiekis bei pobūdis nėra tolygus savivaldybių lygmeniu, todėl taškų metodas geriausiai atspindi erdvinį šių duomenų pasiskirstymą. Šie metodai leido atvaizduoti kapinių skaičių ir jų statusą Lietuvos teritorijoje.

Surinkti duomenys leido išsiaiškinti, kad daugiausia Lietuvoje yra neveikiančių kapinių – 5520. Joms priklauso įvairūs senkapiai, holokausto, karo aukų memorialai bei apleistos kaimo kapinės. 2123 kapinėms yra priskiriamas veikiantis statusas. Mažiausiai Lietuvoje yra riboto laidojimo statusą turinčių kapinių – 378 kapinės. Visos jos kartu sudaro 8053 kapines. Nustatyta, kad kapinės, savivaldybių lygmeniu nėra pasiskirsčiusios tolygiai. Didžiausias kapinių skaičius, tenkantis 100 kv. km. plote yra fiksuojamas miestų savivaldybėse bei Vakarų Lietuvoje, mažiausias – Rytų ir Vidurio Lietuvoje. Žvelgiant į visos Lietuvos kapinių pasiskirstymą pagal statusą, veikiančios kapinės sudaro 26%, neveikiančios – 69%, riboto laidojimo – 5%. Pastebėta, kad Rytų Lietuvoje veikiančios kapinės sudaro žymiai didesnę dalį nei vakarinėje Lietuvos dalyje. Taip pat išsiaiškinta, kad riboto laidojimo kapinių dalis didesnė miestų savivaldybėse. Taškų metodu sudaryti žemėlapiai atskleidė tam tikrų kapinių tipų pasiskirstymą Lietuvoje. Stebimas aiškus konfesinių kapinių Lietuvoje erdvinis pasiskirstymas: evangelikų–liuteronų kapinės paplitusios Vakarų Lietuvoje, stačiatikių – Šiaurės Rytų Lietuvoje, žydų konfesinės kapinės pasiskirsčiusios visoje Lietuvoje tolygiai.

Structural and electrochemical study of graphene-polypyrrole nanocomposites

Gintarė Rimkutė¹, Gediminas Niaura², Rasa Pauliukaitė³, Justina Gaidukevič^{1,3}

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

²Department of Organic Chemistry, Center for Physical Sciences and Technology

³Department of Nanoengineering, Center for Physical Sciences and Technology

The worldwide sensor market is growing annually and is expected to reach \$345.77 billion by 2028 (O'Connell et al., 2022). However, materials commonly used in sensors often lack the sensitivity and selectivity required for electrochemical detection of trace analytes (Ferrag & Kerman, 2020). As a result, current research has started to focus on carbon nanomaterials, which have numerous unique characteristics, such as high surface area, biocompatibility, high electrical conductivity, and can be easily obtained using simple and cost-effective synthesis methods (Asadian et al., 2019).

The aim of this study was to prepare graphene-polypyrrole (GPPy) nanocomposites, characterize them, and examine their sensitivity in the non-enzymatic dopamine (DA) sensors. For this purpose, graphite precursors with grain sizes of <50 μm, ≥149 – ≤840 μm, and 2000 μm were intercalated with sulfuric acid and heat-treated to obtain exfoliated graphite (EG). EG specimens were further modified with conductive polymer polypyrrole (PPy) using the wet-synthesis method. The obtained GPPy nanocomposites (GPPy_1, GPPy_2, and GPPy_3) were structurally characterized using Raman spectroscopy and XPS analysis. Furthermore, differential pulse voltammetry (DPV) was used to electrochemically evaluate the sensitivity of the obtained samples toward DA.

Raman and XPS analyses showed that sample GPPy_2, obtained from medium-size graphite grains, had the highest elemental nitrogen content (5.12 at.%) and the lowest defect concentration ($I_D/I_G = 0.483$). In addition, an electrochemical study suggested that all samples had high sensitivity to DA. Nevertheless, the most promising performance was characteristic of the electrode modified with GPPy_2. The determined sensitivity of this sensor was 2180 μA mM⁻¹ cm⁻² and the limit of detection was 78 nM.

References

- Asadian, E., Ghalkhani, M., & Shahrokhian, S. (2019). Electrochemical sensing based on carbon nanoparticles: A review. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 293, 183–209.
- Ferrag, C., & Kerman, K. (2020). Grand Challenges in Nanomaterial-Based Electrochemical Sensors. *Frontiers in Sensors*, 1.
- O'Connell, I., Chevella, S., Salgado, G. M., & O'Hare, D. (2022). Precision Voltage Sensing in Deep Sub-micron and Its Challenges. In *Analog Circuits for Machine Learning, Current/Voltage/Temperature Sensors, and High-speed Communication*, 137–163.

57

Beyond the integrated mass-independent isotopic fractionation

Karolis Sarka^{1,2}

¹Center for Physical Sciences and Technology

²Sophia University

The variation in isotopic constitution of sulfur obtained from various sediments has been a point of study for the past two decades. There have been various hypotheses proposed with regards to the atmospheric cycle of sulfur photochemistry in anoxic atmospheres. The missing aspect of the sulfur photochemical cycles so far are isotopic fractionation trends for the oxidation state photochemistry leading to the elemental sulfur-based aerosols. Sulfur emissions in anoxic atmosphere are primarily through volcanic and marine outgassing in form of SO_2 , which undergoes photodissociation to SO , which in turn dissociates to S . Through this mechanism, conditions are created for a wide fluctuations of sulfur isotopologue distribution, ranging from large negative to large positive $\Delta(^{33}\text{S})$. The main issue with the sulfur isotopic signature in sediments is that they provide only a single value of the isotopic constitution of the washed-out aerosols, but lack any information of the ongoing atmospheric photochemistry.

Using high-resolution calculated spectra of SO_2 and we can get some insight into the small part of the anoxic atmosphere sulfur cycle. While it is quite common to use integrated absorption cross-sections to determine the impact of each compound on the total isotopic fractionation, we can show through these high-resolution spectra that the integrated cross-sections are not a suitable measure. In this work the isotopic fractionation ϵ is defined as a function of wavelength and absorption cross-section:

$$\epsilon(^i\text{S})(\lambda) = \epsilon_i(\lambda) = \left(\frac{\sigma_i(\lambda)}{\sigma_{32}(\lambda)} - 1 \right),$$

where $i \in 33,34,36$ and mass-independent isotopic fractionation is the deviation from the mass-dependent line:

$$\begin{aligned} E(^{33}\text{S})(\lambda) &= E_{33}(\lambda) = \epsilon_{33}(\lambda) - 0.515 \times \epsilon_{34}(\lambda) \\ E(^{36}\text{S})(\lambda) &= E_{36}(\lambda) = \epsilon_{36}(\lambda) - 1.90 \times \epsilon_{34}(\lambda) \end{aligned}$$

By considering the isotopic fractionation dependence on excitation wavelength, we show that it is highly sensitive to the excitation energy, and primarily bimodal: the isotopic fractionation is either strongly accumulative, or strongly depleting. The overall impact of each absorber depends on all the competing absorbers in a spectral window, as well as self-shielding and mutual-shielding as atmospheric depth increases.

Synthesis of monofunctionalized hexa-peri-hexabenzocoronene

Gabija Sergejevaitė, Domantas Valčekas, Edvinas Orentas

Department of Organic Chemistry, Vilnius University

The research field of assembling molecules into supramolecular constructs with cavities is currently being actively pursued. While commonly conceived as functional enzyme mimics, most of the described systems function through molecular recognition by utilizing rigid and shape-persistent cavities. Although induced-fit, conformational selection and allosteric control are common in the nature, in artificial host-guest supramolecular systems these phenomena are rarely explored. We have recently reported (Jozeliūnaitė et al., 2022) a unique dynamic supramolecular system in which the guest-host recognition was tightly coupled with tautomeric and conformational changes at both, periphery and cavity itself. We have demonstrated that the porphyrin ring forms a C-H- π interaction with the alkyl chain when it complexes with fullerene. This secondary interaction is crucial for the recognition process and plays a vital role in providing allosteric control for the guest recognition. To determine whether this is a distinctive characteristic of porphyrin, we aimed to investigate other chromophores that have a large π -surface. In this report, we describe the production of the essential component, hexa-peri-hexabenzocoronene, for the development of novel supramolecular allosteric system.

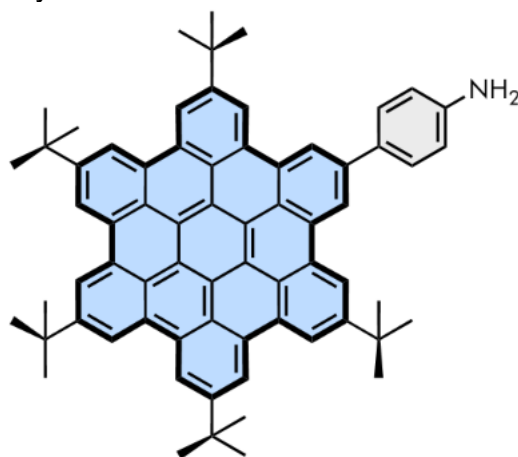


Figure 1. Monofunctionalized hexa-peri-hexabenzocoronene.

References

Jozeliūnaitė A., Neniškis A., Bertran A., Bowen A. M., di Valentin M., Raišys S., Baronas P., Kazlauskas K., Vilčiauskas L. and E. Orentas (2022). Fullerene Complexation in Hydrogen-Bonded Porphyrin Receptor via Induced-Fit: Cooperative Action of Tautomerization and C-H $\cdots\pi$ Interactions. *Journal of the American Chemical Society*, 145(1), 455–464

LiDAR duomenų taikymas partizaninių kovų paveldo objektų Lietuvoje tyrimams

Jovita Sinkevičiūtė¹, Andrius Balčiūnas¹, Vykintas Vaitkevičius²

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Klaipėdos universiteto Baltijos regiono istorijos ir archeologijos institutas

Žemės paviršiaus lazerinio skenavimo (LiDAR) duomenys ir jų taikymo metodai įgyja vis didesnę svarbą įvairaus mastelio naujų archeologinių objektų paieškoms ir tyrimams. Šie metodai itin aktualūs miškingoms, atokioms ar sunkiau prieinamoms vietovėms. Šiame darbe dėmesys skiriamas LiDAR taikymui smulkių archeologinių objektų – Lietuvos laisvės kovų paveldo objektų – partizanų bunkerių – tyrimams.

Darbo tikslas – parengti LiDAR duomenų taikymo partizaninių kovų paveldo objektų tyrimams metodiką. Tokia metodika apima jau žinomų ir registruose fiksuotų partizaninio paveldo objektų – bunkerių morfometrinių charakteristikų ir struktūrinių ypatybių, galinčių atsispindėti žemės paviršiaus mikroreljefe, analizę, LiDAR duomenų apdorojimą, skaitmeninių reljefo modelių sudarymą, vizualizavimą bei vizualinę jų analizę, kurios pirminiai rezultatai buvo tikrinami *in situ*. Siekiant įvertinti LiDAR duomenų tinkamumą partizaninių kovų paveldo objektų – bunkerių (slėptuvių) – identifikavimui taikant nuotolinius metodus, buvo atliktas atvejo tyrimas, paremtas istorine medžiaga pateikta archyvinėje KGB baudžiamojoje byloje.

Atliekant tyrimą, georeferencijavus archyvinėje byloje pateiktą istorinę kartografinę medžiagą, sudarytas taškinis preliminarinių bunkerių sluoksnis. Atsižvelgiant į šiam sluoksnyje pažymėtų objektų išsidėstymą teritorijoje, sudaryti dvidešimt aštuonių kvadratinių kilometrų teritoriją dengiantys skaitmeniniai žemės paviršiaus reljefo modeliai, kurių gardėlės dydis siekia 0.25 m. Atlikus vizualią šių modelių analizę, buvo nustatyta 41 potencialių bunkerių vieta. Šios pirminės analizės rezultatai buvo patikrinti *in situ*, dalyvaujant archeologui ekspertui, siekiant nustatyti jų atitikti istoriniam partizaniniam paveldui. Ekspedicijų metu buvo nustatytas 21 objektas, turintis partizanų bunkerio požymių (iš kurių 3 turintys ryškius požymius ir kurie gali būti klasifikuojami kaip bunkeriai). Rezultatai sudaro prielaidas teigti, kad LiDAR duomenų pagrindu sukurti skaitmeniniai žemės paviršiaus reljefo modeliai gali būti sėkmingai pritaikomi naujų preliminarinių partizaninių kovų paveldo objektų pirminei nuotolinei paieškai, po kurios turėtų būti vykdomi šių vietovių tyrimai *in situ* ir verifikuojamas pirminių rezultatų patikimumas.

Nanostruktūros sustiprinto Ramano spektroskopijos tyrimams

Gytautė Sirgėdaitė¹, Lina Mikoliūnaitė^{1,2}

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

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

Ramano spektroskopija – virpesinės spektroskopijos metodas skirtas medžiagų molekulinio lygmens informacijai gauti: medžiagos sandarą, struktūrą, sąveikas tarp molekulinų grupių. Jis taip pat skirtas atskirų funkcinių grupių ar junginių identifikavimui. Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (SERS) yra galingas metodas, leidžiantis labai jautriai aptikti mažų koncentracijų (iki 10^{-9} M) analites, pavyzdžiui, baltymus ir kitas biomolekules, stiprinant elektromagnetinius laukus, kuriamus sužadinant lokalizuotus paviršiaus plazmonus. Norint gauti kuo didesnę Ramano sklaidos signalo sustiprinimą SERS metode dažnai naudojami koloidiniai aukso (Au) ir sidabro (Ag) nanodalelių (ND) tirpalai ar struktūros. Populiariausios sferinės formos Au ir Ag ND ir jų dydis gali svyruoti nuo 10 iki 100 nm. Siekiant praplėsti metodo galimybes bandomos pritaikyti ir įvairios ND formos (prizmės, kubinės, strypeliai, lazdelės), kiti metalai (Cu, Pt, Fe, Co) bei skirtingų metalų vienoje struktūroje derinimas (branduolio-apvalkalo, hibridinės ND).

Šiame tyrime buvo susintetintos skirtingos nanostruktūros: magnetinės geležies FeND dalelės dekoruotos Au ir Ag ND, sidabro nanolazdelės AgNW bei Au dalelės apvilktos Ag sluoksniu Au@Ag branduolio-apvalkalo ND. Susintetintos struktūros buvo pritaikytos paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje.

61

SILAR synthesis and XRD characterization of Ag₂S layers on PET/PVC construction textile

Emilija Skuodaitė, Valentina Krylova

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

The synthesis of metal sulphide structures has attracted much interest for many applications in different electronic components and devices like solar selective coatings, photoconductive and photovoltaic cells. Among these materials is silver sulphide (Ag₂S), as it is an important semiconductor with a narrow and direct bandgap of approximately 1.1 eV, a high absorption coefficient (10^4 cm^{-1}) and important optical properties. The bandgap of a semiconductor is an important factor for solar cells; a high-bandgap material is preferred for higher open-circuit voltage due to less recombination and a higher potential barrier, while a low-bandgap material is preferred for higher short-circuit current, due to greater absorption.

The concept of flexible photovoltaic systems is one of the most promising forms of technology when it comes to the possibility of promoting the development of buildings with near-zero energy consumption and the use of renewable energy sources. An increasing number of researchers are using construction textiles as an alternative substrate in the fabrication of nanogenerators because textiles have many advantages such as non-toxicity, low cost, foldability, and ease of wearing.

Composite materials consisting of textiles modified with thin films of desired semiconductors are attracting increasing interest due to the characteristic physical and chemical properties that guide their potential applications.

The aim of this work was the synthesis of Ag₂S layers by the SILAR method on pre-treated construction textile substrates made of polyethylene terephthalate (PET) coated with polyvinylchloride (PVC) by varying the number of deposition cycles and XRD analysis of the resulting composites to better understand the control of the size and shape of the deposited structures. The surface of construction textiles is covered with a layer of lac, the main purpose of which is to protect the material from the effects of environmental factors. Textile surface modification is necessary before the deposition of Ag₂S thin films. The first stage of modification included mechanical roughening, and the second stage was thermo-alkaline treatment. Briefly, the substrates were alternately immersed in aqueous solutions of Na₂S₂O₃ and AgNO₃ at 20 °C. Depending on the number of Ag₂S deposition cycles, the color of the substrates changed from white to light brown to dark brown and even black. The characterization of Ag₂S layers on a PET/PVC substrate by XRD analysis revealed a polycrystalline nature, which is in good agreement with available data for α-Ag₂S (acanthite) (JCPDS No. 14-0072). The size and shape of deposited structures depend on the number of the deposition cycles.

62

Elektrocheminio imuninio jutiklio skirto antikūnų prieš SARS-CoV-2 spyglio baltymą nustatymui kūrimas

Kristina Sobol, Benediktas Brasiūnas, Almira Ramanavičienė

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

Elektrocheminių imuninių jutiklių veikimas pagrįstas specifinės antikūnų ir antigenų sąveikos registravimu dėka išmatuojamo elektrocheminio signalo. Antigenai, specifiskai sąveikaujantys su antikūnais, dažnai imobilizuojami ant paviršių, modifikuotų nanomedžiagomis, kurios dėl savo ypatingų savybių užtikrina efektyvesnę imuninių jutiklių veikimą. Lyginant su tradiciniais imuniniais jutikliais, nanomedžiagomis modifikuoti jutikliai pasižymi patobulintomis savybėmis ir suteikia privalumų klinikinėje diagnostikoje bei daugelyje kitų biomedicinos sričių. Tačiau tyrimus atliekant realiuose mėginiuose, analiziniam signalui didelę įtaką turi nespecifinės sąveikos su paviršiumi ir kitais baltymais, dėl kurių užregistruotas signalas gali būti interpretuotas klaidingai. Šio darbo tikslas buvo sukurti aukso nanostruktūromis (AuNS) modifikuotą elektrocheminį imuninį jutiklį, skirtą antikūnų prieš SARS-CoV-2 spyglio (S) baltymą nustatymui, įvertinti įvairių AuNS įtaką jutiklio veikimui bei iširti nespecifinės sąveikos mažinimo būdus.

AuNS ant indikatorinio grafito elektrodo (GE) buvo chronoamperometriškai susintetintos iš $3 \text{ mmol L}^{-1} \text{ HAuCl}_4$ vandeninio tirpalo su $0,2 \text{ mol L}^{-1} \text{ H}_2\text{SO}_4$. Tuo tarpu 13 nm aukso nanodalelės (AuND) buvo elektrochemiškai nusodintos ant GE paviršiaus adsorbcijos būdu iš koloidinio tirpalo. Skirtingais būdais modifikuoti GE buvo charakterizuoti kvadratinės bangos voltamperometrijos (KBV) metodu. Nustatyta, kad chronoamperometriškai susintetintos AuNS buvo tinkamesnės elektrocheminio imuninio jutiklio kūrimui, nei elektrochemiškai nusodintos AuND. Imuninio jutiklio konstravimui, GE/AuNS paviršiuje buvo suformuotas savitvarkis monosluoksnis (SAM) iš merkaptoundekano rūgšties tirpalo etanolyje. S baltymas buvo kovalentiškai prijungtas prie GE/AuNS/SAM paviršiuje esančių aktyvuotų karboksilo grupių. Paruoštas GE/AuNS/SAM/S elektrodas buvo pritaikytas specifinių monokloninių m-anti-S antikūnų aptikimui skirtingos koncentracijos antikūnų tirpaluose. Iš gautų KBV rezultatų nustatyta m-anti-S koncentracijos kalibracinė kreivė ir tiesiškumo intervalas: nuo 1 iki 10 nmol L^{-1} .

Sukonstruoto elektrocheminio imuninio jutiklio patikimumui įvertinti buvo iširta GE/AuNS/SAM/S sąveika su nespecifiniais antikūnais. Nustatyta, kad nespecifinė sąveika turi didelę įtaką KBV analiziniam signalui, todėl buvo išbandyti įvairūs šios sąveikos mažinimo būdai: aktyvuotų karboksilo funkcinių grupių blokavimas etanolaminu, laisvo paviršiaus ploto blokavimas $0,5 \%$ jaučio serumo albumino (JSA) ir $0,5 \%$ Tween 20 tirpalais. Eksperimentiškai nustatyta, kad aktyvuotų karboksilo grupių blokavimas etanolaminu netinka sukurtai sistemai. Tuo tarpu GE/AuNS/SAM/S laisvą paviršiaus plotą blokuojant $0,5 \%$ JSA ir $0,5 \%$ Tween 20 tirpalais, nespecifinę sąveiką pavyko sumažinti dvigubai.

Padėka. Šis tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos (LMT) Nr. S-ST-23-193 lėšomis.

63

Cr³⁺ jonais legiruoto Ca₃(PO₄)₂ sintezė ir optinių savybių tyrimai

Jonas Stadulis, Sapargali Pazyzbek, Artūras Katelnikovas, Aleksej Žarkov

Chemijos institutas, Vilniaus universitetas

Kalcio fosfatai (CPs) priklauso grupei medžiagų, kurios turi platų panaudojimą įvairiose srityse, pavyzdžiui, medicinoje, kaulų regeneracijoje, sensoriuose, kataliziniuose procesuose, taip pat kaip sorbentas šalinti sunkiesiems metalams iš vandens ar legiruojama matrica kitų jonų įterpimui kuriant optines medžiagas. Viena dažniausiai naudojamų CPs formų biokeramikoje yra beta-trikalčio fosfatas (β -TCP, Ca₃(PO₄)₂), be to, šioje medžiagoje galima pakeisti Ca jonus kitais, optiškai aktyviais, jonais, taip jai suteikiant liuminescencines savybes.

Šiame darbe Cr³⁺ legiruoti β -TCP milteliai su įvairiomis Cr koncentracijomis buvo sintetiniai šlapio nusodinimo metodu naudojant Ca(NO₃)₂·4H₂O, Cr(NO₃)₃·9H₂O ir (NH₄)₂HPO₄ kaip pradines medžiagas. Gautos nuosėdos buvo nufiltruotos, plaunamos vandeniu bei etanoliu ir per naktį džiovinamos 50 °C temperatūroje. Tam, kad būtų gauta β -TCP fazė, išdžiūvę milteliai buvo sutrinti ir kaitinami 1000 °C temperatūroje 5 valandas. Gautų medžiagų fazinis grynumas ir kristalinė struktūra buvo įvertintos Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) ir Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopijos (FTIR) metodais. Cheminė sudėtis ištirta naudojant induktyviai susietos plazmos optinės emisijos spektrometrą (ICP-OES). Morfologiniai susintetintų miltelių ypatumai buvo tiriami naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (SEM). Optinės savybės nagrinėtos atliekant fotoluminescencinius tyrimus.

Padėka. Projektas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos, sutarties Nr. S-MIP-23-85.

***Olea europaea* žiedadulkių sezono vertinimas naudojant palydovų duomenis**

Edvinas Stonevičius^{1,2}, Carmen Galán Soldevilla³, José Antonio Oteros³, Ingrida Šaulienė², Laura Šukienė²

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Vilniaus universiteto Šiaulių akademija

³Kordobos universiteto Mokslų fakulteto Botanikos, ekologijos ir augalų fiziologijos katedra

Olea europaea (alyvmedžių) augimo arealuose jų žiedadulkės daro didelį poveikį asmenims, kurie kenčia nuo alergijos ar kvėpavimo takų ligų, tokių kaip astma. Viduržemio jūros regiono šalyse alyvmedžio žiedadulkės yra viena iš svarbiausių kvėpavimo takų alergijos priežasčių ir yra pagrindinė alergijos priežastis Pietų Ispanijoje bei kai kuriuose Italijos regionuose.

Klimato kaita lemia temperatūros ir kritulių režimo pokyčius, o alyvmedžių vegetacijos intensyvumas ir fenologija priklauso nuo sudėtingo klimatinių veiksnių komplekso. Dažniausiai alyvmedžių fenologija siejama su temperatūros kaita šaltuoju metų laiku, vegetacijos sezono aktyvios temperatūros suma ir vandens stresu. Klimato poveikio kompleksškumas lemia tai, kad numatyti alyvmedžių fenologiją, tame tarpe ir žydėjimo sezono pradžia bei intensyvumą, yra sudėtinga. Papildomą neapibrėžtumą prideda antropogeninė veikla, pavyzdžiui, alyvmedžių drėkinimas, kuris padidina ne tik derlių bet ir skatina intensyvesnį žydėjimą. Dėl veiksnių gausos alyvmedžių sezono prognozavimui pastaraisiais metais taikomi dideliais duomenų kiekiais paremti mašininio mokymosi arba dirbtinio intelekto modeliai. Šiems modeliams pavienių, antžeminiams metodais surinktų alyvmedžių fenologijos duomenų neužtenka. Vienas iš būdų gauti daugiau informacijos yra nuotoliniai stebėjimai su dirbtiniais Žemės palydovais. Šiais palydovais galima įvertinti atspindžio nuo alyvmedžių augimviečių ar individualių medžių spektrą ir pagal jį nustatyti augalų fiziologinius rodiklius. Vienas iš sunkiausių iššūkių yra surasti atspindžio spektru paremtus radiometrinius indeksus, kurie geriausiai apibūdintų norimas augalų fiziologijos savybes.

Šiame darbe siekiama naudojant Kordobos universiteto aerobiologijos tyrimų stotyje 2010-2023 metais užfiksuotus alyvmedžio žydėjimo sezono rodiklius susieti su vegetacija apibūdinančiais radiometriniais indeksais. Tyrime pagal vidutinės raiškos MODIS instrumento duomenis Google Earth Engine platformoje buvo įvertintas augalijos būklę atspindintis NDVI indeksas. Indeksas skaičiuotas aplink stebėjimo vietą išsidėsčiusiose skirtingo dydžio ir medžių amžiaus alyvmedžių auginimo plotuose. Tyrimo rezultatai parodė kad žydėjimo sezono pradžia ir žiedadulkių koncentracijos maksimumo laikas kai kuriuose iš tirtų laukų sutampa su ženkliu NDVI indekso sumažėjimu, o tai rodo aukštą tolimesnio tyrimo perspektyvą. Vystant tyrimą, bus siekiama įvertinti kaip skirtingas medžių amžius, tankis, augalinės dangos struktūra veikia atspindžio spektro pokyčius alyvmedžių žydėjimo metu. Vėliau bus siekiama parinkti ar skurti labiausiai alyvmedžių žydėjimo pradžią indikuojantį radiometrinį indeksą.

65

Landsat-8 palydovo duomenų analizė mašininio mokymosi metodais Lietuvos ežerų vandens paviršiaus temperatūros tyrimams

Rimantas Stanaitis, Edvinas Stonevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Ežerų vandens paviršiaus temperatūros (EVPT) duomenys gali būti panaudojami sudarant įvairias hidrologines ar klimatologines prognozes, tiriant ežerų bei aplinkines ekosistemas ir kitur. Visgi, nuolatinis in-situ EVPT matavimas yra sudėtingas dėl finansinių, logistinių bei kitų priežasčių ir todėl Lietuvoje yra atliekamas tik vienuolikoje ežerų. Šiame tyrime siekta sukurti ir validuoti metodiką, kuri leistų Lietuvos EVPT įvertinti nuotoliniu būdu – naudojantis Landsat-8 palydovo terminės infraraudonosios spinduliuotės kanalų B10 (10,60-11,19 μ m) ir B11 (11,50-12,51 μ m) duomenimis.

Analizei naudojome 2014-2023 metų laikotarpio Landsat-8 palydovo žemės temperatūros modeliu (STM) (Ermida ir kt. 2020) įvertintos ir in-situ išmatuotos EVPT duomenis dešimčiai Lietuvos ežerų. Visiems palydoviniams vaizdams pritaikėme debesų bei jų šešėlių šalinimo filtrus ir nagrinėjome palydovinius duomenis surinktus tik iš bent per 45 metrus nuo kranto linijos nutolusio ežero ploto, taip išvengdami priekrantės augmenijos bei žemės įtakos matavimų tikslumui.

Sudarėme du atsitiktinio miško modelius: pagrįstus (i) Landsat-8 B10 ir B11 kanalų ryškio temperatūros duomenimis ir (ii) STM modeliu įvertintos paviršiaus temperatūros duomenimis. Modeliuose taip pat naudojome ežerų morfometrinius ir geografinės padėties parametrus matavimo mėnesį bei oro temperatūrą. EVPT į oro temperatūrą reaguoja su tam tikru vėlavimu, todėl įvertinome koreliacijos koeficientus tarp EVPT ir oro temperatūros įvesdami skirtingus laiko postūmius ir nustatėme, jog šiltuoju metų laikotarpiu šis reakcijos laikas lygus apytiksliai 4 val., taigi sudarydami modelius naudojome 4 val. prieš palydovo praskridimą išmatuotos oro temperatūros duomenis. EVPT vertinimo modeliai buvo sudaryti naudojantis ~80% turimų duomenų, likę ~20% naudoti modelio validacijai. Validacijos metu (i) modeliui nustatyti $R^2=0,91$, $RMSE=1,76^{\circ}C$ bei $MAE=1,38^{\circ}C$ tinkamumo rodikliai, o (ii) – $R^2=0,91$, $RMSE=1,72^{\circ}C$ ir $MAE=1,34^{\circ}C$. Be to, nustatyta, jog (ii) modelis pasižymėjo mažesne tinkamumo rodiklių sklaida tarp skirtingų ežerų. Taip pat pastebėta, kad abiejų šių modelių tikslumas nepriklauso nuo ežerų morfometrinių savybių ar geografinės padėties.

Padėka. Tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos, sutarties Nr. P-ST-23-54.

Literatūra

Ermida, S. L., Soares, P., Mantas, V., Göttsche, F. M., & Trigo, I. F. (2020). Google earth engine open-source code for land surface temperature estimation from the landsat series. *Remote Sensing*, 12(9), 1471.

Microplastic Particles Distribution in Lithuanian Rivers and Their Chemical and Physical Properties

Tomas Stonkus, Ieva Uogintė, Steigvilė Byčenkienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research, Saulėtekio av. 3, LT-10257 Vilnius

Plastic was one of the greatest inventions created by man. One of the first synthetic plastics was made in the early 20th century. It was made by combining phenol and formaldehyde. The product was heat-resistant and could be easily formed into any shape or form, with a huge array of applications: from electrical insulators to household items like combs and hairbrushes, jewelry, ornaments and so on. In the following years, adjustments were made to upgrade this product even more. At the moment, plastics are one of the most widely used materials in the world. Unfortunately, plastics were continuously produced in huge masses, which, combined with their chemical and physical stability and slow degradation time, went from being one of the greatest materials ever invented to one of the biggest pollution problems we face today. Plastic itself provides a wide range of problems: pollution of water bodies, harm to wildlife, expensive and difficult cleaning up campaigns. However, it doesn't stop there. As plastic materials are affected by mechanical and chemical degradation, they create an entirely new problem that we call microplastics.

Microplastics are tiny particles of plastic, typically less than 5 millimeters in size, that are found throughout the environment. Microplastics pose a real threat not only to nature but also to us – humans with all of the other living organisms. Little microplastics particles find their way inside our bodies throughout long food chains and can cause serious health issues. Plastic pollution is most common in oceans and seas and since rivers provide a direct water supply for them it is necessary to better analyze them in helping to locate the main source of these pollutants.

This study aims to collect and analyze Lithuanian river samples by distinguishing the size, color, form, and chemical composition of MP particles. This research aims to help further understand the microplastic pollution levels in Lithuanian rivers.

Acknowledgement. We would like to thank the schools, teachers, and students who participated in the Plastic Pirates project and helped collect data on litter pollution along the Lithuanian riverbanks. Also, we would like to thank the Lithuanian non-formal education agency for the opportunity to join the Plastic Pirates Lietuva project.

Enhancing Glucose Detection Through the Application of Gold Nanorods

Marina Šapauskienė, Adriana Kuksa, Aleksandr Šemis, Viktorija Lisytė, Almira Ramanavičienė, Anton Popov

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

Glucose monitoring is widely applied in various medical facilities to assess the symptoms of diabetes mellitus. This procedure is essential for diabetic patients as excessive glucose levels can cause many comorbidities such as vision loss, kidney failure, retinopathy, and strokes. Glucose levels can be detected in various biological fluids such as blood, urine, saliva, interstitial fluid (ISF), and tears. Electrochemical measurements are often used for glucose monitoring due to their high sensitivity, selectivity, and simplicity. The chronoamperometry is an effective electrochemical technique for glucose sensors offering several advantages such as ease of use, short analysis time, high sensitivity, low detection limit, and low cost.

Gold nanoparticles (AuNPs) are attracting a lot of research interest due to their unique physical and chemical properties that make them versatile materials suitable for applications in various fields such as medicine, environment, and engineering. Among AuNPs, gold nanorods (AuNRs) are in high demand due to the tunability and sensitivity of their longitudinal surface plasmon resonance. The anisotropic structure of AuNRs exhibits two surface plasmon bands corresponding to surface electron oscillation on the transverse and longitudinal sides. The size, shape, and surface functionality of AuNPs are dependent on the synthesis method.

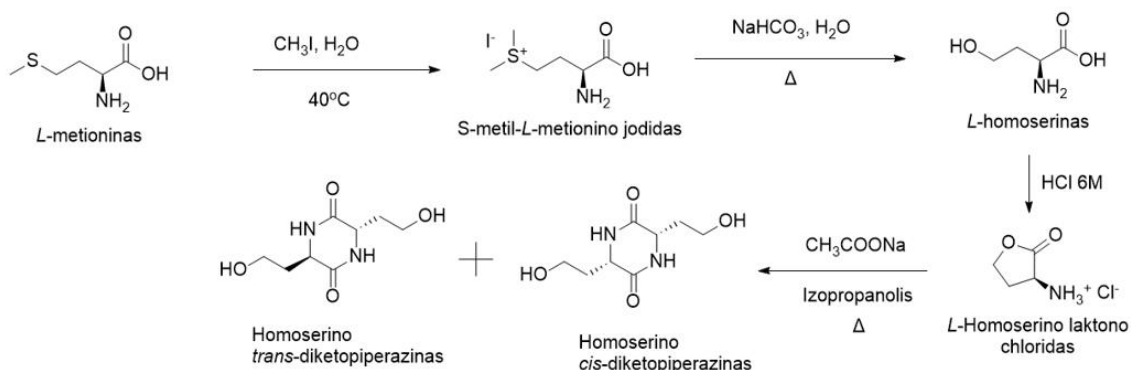
The main aim of this study was to synthesize AuNRs of different sizes using different synthesis methods and to use them for the chronoamperometric detection of an enzymatic glucose sensor. The obtained AuNRs were characterized using SEM and UV-VIS techniques. These techniques enabled a detailed description of the structural and optical properties of the AuNRs and provided valuable insights into the synthesis. An enzymatic glucose sensor was developed using graphite electrodes modified with AuNRs and glucose oxidase (GOx). Electrodes have been characterized by chronoamperometry and cyclic voltammetry. The cyclic voltammetry was used to evaluate the electroactive surface area of the electrodes modified with AuNRs. The results of the electrochemical characterization of the electrodes were crucial for a deeper understanding of the potential applications of AuNRs.

Homoserino darinių sintezės iš metionino tyrimas. Aminorūgšties fragmento apsauga suformuojant diketopiperaziną

Vilius Šiožinys, Gražina Petraitytė, Viktoras Masevičius

Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas

Atliekant aminorūgščių darinių sintezę iš komerciškai nebrangiai įsigijamo metionino, dažnai būtina apsaugoti tiek amino, tiek ir karboksirūgšties funkcines grupes. Vienas iš patogesnių įrankių funkcinių grupių apsaugoje yra kelių funkcinių grupių apsauga vienu metu. Siekiant atlikti pakeitimus aminorūgšties šoninėje grandinėje yra patogu iš dviejų aminorūgščių molekulių suformuoti diketopiperaziną taip apsaugant tiek amino, tiek ir karboksirūgšties funkcines grupes. Tiriant diketopiperaziną sudarytą iš dviejų *L*-homoserino molekulių, ^{13}C BMR spektrinės analizės būdu buvo pastebėta, kad be tikslinio *cis*-diketopiperazino sudaryto iš dviejų *S*-homoserino molekulių susidarė ir nedidelis kiekis – *trans*-diketopiperazino, kuris gali susidaryti tik iš *S* ir *R* homoserinų mišinio. Šio tyrimo tikslas yra ištirti kuriame sintezės etape vyksta *S*-izomero dalinė racemizacija ir šį etapą optimizuoti, siekiant sumažinti ar eliminuoti racemizaciją. Tikslui pasiekti kiekvieno sintezės etapo produktas buvo susintetintas ir išgrynintas. Norint nustatyti kurioje sintezės stadijoje vyksta izomerizacija, tarpinių produktų chiraliskumas buvo tiriamas HPLC su chiraline kolona.



1 pav. Homoserino diketopiperazino sintezės schema.

Investigation of Na₂SO₃ as a Reducing Agent in Aqueous Sodium Ion Batteries

Dovilė Škarnulytė^{1*}, Milda Petrulevičienė², Jurga Juodkazytė², Jurgis Pilipavičius^{1,2}, Linas Vilčiauskas^{1,2}

¹Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, Vilnius University, Vilnius, Lithuania;

²Centre for Physical Sciences and Technology, Sauletekio av. 3, LT-10257, Vilnius, Lithuania;

Currently, energy storage systems predominantly rely on Li-ion batteries, which are costly, environmentally unfriendly, and hazardous due to flammable electrolytes. As a result, researchers are developing safer, more sustainable, and cost-effective alternatives. Aqueous Na-ion batteries are one of the most promising options to replace Li-ion batteries in the area of stationary energy storage. However, their energy densities are lower due to the narrow electrochemical stability window of water. Furthermore, parasitic processes, such as hydrogen evolution and oxygen reduction reactions, are considered to be the main problem in aqueous Na-ion batteries, leading to self-discharge and irreversible capacity fade (Plečkaitytė et al., 2021). To overcome these limitations, new electrolyte design is being sought. Previous studies have shown that a small amount of hydrazine as a reducing agent can eliminate parasitic oxygen reduction reaction (Petrulevičienė et al., 2023). In this study we investigated the effect of an alternative reducing agent - sodium sulphite in order to test whether the introduction of a mild reducing agent into an aqueous sodium sulphate electrolyte could chemically reduce the dissolved oxygen and improve the performance of symmetric bipolar Na₃VTi(PO₄)₃|Na₃VTi(PO₄)₃ (NVTP|NVTP) batteries assembled in a coin-type cells. Cyclic voltammetry and galvanostatic charge-discharge (GCD) techniques were used to investigate the performance of NVTP electrodes and NVTP|NVTP coin-type cells. The effect of varying concentrations of sodium sulphite on long-term cycling stability, self-discharge time and Coulombic efficiency of charging process was evaluated.

References

Plečkaitytė, G., Petrulevičienė, M., Staišiūnas, L., Tediashvili, D., Pilipavičius, J., Juodkazytė, J., & Vilčiauskas, L. (2021). Understanding and mitigation of NaTi₂(PO₄)₃ degradation in aqueous Na-ion batteries. *Journal of Materials Chemistry. A, Materials for Energy and Sustainability*, **9**, 12670-12683.

Petrulevičienė, M., Traškina, N., Pilipavičius, J., Juodkazytė, J., & Vilčiauskas, L. (2023). The use of reductive agents for developing capacity balanced aqueous Sodium-Ion batteries. *Batteries & Supercaps*, **6**(7), e202300129.

Vandens lygio vertinimas upėse naudojant palydovinius Copernicus duomenis

Rokas Tamašauskas, Dalia Grendaitė

Vilniaus universitetas, Chemijos ir Geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Upės ir ežerai yra svarbūs gėlo vandens išteklių, naudojami geriamojo vandens tiekimui daugelyje pasaulio šalių, bei vanduo yra būtinas visoms gyvybėms formoms. Vandens parametrų stebėjimai yra sudėtingi dėl didelių išlaidų ir vietų neprieinamumo. Nuotoliniai stebėjimai yra ekonomiškai efektyvesni ir gali būti pritaikomi vandens parametrams stebėti tiek mažuose, tiek didesniuose vandens telkiniuose bei logistiškai sudėtingose teritorijose. Žinios apie regioninius vandens lygio pokyčius upėse ir ežeruose yra svarbios vertinant stichinių nelaimių riziką, tokių kaip sausrų ir potvynių, kurių per pastaruosius dešimtmečius vis daugėja (Guha-Sapir ir Vos, 2011). *In situ* stočių, kuriose matuojamas upių nuotėkis, visame pasaulyje mažėja, panašią tendenciją galima pastebėti ir Lietuvoje. Apskritai *in situ* vandens lygio duomenis tvarko valstybinės institucijos, dėl to dažnai sunku gauti duomenis. Dėl ribotos *in situ* duomenų aprėpties yra būtina naudoti palydovinės altimetrijos matavimo duomenis (Schwatke ir kt., 2015).

Šio darbo tikslas – įvertinti Copernicus pasaulinės sausumos stebėjimo paslaugos duomenų potencialą vandens lygio nustatymui Lietuvos upėse. Tyrimo objektais buvo pasirinktos į Nemuno upės baseiną (tik Lietuvoje teritorijos dalyje) patenkančios palydovinės altimetrijos matavimo stotys (tyrime naudoti 26 stočių duomenys), kurios yra arti *in situ* vandens matavimo stočių vietų (0-20 km atstumu). Palydoviniai duomenys gaunami kas 9 arba 27 dienas, priklausomai nuo palydovo misijos (skirtingos misijos turi skirtingus praskridimo dažnius, toje pačioje teritorijoje). Tyrime naudoti 2016-2023 metų palydoviniai ir *in situ* duomenys. Prieš atliekant analizę naudoti altimetrijos duomenys buvo atitinkamai apdoroti – aukščio duomenys, kurių paklaida didesnė nei apytiksliai 25 centimetrai buvo išimti iš duomenų sekų. Altimetrijos duomenys nagrinėti atliekant statistinę ir kartografinę analizę. Gauti rezultatai parodė aukštą atitikimą tarp *in situ* ir palydovinių duomenų (koreliacijos koeficientai svyruoja nuo 0,51 iki 0,96).

Literatūra

- Guha-Sapir D., & Vos F. (2011). Quantifying Global Environmental Change Impacts: Methods, Criteria and Definitions for Compiling Data on Hydro-meteorological Disasters. In *Hexagon series on human and environmental security and peace*, 693–717.
- Schwatke, C., Dettmering, D., Bösch, W., & Seitz, F. (2015). DAHITI – an innovative approach for estimating water level time series over inland waters using multi-mission satellite altimetry. *Hydrology and Earth System Sciences*, 19(10), 4345–4364.

The effect of monoatomic oxygen on carbon-sputtered quartz crystals

Eivydas Trioška¹, Mindaugas Viliūnas², Greta Merkininkaitė¹, Simas Šakirzanovas¹

¹Institute of Chemistry, Vilnius University

²Institute of Chemical Physics, Vilnius University

Atomic oxygen (AO), a predominant form of oxygen in outer space, offers an effective and minimally invasive way to remove carbon-based contaminants from various surfaces without health and environmental concerns. The efficiency of AO cleaning was estimated using a Quartz Crystal Microbalance (QCM) sensor, carbon-sputtered 6 MHz quartz crystals and a K-type thermocouple, while AO was introduced with a plasma generator.

Figure 1 explains the procedure in four steps. Step 1: initial mass and ambient temperature measurements ($m_1 = -0.032 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $t_1 = 22.3 \text{ }^\circ\text{C}$) over a 4-minute period. Step 2: mass change and temperature measurements ($m_2 = 0.226 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $t_2 = 20.0 \text{ }^\circ\text{C}$) during an 8-minute period with gas flow (without plasma). Step 3: highest instantaneous mass change and temperature measurements ($m_3 = -50.663 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $t_3 = 70.5 \text{ }^\circ\text{C}$) with plasma for a 4-minute period. Step 4: mass change and temperature measurements ($m_4 = -5.985 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $t_4 = 24.4 \text{ }^\circ\text{C}$) after a 13-minute cooldown. Results are promising for upcoming measurements, because both instantaneous and long-lasting mass changes are present ($m_3 = -50.663 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ and $m_4 = -5.985 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ respectively).

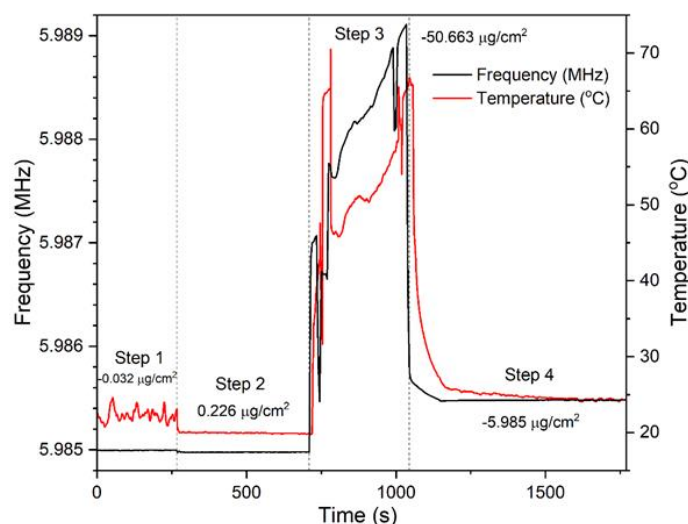


Figure 1. Frequency and temperature correlation.

Acknowledgment. The authors acknowledge financial support from the European Union (Grant Number: 101061336).

Durpių susiskaidymo įtaka nuosėdų litologijai ir geocheminei sudėčiai

Augustė Ūsaitė¹, Laura Gedminienė^{1,2}

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Gamtos tyrimų centras

Pelkių atkūrimas, saugojimas ar teisingas durpžemių sudėties įvertinimas prieš panaudojimą yra labai svarbus CO₂ dujų emisijoms žemės ūkio sektoriuje sumažinimui ir absorbcinio potencialo didinimui. Žinoma, jog durpės susiskaidymo laipsnis yra svarbus parametras suteikiantis informacijos apie pelkės vystymosi raidą ir vandens lygio kitimą. Tačiau geocheminė ir litologinė sudėtis skirtingu durpės susiskaidymo laipsnio atveju žinoma mažai. Tyrimo tikslas yra atlikti durpių litologinę ir geocheminę analizę bei įvertinti gautų parametrų pokyčius durpių susiskaidymo laipsnio atžvilgiu. Tyrimo objektas – Juodymo pelkė, esanti Rokiškio rajone. Tyrimų metu tirtas 6,9 m gylio gręžinys, suskirstytas 2 cm intervalais (viso 345 mėginiai), iš kurių tyrimams lygiais intervalais atrinkti 11 mėginių.

Litologinė nuosėdų sudėtis vertinta VU, naudojant deginimo nuostolio metodą, apskaičiuojant nuosėdose esantį organinės medžiagos kiekį ir drėgnį. Lazeriniu spektrometru GTC nustatytas nuosėdų dalelių dydis: a) nepašalinius organikos, b) pašalinius organiką. Naudojant MFK1-B prietaisą, GTC išmatuotas visos nuosėdų kolonėlės magnetinis imlumas (MS). Nuosėdų cheminė sudėtis matuota VU EDX prietaisu. Tyrimo metu įvertinta C, O, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ca, Ti ir Fe elementų koncentracija. Durpių rūgštingumas (pH) nustatytas potenciometrinės analizės metodu. Durpių susiskaidymo laipsnis matuotas LAMMC pagal Lietuvos standartizacijos departamento 2022 m. metodiką. Nuosėdų kolonėlė datuota naudojant AMS metodą FTMC. Tyrimų rezultatai apdoroti naudojant RStudio programą: interpoliacijos būdu trūkstamuose gyliuose sukuriant reikalingus duomenis.

Gauti rezultatai leido įvertinti litologinius pokyčius, nuosėdų cheminę sudėtį ir susiskaidymo laipsnį. Vidutinis durpių drėgnumas yra 90 %, pH 5,17. Apatiniame intervale organika siekia tik 8-9 %, aukščiau organikos kiekis išauga iki 98 %. MS 695 - 630 cm intervale labai aukštas, vidurkis siekia 1,43E-08 m³/kg, tačiau nuo 630 cm MS sumažėja vidutiniškai iki -9,37E-09 m³/kg. Granulometriniai matavimai rodo, kad didesnės dalelės dominuoja mėginiuose iš kurių organika nėra pašalinta. Mėginiuose pašalinius organiką dominuoja aleurito frakcija, tuo tarpu apatiniame intervale gausiau molio ir stambesnės frakcijos dalelių. Skaidos laipsnio vidurkis – 46,9 %. Matuotų elementų koncentracijos rodo jog apatiniame sluoksnyje dominuoja didesni Al, Si, Ti ir Fe kiekiai. Aukščiau durpėje dominuoja C, Na, S, Mg, K ir P. Tyrimų rezultatai rodo aplinkos evoliuciją nuo žemapelkės į aukštapelkę. Iki 9500 kal. m. pr. d. buvo negilus ežeras, dėl šaltų ir sausų klimato sąlygų sedimentacija buvo lėta. Maždaug prieš 8400 metų pradėjo formotis žemapelkė, kuri egzistavo apie 4000 metų, ir prieš 4500 metų tapo aukštapelke. Ties 50 cm gyliu matoma minimali žmogaus veikla, padidėja S, Al, Na ir K elementų kiekis ir MS. Pakitus redukciniams sąlygoms ir pakilus vandens lygiui, pradeda formotis mažos skaidos durpė.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba, sutarties Nr. P-ST-23-164.

Nikelio molibdeno katalizatoriai vandenilio generavimui

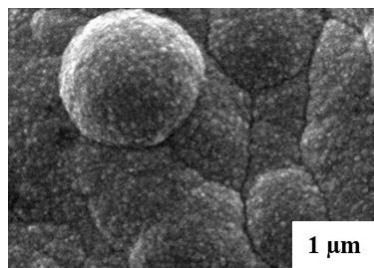
Gitana Valeckytė, Zita Sukackienė, Jūratė Vaičiūnienė, Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, Eugenijus Norkus

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

Vandenilis – gera alternatyva pakeičianti anglį, naftą ir gamtines dujas. Priežastis, kodėl reikia keisti iškastinį kurą yra ta, kad jis nuolat senka, o degdami tokio kuro produktai teršia aplinką ir sukelia šiltnamio efektą, taip prisidedant prie klimato kaitos. Viena iš svarbiausių vandenilio kaupimo medžiagų savybių yra didelė gravimetrinė vandenilio talpa. Natrio borohidridas laikomas viena tinkamiausių medžiagų vandenilio saugojimui. Jis pasižymi dideliu vandenilio kiekiu, yra pigus, draugiškas aplinkai, stabilus šarminiuose tirpaluose, nedegus, netoksiškas, veikia švelniomis sąlygomis. Pažymėtina, kad borohidrido hidrolizės reakcijos metu gaunamas ypač grynas vandenilis, kuris gali būti tiesiogiai naudojamas vandenilio kuro elementas. Kuro elementai, naudojantys gryną vandenilį, beveik neišskiria kitų teršalų, išskyrus vandenį. 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 NiMo(1)/Cu, NiMo(5)/Cu ir NiMo(10)/Cu katalizatorius, juos charakterizuoti ir įvertinti jų katalizines savybes natrio borohidrido hidrolizės reakcijai. Visos NiMo dangos buvo nusodintos ant Cu pagrindo paprastu cheminiu nusodinimo metodu, naudojant morfolino boraną kaip reduktorių. Buvo gauti katalizatoriai su skirtingu molibdeno masės procentiniu kiekiu: 1, 5 ir 10. Katalizatorių paviršiaus morfologija, struktūra ir cheminė sudėtis buvo ištirta naudojant lauko emisijos skenuojančią elektronų mikroskopiją (FESEM), rentgeno fotoelektroninę spektroskopiją (XPS) 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 visi minėti NiMo/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 dviejų komponentų NiMo(10) danga pasižymėjo didžiausiu kataliziniu aktyvumu. Nustatyta, kad šio katalizatoriaus aktyvacijos energija yra 65,5 kJ/mol ir H₂ išsiskyrimo greitis 0,26 ml/min esant 30 °C ir 5,45 ml/min 70 °C temperatūroje.



1 pav. FESEM vaizdas katalizatoriaus NiMo(10)/Cu.

Mechanocheminė perovskito CsPbBr₃ nanodalelių sintezė

Pijus Domantas Valentukevičius, Simas Šakirzanovas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Švino halogenidų perovskitai, kurių bendra formulė APbX₃ (A = Cs⁺, metilamonio katijonas, formamidinio katijonas; X = Cl⁻, Br⁻, I⁻), yra puslaidininkės medžiagos, kurios dėl savo optoelektroninių savybių yra perspektyvios šviesos diodų (Cai et al., 2019), skystųjų kristalų ekranų (Proteşescu et al., 2018) bei saulės elementų (Ullah et al., 2021) gamybai. CsPbBr₃ yra neorganinis šios klasės atstovas, kurio sintezė įprastai atliekama karšto įliejimo, kaitinimo mikrobangomis, bendro išsodinimo, sonocheminiu ar solvoterminiu metodais. Tuo tarpu mechanocheminis sintezės metodas, kurio metu medžiagos yra veikiamos mechaniškai, lyginant su minėtaisiais metodais turi esminį privalumą, nes yra lengvai perkeliamas į pramoninį mastą. Šio tyrimo tikslas yra mechanochemiškai susintetinti fluorescuojančias CsPbBr₃ nanodaleles (kvantinius taškus).

Šiame darbe buvo tiriama pradinių medžiagų, koordinuojančių ligandų ir jų santykinio kiekio su medžiaga bei naudojamų rutulių masės ir diametro įtaka sintetinamo CsPbBr₃ dalelių morfologijai, fazės grynumui ir fotoluminescencinėms savybėms. Tirti pradinių medžiagų tipai: CsBr bei PbBr₂ mišinys ir CsPbBr₃ kristalai. Nanodalelių sintezėms naudoti koordinuojantys ligandai: oleilamino ir oleino rūgšties mišinys, DDAB, CTAB. Fluorescencija pasižyminčius mėginius pavyko gauti tik naudojant paviršių pasyvuojančius ligandus. Atlikus gautų mėginių XRD analizes nustatyta, kad siekiant kuo didesnio gautos medžiagos grynumo, koordinuojantys ligandai į reakcijos mišinį turi būti įdėti tik susidarius CsPbBr₃ fazei. Remiantis SEM analizės duomenimis įvertinta, kad pradinės medžiagos ir naudojamo ligando tipas turi reikšmingą įtaką gaunamų nanodalelių morfologijai. Atlikus spektrofluorimetriją nustatyta, kad naudojamo koordinuojančio ligando tipas nulemia nanodalelių emisijos maksimumo padėtį – 519 nm oleilamino ir oleino rūgšties mišiniui, o DDAB ir CTAB ligandams atitinkamai 536 ir 535 nm.

Literatūra

Cai, W., Chen, Z., Chen, D., Su, S., Xu, Q., Yip, H., & Cao, Y. (2019). High-performance and stable CsPbBr₃ light-emitting diodes based on polymer additive treatment. *RSC Advances*, 9(47), 27684–27691.

Proteşescu, L., Yakunin, S., Nazarenko, O., Dirin, D. N., & Kovalenko, M. V. (2018). Low-Cost synthesis of highly luminescent colloidal lead halide perovskite nanocrystals by wet ball milling. *ACS Applied Nano Materials*, 1(3), 1300–1308.

Ullah, S., Wang, J., Yang, P., Liu, L., Yang, S., Xia, T., Guo, H., & Chen, Y. (2021). All-inorganic CsPbBr₃ perovskite: a promising choice for photovoltaics. *Materials Advances*, 2(2), 646–683.

3D boro karbido objektų gamyba naudojant stereolitografiją ir pirolizę

Robertas Virkėtis, Greta Merkininkaitė, Vaidas Klimkevičius, Simas Šakirzanovas

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas

Pastaraisiais dešimtmečiais keraminės medžiagos ir iš jų pagamintos 3D struktūros susilaukia vis daugiau dėmesio dėl išskirtinių mechaninių, cheminių ir terminių savybių. Didėjant susidomėjimui 3D keraminėmis struktūromis, didėja naujų medžiagų ir 3D darinių gamybos procesų paklausa. Viena universaliausių neorganinių laisvos formos 3D objektų formavimo technologija yra kompozitų arba metalorganinių medžiagų UV stereolitografija ir vėliau gautų objektų pirolizė. Homogeniškos fotoaktyvios medžiagos yra vertingos 3D spausdinime dėl jų geresnių savybių, užtikrinančių nuoseklią sudėtį ir tolygiai pasiskirsčiusias charakteristikas atspausdintuose objektuose. Tai pagerina struktūros vienodumą, padidintą mechaninį stiprumą ir sukuria lygesnę struktūros paviršiaus tekstūrą. Tačiau, dalelių įterpimas į monomerų mišinį gali sukelti netolygų dalelių pasiskirstymą, kas lemia nevienodą spausdinimo kokybę ir blogesnę struktūros vientisumą.

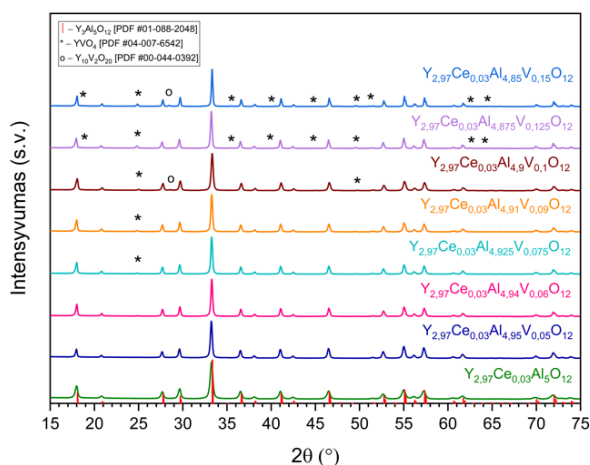
Boro karbidas dėl išskirtinių savybių yra tinkamas daugumai techninių pritaikymų. Ši medžiaga pasižymi patraukliomis savybėmis, tokiomis kaip mažas tankis, didelis patvarumas, puikus atsparumas dilimui, išskirtinis tvirtumas ir cheminis inertiškumas. Todėl šio tyrimo tikslas yra susintetinti boro organinį junginį, supolimerizuoti 3D objektus UV stereolitografu, atlikti jų pirolizę aukštoje temperatūroje, o gautas keramines 3D struktūras charakterizuoti ir ištirti jų savybes.

Pirmiausia esterifikacijos reakcijos metodu buvo susintetintas borą turintis organinis monomeras- 2-(5,5-dimetil-1,3,2-dioksaborinan-2-iloksi)etilmetakrilatas (dar vadinamas boro metakrilato monomeras). Sėkmingos sintezės patvirtinimui buvo atlikta protonų magnetinio rezonanso spektroskopinė analizė, kuri parodė, kad susidariusio produkto išeiga yra apie 60%. Boro akrilatas buvo polimerizuojamas naudojant UV 3D spausdintuvą, o gautos struktūros atkaitintos 1300°C temperatūroje N₂ atmosferoje. Išmatavus struktūrų matmenis prieš ir po atkaitinimo buvo nustatyta, kad linijinis susitraukimas po pirolizės yra ≈60%. Pagamintų keraminių objektų Rentgeno spindulių difrakcijos analizė buvo atlikta norint įrodyti kristalinės struktūros susidarymą ir bus pristatyta.

Boro organinio akrilato sintezė, jo 3D stereolitografija ir pirolizė yra perspektyvus metodas sudėtingų 3D boro karbido struktūrų kūrimui. Pademonstruotas kristalinio boro karbido 3D spausdinimo sprendimas gali reikšmingai praplėsti šios medžiagos spausdinimo galimybes pramonėje.

Diana Vištorskaja, Justina Gaidukevič, Artūras Katelnikovas, Aivaras Kareiva
 Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Plačiausiai naudojamos inertinės fosforo matricos medžiagos – yra granato struktūros junginiai, kurie priklauso oksidinių kristalų grupei (Pereira P. F. S. et al., 2010; Xia & Liu, 2016). Itrio aliuminio granatas ($Y_3Al_5O_{12}$, YAG) – tai vienas iš geriausiai žinomų dirbtinių granatų. YAG, legiruotas pereinamųjų metalų arba lantanoidų jonais, yra svarbi kietojo kūno lazerių medžiaga (Skudzius ir kt., 2012). Yra žinoma, kad vienas iš perspektyviausių būdų granato struktūros junginiams gauti yra zolių-gelių sintezės metodas, kurio metu gauti produktai pasižymi geru homogeniškumu bei aukštu faziniu grynumu. Taip pat sintezė yra trumpa ir nereikalauja aukštos temperatūros ar slėgio (Pereira P. F. S. et al., 2010; Xia & Liu, 2016). Atsižvelgiant į šio metodo privalumus, šiame darbe buvo pasirinkta zolių-gelių sintezė. Naujų funkcionalių medžiagų sintezė ir apibūdinimas – tai viena iš aktualiausių neorganinės chemijos mokslininkų tyrimo sričių, todėl šio darbo pagrindinis tikslas yra zolių-gelių sintezės metodu susintetinti naujos cheminės sudėties $Y_{2,97}Ce_{0,03}Al_{5-y}V_yO_{12}$ bei $Y_{2,97-x}Na_xEu_{0,03}Al_5O_{12}$ liuminoforus, pasižyminčius granato struktūra bei iširti juos įvairiais tyrimo metodais, tokiais kaip Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) analizė, Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FTIR), skenuojanti elektroninė mikroskopija (SEM). Taip pat bus išmatuoti mėginių emisijos ir sužadavimo spektrai, programa apskaičiuotos spalvinės koordinatės. 1 paveiksle yra pateiktos skirtingos cheminės sudėties $Y_{2,97}Ce_{0,03}Al_{5-y}V_yO_{12}$ junginių XRD difraktogramos.



1 pav. $Y_{2,97}Ce_{0,03}Al_{5-y}V_yO_{12}$ liuminoforų XRD difraktogramos.

Literatūra

- Pereira P. F. S. et al. (2010). Red, green and blue (RGB) emission doped $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG) phosphors prepared by non-hydrolytic sol-gel route. *J. Lumin.*, 130(3), 488–493.
- Xia Z., Liu Q., (2016). Progress in discovery and structural design of color conversion phosphors for LEDs. *Prog. Mater. Sci.*, 84, 59–117.
- Skudzius R., Pinkas J., Raudonis R., Selskis A., Juskenas R., Kareiva A. (2012). On the limiting radius of garnet structure compounds $Y_3Al_{5-x}M_xO_{12}$ ($M = Cr, Co, Mn, Ni, Cu$) and $Y_3Fe_{5-x}Co_xO_{12}$ ($0 \leq x \leq 2.75$) synthesized by sol-gel method. *Mat. Chem. Phys.*, 135, 479-485.

Funkcionalizuotų *m*-terfenilų sintezė, modifikacija ir chemofermentinis ašinių enantiomerų atskyrimas

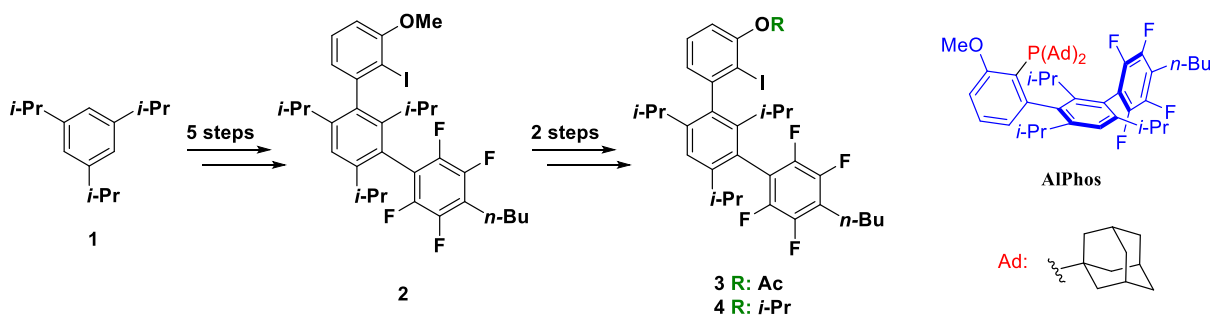
Kristupas Volbikas¹, Tomas Paškevičius², Ringailė Lapinskaitė², Nina Urbelienė³, Linas Labanauskas², Rolandas Meškys³

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

²VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centro Organinės chemijos skyrius

³Vilniaus universiteto Gyvybės mokslų centro Biochemijos institutas

Fluorinti aromatiniai junginiai yra plačiai naudojami ir itin vertinami farmacijos bei žemės ūkio pramonėse. Tačiau iki šiol trūksta universalių, vėlyvose junginio sintezės stadijose pritaikomų fluorinimo metodų. Paladžiu (Pd) katalizuojamos kryžminio jungimo reakcijos (Heck, Suzuki, Stille ir kt.) yra plačiai naudojamos C-C, C-heteroatomo ryšiams sudaryti, bet jų panaudojimas C-F ryšio sudaryme išlieka problematiškas. Tai gali būti sprendžiama panaudojant stipriai erdviškai ekranuojančius ligandus, pvz. AlPhos (Sather et al., 2015). Jis buvo sėkmingai panaudotas katalitinėse fluorinimo reakcijose, tačiau tik su specifiniais aromatiniais substratais turinčiais elektronus ištraukiančias grupes.



m-Terfenilas **2** taip pat pasižymi ašiniu chiralumu. Egzistuoja keli skirtingi būdai atskirti šiuos ašinius enantiomerus, tačiau dauguma jų reikalauja specializuotos aparatūros ar reagentų, dažnai ir didelių laiko sąnaudų. Paprastesnis ir greitesnis būdas jų atskyrimui yra pasitelkiant stereoselektyvius fermentus. Žinoma, jog skirtingos esterazės pasižymi ašiniu stereoselektyvumu skirtingoms bi-aril molekulėms (Walls et al., 2022). Šio darbo tikslas yra susintetinti ir modifikuoti *m*-terfenilų ligandų karkasą **2** bei atskirti jo ašinius enantiomerus chemofermentiniu būdu.

Literatūra

Sather, A. C., Lee, H. G., De La Rosa, V. Y., Yang, Y., Müller, P., & Buchwald, S. L. (2015). A Fluorinated Ligand Enables Room-Temperature and Regioselective Pd-Catalyzed Fluorination of Aryl Triflates and Bromides. *Journal of the American Chemical Society*, 137(41), 13433–13438.

Watts, O. F. B., Berreur, J., Collins, B. S. L., & Clayden, J. (2022). Biocatalytic enantioselective synthesis of atropisomers. *Accounts of Chemical Research*, 55(23), 3362–3375.

Geležies oksido nanodalelių sintezė ir jų dekoravimas sidabro nanodalelėmis

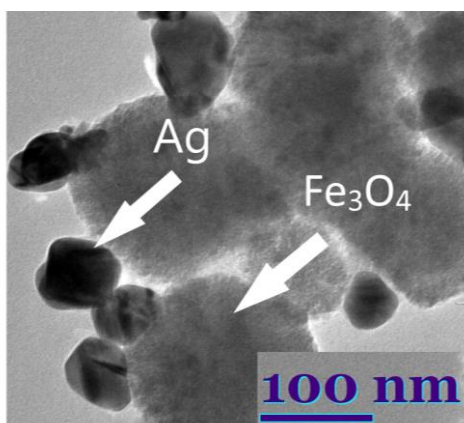
Greta Zambžickaitė^{1,2}, Lina Mikoliūnaitė^{1,2}

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Organinės chemijos skyrius

²Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas

Magnetinės dalelės yra patrauklios daugelyje mokslo sričių, ypač biomedicinos srityje, pradedant nuo MRT kontrastinių medžiagų, vaisto nešiklio sistemų, magnetinių separatorių, magnetinės hipertermijos medžiagų iki aplinkos, katalizės ir biologinių jutiklių sričių. Šios nanodalelės, pavyzdžiui magnetitas, padengtos plazmoniniu, aukso ar sidabro, sluoksniu, gali būti naudojamos paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje. Magnetito dalelės yra tinkamos dėl savo stabilumo, biologinio suderinamumo, magnetiškumo savybių, nesudėtingos sintezės ir mažų finansinių resursų. Tačiau sintezės metodų kūrimas vis dar yra nepaprastai svarbus ir ne itin aiškus norint gauti specialiai pritaikytą produktą.

Šiame darbe pristatome geležies oksido nanodaleles, susintetintas organinėje terpėje mikrobangų technika naudojant polietilenglikolio agentą, skirtingą sintezės trukmę ir temperatūrą. Geležies oksido nanodalelės buvo dekoruotos sidabro nanodalelėmis, susintetintomis keičiant sintezės trukmę ir temperatūrą. Susintetintos ir / arba dekoruotos nanodalelės buvo tiriamos rentgeno spektroskopija, transmisine elektronų mikroskopija, skenuojamąja elektronine mikroskopija, ultravioletine ir regimąja spektroskopija bei pritaikytos paviršiaus sustiprintoje Ramano spektroskopijoje.



1 pav. Sidabro dalelėmis dekoruotų geležies oksido dalelių transmisijos elektronų mikroskopijos nuotrauka. Geležies oksido magnetinės dalelės šviesiai pilka spalva, sidabro – tamsiai pilka.



eISSN: 3030-0312
© Vilniaus universitetas