



**CHEMIJA IR
GEOMOKSLAI**
Mokslinė konferencija

CHEMIJA IR GEOMOKSLAI

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

**Konferencija skirta pažymėti
Vilniaus universiteto geografinių
katedrų įkūrimo šimtmetį**

2026



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

Konferencija vyko 2026 metų kovo 20 dieną VU Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institute (Naugarduko g. 24)

Leidinį sudarė: G. Inkrataitė, J. Kapilovaitė, L. Klimavičius, E. Rimkus, Ž. Stankevičiūtė

eISSN: 3030-0312

© Vilniaus universitetas

Konferencijos programa

08:30–09:00 Dalyvių registracija

I SESIJA

SESIJOS PIRMININKAS PROF. EGIDIJUS RIMKUS

09:00–09:10 Konferencijos atidarymas

09:10–09:25 **Prof. Algimantas Česnulevičius** (Vilniaus universitetas) „Geografijos mokslo Vilniaus universitete istorija: nuo XVI a. iki XX a. vidurio“

09:25–09:40 **Doc. Filomena Kavoliutė** (Vilniaus universitetas) „Lietuviškojo geografijos mokslo ištakos“

09:40–10:05 **Prof. Jūratė Senvaitienė** (Lietuvos nacionalinio dailės muziejaus Prano Gudyno restauravimo centras) „Dievas slypi detalėse arba falsifikatorių klaidos“

10:05–10:30 **Doc. Jurga Lazauskienė** (Vilniaus universitetas) „Žemės gelmių panaudojimo galimybės Lietuvoje XXI amžiuje“

10:30–11:10 Kavos pertrauka ir stendinių pranešimų sesija

II SESIJA

SESIJOS PIRMININKĖ PROF. JUSTINA GAIDUKEVIČ

11:10–11:30 **Prof. Rasa Pauliukaitė** (Fizinių ir technologijos mokslų centras) „Elektroanalizės taikymas gyvenimo kokybės gerinimui“

11:30–11:50 **Prof. Giedrė Beconytė** (Vilniaus universitetas) „Visa yra erdvėje: GIS ir kartografija tarpdisciplininuose tyrimuose“

11:50–12:10 **Doc. Alma Bočkuvienė** (Vilniaus universitetas) „Antikorozinių dažų kūrimas: chemija, formulė ir danga“

12:10–12:30 **Prof. Albertas Bitinas** (Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Gamtos tyrimų centras) „Naujausi kvartero nuogulų kosmogeninio datavimo rezultatai – pagrindas Lietuvos kvartero stratigrafijos schemos revizijai“

12:30–13:15 Pietų pertrauka

13:15–14:00 Stendinių pranešimų sesija

III SESIJA

SESIJOS PIRMININKAS DOC. LAURYNAS JUKNA

10 minučių trukmės jaunųjų mokslininkų tyrimų pristatymai

Dokt. Laurynas Klimavičius (Vilniaus universitetas) „Kompleksiniai klimato įvykiai rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje“

Dr. Dovydas Karoblis (Vilniaus universitetas) „Lydytų druskų sintezė: pagrindai ir neorganinių medžiagų gavimas“

Dr. Rasa Janušaitė (Vilniaus universitetas) „Priekrantės sėklių morfologijos ir protrūkio srovių ryšys Lietuvos Baltijos jūros priekrantėje“

Dr. Povilas Virbickas (Vilniaus universitetas) „Polipirolo panaudojimas odos paviršiaus elektrinio laidumo didinimui“

Dr. Simona Rinkevičiūtė (Vilniaus universitetas) „Inovatyvi bioįvykių analizė: LIBS ir Bajeso metodų integracija Mulde įvykio tyrimuose“

Dokt. Goda Bilvinaitė (Vilniaus universitetas) „Nuo chemijos iki endodontologijos: hidrauliniai kalcio silikatiniai užpildai“

Dokt. Kostas Gružas (Vilniaus universitetas) „Teritorijų diferencijavimo eksperimentai, remiantis detaliais geografiniais duomenimis“

Dr. Benediktas Brasiūnas (Vilniaus universitetas) „Elektrocheminiai jutikliai ir jų tobulinimas panaudojant įvairias nanostruktūras“

15:40–16:00 Apdovanojimai ir konferencijos uždarymas

16:00–18:00 Konferencijos rezultatų aptarimas

TURINYS

Pratarmė	8
ŽODINIAI PRANEŠIMAI	
Česnulevičius A. <i>Geografijos mokslo Vilniaus universitete istorija: nuo XVI a. iki XX a. vidurio</i>	10
Kavoliutė F. <i>Lietuviškojo geografijos mokslo ištakos</i>	11
Senvaitienė J. <i>Dievas slypi detalėse arba falsifikatorių klaidos</i>	12
Lazauskienė J. <i>Žemės gelmių panaudojimo galimybės Lietuvoje XXI amžiuje</i>	13
Pauliukaitė R., Rivera P., Stonytė J., Morkytė P., Hassan I., Voitechovič E., Belostudseva D., Rasikė R., Rimkutė G., Gaidukevič J. <i>Elektroanalizės taikymas gyvenimo kokybės gerinimui</i>	14
Beconytė G. <i>Visa yra erdvėje: GIS ir kartografija tarpdiscipliniuose tyimuose</i>	15
Bočkuvienė A. <i>Antikoroziųjų dažų kūrimas: chemija, formulė ir danga</i>	16
Bitinas A., Šujan M., Damušytė A. <i>Naujausi kvartero nuogulų kosmogeninio datavimo rezultatai – pagrindas Lietuvos kvartero stratigrafijos schemos revizijai</i>	17
Klimavičius L. <i>Kompleksiniai klimato įvykiai rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje</i>	18
Karoblis D., Žarkov A., Murauskas T., Kizalaitė A., Jamal S., Stoll S., Kareiva A. <i>Lydytų druskų sintezė: pagrindai ir neorganinių medžiagų gavimas</i>	19
Janušaitė R., Jukna L. <i>Priekrantės sėklių morfologijos ir protrūkio srovių ryšys Lietuvos Baltijos jūros priekrantėje</i>	20
Virbickas P., Björklund S., Jankovskaja S., Nilsson E., Valiūnienė A., Engblom J., Ruzgas T. <i>Polipirolo panaudojimas odos paviršiaus elektrinio laidumo didinimui</i>	21
Rinkevičiūtė S., Dabulis Ž., Lukoševičiūtė G., Daumantas L., Balachninaite O. <i>Inovatyvi bioįvykių analizė: LIBS ir Bajeso metodų integracija Mulde įvykio tyimuose</i>	22
Bilvinaitė G., Klimkevičius V., Kirtiklienė T., Drukteinis S., Šakirzanovas S. <i>Nuo chemijos iki endodontologijos: hidrauliniai kalcio silikatiniai užpildai</i>	23
Gružas K. <i>Teritorijų diferencijavimo eksperimentai, remiantis detaliais geografiniais duomenimis</i>	24
Brasiūnas B., Popov A., Ramanavičienė A. <i>Elektrocheminiai biologiniai jutikliai ir jų tobulinimas panaudojant įvairias nanostruktūras</i>	25
STENDINIAI PRANEŠIMAI	
1. Amber H., Valeckytė G., Sukackienė Z., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>High-Performance NiCo/Cu Bifunctional Electrocatalysts for Alkaline Overall Water Splitting</i>	27
2. Bogužaitė R., Ratautaitė V., Žvirzdinė G., Ramanavičius A., <i>Development of Molecularly Imprinted Polypyrrole for Methylene Blue Recognition</i>	28
3. Bučinskaitė L., Kapilovaitė J. <i>Klimato kaita ir miesto medžiai: galimi medžių rūšių sudėties pokyčiai Vilniaus mieste</i>	29
4. Budžytė G., Kareiva A., Grigoravičiūtė I. <i>Sidabro vitlokito sintezė tirpinimo-nusodinimo metodu</i>	30

5. Burakovaitė D., Linkaitė G., Grigoravičiūtė I., Gaidukevič J., <i>Redukuoto grafeno oksido ir kalcio deficitinio hidroksiapatito kompozitai: sintezė, struktūrinė ir elektrocheminė analizė</i>	31
6. Černius D., Skruodienė M., Petrulėviečienė M., Kemere M., Skaudžius R. <i>Comparative Study of the Effects of Dopant Concentration on the Structural and Photoluminescent Properties of CAGDALO₄ and CAYALO₄ Phosphors</i>	32
7. Česnulevičiūtė A., Galinskaitė A., Gruškienė R., Kavleiskaja T., Sereikaitė J. <i>Nizino kapsuliavimas polisacharidinėse matricose: sintezė, charakterizavimas ir stabilumo tyrimai</i>	33
8. Dapkuvienė G., Griciūtė A., Jazdauskas M., Skinkytė K., Stragis D., Vroblevičienė J. <i>Saulės aktyvumo ciklų nustatymas Vilniaus vidutinės oro temperatūros klimatinėse eilėse</i>	34
9. Deltuvaitė D., Stonevičius E. <i>Medžių tipo indekso kūrimas remiantis palydoviniais duomenimis ir jo taikymas Vilniaus mieste</i>	35
10. Dobikalytė A., Žižiūnaitė G., Valiūnienė A. <i>Savitvarkio monosluoksnio sudėties įtaka fosfolipidinių membranų savybėms</i>	36
11. Dzvinka M., Misevičius M. <i>Legiruoto bario metaborato tyrimas</i>	37
12. Elkady A., Murnikova Ž. <i>QM/MD study of structure and NMR spectra of tetrapeptide in aqueous ionic liquid mixtures</i>	38
13. Elsheikh M., Karciauskaitė J., Grigoravičiūtė I., Stankeviciute Z., Kareiva A. <i>Functionalization of calcium-deficient hydroxyapatite with bioactive propolis</i>	39
14. Gaidamavičienė G., Labutis J., Vazgelevičiūtė U., Žalga A. <i>Influence of Ti⁴⁺ Substitution on Phase Composition and Structural Parameters of LAMOX Synthesized via an Aqueous Sol–Gel Method</i>	40
15. Gečaitė G. <i>Jūrinės karščio bangos pasauliniame kontekste – ką žinome apie Baltijos jūrą?</i>	41
16. Giniūnaitė A., Kaušaitė-Minkštimienė A. <i>Aukso nanodalelėmis pagrįstos strategijos SARS-CoV-2 anti-RBD imuninio jutiklio jautrio didinimui</i>	42
17. Griškonytė G., Žutautė I., Brukštus A. <i>4-((2-Benzimidazolil)tio)-6-izopropilrezorcinolių sintezė</i>	43
18. Hendik A., Gaidukevič J. <i>Poli(pirolo-antranilo rūgšties) kopolimerų, sintetintų esant skirtingiems amonio peroksosulfato ir monomerų santykiams, struktūrinė ir morfologinė analizė</i>	44
19. Yerniiarov A., Zukauskas S., Rucinskiene A., Ramanavicius A. <i>Molecularly imprinted conducting polymer for macromolecular sensing</i>	45
20. Janušauskaitė G., Misevičius M. <i>Temperatūros pasiskirstymas lydale β-BaB₂O₄ monokristalų auginimo metu</i>	46
21. Jonikaitė-Švėgždienė J., Novikovas D. <i>Modeling the Epoxidation Kinetics of Vegetable Oils via ANN-Integrated FT-IR Spectroscopy</i>	47
22. Jonkus G., Pakštas V., Kondrotas R. <i>Kompaktiškų cinko oksido dangų sintezė naudojant zolių-gelių metodą</i>	48
23. Jonušienė S., Garuckas D., Jonušis M., Sokol D. <i>Synthesis of new AOH1996 and indazolethylamines conjugates for development of targeted cancer therapy</i>	49
24. Juščenko V., Kavleiskaja T. <i>Modifikuotų chitozano junginių sintezė ir jų pritaikymas prailginti sezoninių uogų galiojimo laiką</i>	50

25. Kairytė F., Žutautė I. <i>(Imidazo[2,1-b][1,3]tiazin-4-il)fenolių sintezė ir modifikavimas</i>	51
26. Khalid D., Brazys E., Ratautaitė V., Ramanavičius A. <i>Bridging Molecular Targeting and Analytical Sensing with Polydopamine-Based Imprinted Sensors for Tetracycline Detection</i>	52
27. Khan S., Žukauskas Š. <i>Influence of Polyaniline on Conductivity and Drug Release from Alginate-Based Hydrogels</i>	53
28. Kosoko, S. A., Brazys E., Ratautaitė V., Ramanavičius A. <i>Molecularly Imprinted Conducting Polymer–Hydrogel Composites for Tetracycline Loading and Electro-Responsive Drug Delivery. Samuel A</i>	54
29. Krikštaponytė A., Blaževič K., Popov A., Ramanavičienė A., Kaušaitė-Minkštimienė A. <i>Amperometrinis gliukozės biologinis jutiklis 5-amin-1,10-fenantrolino, aukso nanodalelių ir gliukozės oksidazės pagrindu</i>	55
30. Kudžma D., Cichon-Pupienis A., Ainsaar L., Meidla T., Radzevičius S. <i>Vakarų Lietuvos (Rietavo-1 gręžinio) ordoviko uolienu chemostratigrafija</i>	56
31. Kunsakova A., Samalavičius V. <i>Machine Learning Approaches for Linking Groundwater Level Changes and Hydrochemical Patterns</i>	57
32. Kvietkauskas E., Kochanė T., Budrienė S. <i>PDMS-Enhanced Polyester Networks for UV-Cured Thin Films Formation</i>	58
33. Linkaitė G., Budžytė G., Žarkov A., Kareiva A., Grigoravičiūtė I. <i>From Amorphous Calcium Phosphate to Magnesium Whitlockite: Governing Phase Selection by Solution Chemistry</i>	59
34. Lipnevičiūtė A., Dėnas N., Valiūnienė A. <i>Lipidinių membranų modeliavimas su skirtingomis savitvarkio monosluoksni sudėtimis ant fluoro legiruoto alavo oksido paviršiaus ir jų savybių tyrimas</i>	60
35. Lugauskas E., Karoblis D., Kareiva A. <i>Synthesis of YFeO₃ through the use of intermediate metal oxides</i>	61
36. Mackevičius L. <i>Lietuvos upių potvynių parametrų kaitos tendencijos 1961–2020 metų laikotarpiu</i>	62
37. Meilūnaitė A., Rimkus E. <i>Tarppariniai oro temperatūros svyravimai Lietuvoje</i>	63
38. Melkūnaitė G., Gaidukevič J. <i>Grafeno oksido ir laidžiųjų polimerų kompozitai: sintezė, struktūra ir savybės</i>	64
39. Mickevičius G., Kaušaitė–Minkštimienė A. <i>Aukso nanostruktūrų ir berlyno mėlynojo taikymas kuriant fermentinį gliukozės biologinį jutiklį</i>	65
40. Milerytė U., Bukšnaitienė R., Žutautė I. <i>Naujų benzimidazo[2,1-b][1,3]tiazino darinių – potencialių amiloidų agregacijos moduliatorių – sintezė</i>	66
41. Minalgaitė M., Tutlienė S., Skaudžius R. <i>Application of the Czochralski method for LiF single crystal growth</i>	67
42. Paulauskaitė M., Žutautė I. <i>Imidazo[2,1-b][1,3]tiazino analogų sintezė elektrofilinės ciklizacijos būdu</i>	68
43. Paznėkas T., Šakirzanovas S., Merkininkaitė G. <i>Synthesis of Advanced Functional Materials for 3D Lithography</i>	69
44. Petraška V., Žutautė I. <i>Hsp90 slopiklių, struktūroje turinčių rezorcinolio ir tiadiazolo fragmentus, išsišakojanti sintezė</i>	70

45. Pylskaja P., Žutautė I. <i>4-(7h-imidazo[2,1-b][1,3]tiazin-5-il)anilino dariniai: sintezė ir modifikavimas</i>	71
46. Pipiraitė-Januškienė S., Rimkus E., Šaulienė I., Šukienė L. <i>Meteorologinių sąlygų poveikis alksnio ir beržo žiedadulkių koncentracijai</i>	72
47. Popovas U., Žutautė I. <i>N-Pakeistų rezorcinolinių karboksamidų, skirtų Hsp90 slopinimo tyrimams, sintezė</i>	73
48. Prichockienė E., Valančius Z. <i>Autoklavinio akytojo betono atliekų panaudojimas.</i>	74
49. Pupienis D., Brazdžiūnas P., Jol H., Buynевич I., Jarmalavičius D., Žilinskas G. <i>Kokius technogeninius pėdsakus paliekame ateities kartoms Kuršių nerijos prieškopų nuogulose</i>	75
50. Radzevičius N., Žurauskas J., Orentas E. <i>Fotokatalitinis arenų C-H funkcionalizavimas į pakeistus metilenus</i>	76
51. Raveendran A., Mohsenzadeh E., Paulikaite G., Sukoviene A., Gogotsi O., Ramanavicius S. <i>Tuning Adsorptive Selectivity of MXenes Through Surface Functionalization for Dye Remediation</i>	77
52. Ričkutė N., Inkraitaitė G., Skaudžius R. <i>Cr³⁺ and Ce³⁺ Co-doped YLuAG Garnet Synthesis and Insight of Luminescence Properties</i>	78
53. Rinkevičiūtė A., Giniūnaitė A., Kaušaitė-Minkštimienė A. <i>PPR imuninis jutiklis staphylococcus aureus toksino panton-valentine leukocidino nustatymui</i>	79
54. Rudnickaitė E. <i>VU Geologinių katedrų istorijos kūrėjų jubiliejinės sukaktys (Be praeities nebūtų ateities)</i>	80
55. Sergejevaitė G., Naruševičius D., Orentas E. <i>A Novel Approach to Oxepane Scaffolds via Enolate Addition to Alkene</i>	81
56. Shyshkin D., Amber H., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E. <i>Au/CoFeP and Au/CoP Electrocatalysts for High-Efficiency Overall Water Splitting at Industrial Temperatures</i>	82
57. Slaboševičiūtė G., Brazys E., Ratautaitė V. <i>Molekuliniu būdu įspausto polimero ant magnetinių dalelių kūrimas</i>	83
58. Spundzevičius G., German N., Kaušaitė-Minkštimienė A., Ramanavičienė A. <i>Aukso nanostruktūrų ir tetratiofulvaleno taikymas gliukozės biologiniame jutiklyje</i>	84
59. Stančiauskaitė M., Ramanavičius S., Ramanavičienė A., Korniienko V., Gogotsi O., Plikusienė I. <i>Kovalentiškai imobilizuoti MXenų sluoksniai kaip naujoviška biojutiklio platforma</i>	85
60. Stonkus T., Uogintė I., Byčenkienė S. <i>Spatial Distribution and Concentration Mapping of Airborne Microplastics in Lithuanian Educational Institutions</i>	86
61. Škarnulytė D., Vilčiauskas L., Pilipavičius J. <i>Cinko heksacianoferato(II,III) sintezė ir elektrocheminių savybių tyrimas vandeninėse cinko jonų baterijose</i>	87
62. Tamulienė J., Šarlauskas J. <i>10H-Fenotiazino 5,5-dioksido pagrindu sukurtų junginių stabilumo ir energetinių savybių teorinis tyrimas</i>	88
63. Tariq M., Naeem H., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Norkus E., Levinas R. <i>Electrocatalytic activity of Ni(OH)₂-supported Pd electrocatalysts towards the oxidation of methanol in alkaline solution</i>	89
64. Usavičiūtė J., Kepenienė V., Stagniūnaitė R., Tamašauskaitė-Tamačiūnaitė L. <i>Ternary Mn-, Ru-, and Mo-Modified PtCo/graphene nanocatalysts for the methanol oxidation reaction</i>	90

65. Vaičiūnaitė K., Kilpys J. Debesuotumo kaitos tendencijų Rytų Baltijos regione nustatymas 1979–2024 m. remiantis palydoviniais duomenimis	91
66. Valančius Z., Prichockienė E. Žaliavų sudėties ir apdorojimo būdo įtaka gipso kristalų struktūrai	92
67. Valeckytė G., Sukackienė Z., Vaičiūnienė J., Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė L., Stupakova J. Efektyvūs nikelio pagrindo katalizatoriai vandenilio generavimui	93
68. Vasiliauskas T., Žutautė I. N-Pakeistų 2-((4-(benzimidazo[2,1-b][1,3]tiazin-4-il)fenil)(Boc)amino)acetamidų, skirtų amiloidų agregacijos moduliatorių paieškai, sintezė	94
69. Virkėtis R., Harnik A., Malinauskas M., Merkininkaitė G., Šakirzanovas S. Liuminescencinių YAG: Yb³⁺, Er³⁺ 3D mikrostruktūrų gamyba taikant lazerinę litografiją ir kalcinaciją	95
70. Vyšniauskienė V., Stankūnavičius G. Terminų anomalijų Pietryčių Baltijos regione sąsajos su atmosferos cirkuliacija	96
71. Vištorskaja D., Katelnikovas A., Kareiva A. Nauji aukštos entropijos retųjų žemių aliuminio granatai	97
72. Žižiūnaitė G., Valiūnienė A. Poras formuojančių toksinų pažaidos masto fosfolipidiniams dvisluoksniams įvertinimas naudojant pradinį efektyvų defektų tankį	98
73. Žurauskas J., Vaickūnas P., Snarskis G., Chatinovska B., Radzevičius N., Kreiza G., Raišys S., Šimėnas M., Kalendra V., Zakarauskas K., Kazlauskas K., Orentas E. Photoredox manifold for dehydrogenative coupling using protons as oxidants	99

Pratarmė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakultetas jau trečią kartą rengia nacionalinę mokslinę konferenciją „Chemija ir geomokslai“. Per pastaruosius dvejus metus šis renginys tapo reikšminga erdve mokslinei diskusijai, idėjų sklaidai ir tarpdisciplininiam bendradarbiavimui tarp chemijos ir geomokslų tyrėjų. Šiais metais konferencijoje dalyvauja itin daug studentų – jaunuosius tyrėjus subūrė galimybė pristatyti savo atliktus mokslinius darbus ir įgyti pranešimo pristatymo patirties. Konferencijos augimas rodo, kad ją pripažįsta ir vertina vis platesnė akademinė bendruomenė.

Šių metų konferencija „Chemija ir geomokslai 2026“ skirta pažymėti svarbią sukaktį – Vilniaus universiteto geografinių katedrų įkūrimo šimtmetį. Šis jubiliejus primena ilgametę universiteto mokslo raidą, tvirtas geografijos ir geochemijos tyrimų tradicijas bei reikšmingą mūsų mokslininkų indėlį į šalies mokslo plėtrą. Ši proga suteikia galimybę apžvelgti pasiektus rezultatus ir pristatyti naujausias tyrimų kryptis.

Konferencijoje dalyvauja įvairių Lietuvos institucijų atstovai – mūsų fakulteto mokslininkai, kolegos iš Kauno technologijos universiteto, Fizinių ir technologijos mokslų centro, Valstybinio mokslinių tyrimų instituto Gamtos tyrimų centro, Lietuvos hidrometeorologijos tarnybos ir Lietuvos nacionalinio dailės muziejaus Prano Gudyno restauravimo centro. Toks platus dalyvių ratas patvirtina renginio aktualumą ir jo svarbą telkiant skirtingų sričių tyrėjus.

Linkiu visiems konferencijos dalyviams turiningų diskusijų, naujų mokslinių idėjų ir prasmingo bendradarbiavimo. Tikiu, kad „Chemija ir geomokslai 2026“ taps dar vienu žingsniu puoselėjant ir stiprinant mokslo tradicijas, kurias kursime ir ateityje.

Prof. Justina Gaidukevič
VU Chemijos ir geomokslų fakulteto dekanė



ŽODINIAI PRANEŠIMAI

Geografijos mokslo Vilniaus universitete istorija: nuo XVI a. iki XX a. vidurio

Algimantas Česnulevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Vilniaus universitetas pergyveno sudėtingą istoriją, kurios metu kito jo struktūra, studijų pobūdis, dėstoma kalba, politinė priklausomybė. Universiteto statuso kelias iki XXI amžiaus pradžios buvo sudėtingas: nuo Vilniaus Jėzaus draugijos akademijos, LDK Vyriausiosios mokyklos, Vilniaus imperatoriškojo universiteto, Vilniaus Stepono Batoro universiteto, Vilniaus valstybinio universiteto iki Vilniaus universiteto. Geografinės minties raida Vilniaus universitete buvo sudėtinga, su pakilimu ir nuosmikiu. Geografijos sampratos, idėjų, naudojamų metodų pulsacija ir lėmė skirtingus geografijos raidos etapus universitete.

Ankstyvasis aprašomasis - grafinis laikotarpis (XVI-XVIII a. pirmą pusę) – etapas, kai sukurti pirmieji tuometinės Lietuvos teritorijos žemėlapiai. Universitete pradėtas dėstyti natūrfilosofijos kursas, paremtas Aristotelio idėjomis, sukurtas originalus Mikalojaus Kristupo Radvilos LDK žemėlapis, apimantis apie 1 mln. km² (1613).

Ankstyvojo teorinio laikotarpio (XVII a. antrą pusę – XVIII a.) metu Vilniaus universitete sporadiškai dėstyti kai kurie teoriniai geografijos kursai bei išleisti pirmieji vadovėliai. 1781 m. įkurta Gamtos mokslų katedra, kur dėstytos gamtos mokslų disciplinoms.

Topografijos ir geografijos plėtros (XIX a. pirmą pusę) laikotarpyje universitete įsteigta Geodezijos katedra (1820). Jos darbuotojai parengė ir išleido modernius to laikmečio topografijos ir geodezijos vadovėlius, vykdė geodezinius matavimus. Joachimo Lelevelio dėka Vilniaus universitete išplėtoti istorinės geografijos tyrimai, publikuoti istoriniai Europos Sarmatijos žemėlapių rinkiniai. Tuo laikotarpiu universitete studijavo ir dirbo žymūs mokslui nusipelnę žmonės: Ignotas Domeika, Juozapas Chodzka, Jonas Sniadeckis, Stanislovas Bonifacas Jundzilas, Georgas Forsteris.

Klasikinės geografijos laikotarpis prasidėjo 1919 m., atkūrus Vilniaus Stepono Batoro universitetą. Jame įsteigtos Etnologijos ir etnografijos (1924) ir Geografijos (1926) katedros, Rytų Europos mokslinių tyrimų institutas (1930). Etnologijos ir etnografijos katedros darbuotojai ir studentai organizavo etnografines ekspedicijas, kurių metu surinko unikalias kolekcijas, vykdė fotodokumentaciją. Rytų Europos mokslinių tyrimų instituto darbuotojai vykdė ekonominius, kultūrinius, socialinius ir politinius tyrimus, leido mokslinius žurnalus: „Vilniaus Rytų Europos mokslinių tyrimų instituto metraštis“ ir „Balticoslavica“.

Specializacinis (XX a. antroji pusė – XXI a. pradžia) geografijos raidos etapas prasidėjo dar nepasibaigus II Pasauliniam karui, kuomet darbą atnaujino Fizinės geografijos, Kartografijos, Meteorologijos ir klimatologijos katedros. Pradedant šeštuoju dešimtmečiu, išplėtoti geografiniai Lietuvos teritorijos tyrimai, kurie davė pagrindą formuoti atskiroms geografijos šakoms ir lėmė viso geografijos mokslo plėtrą Lietuvoje.

Padėka

Tyrimas atliktas gavus Ignoto Domeikos draugijos ir LMT projekto GEOGRIST paramą.

Lietuviškojo geografijos mokslo ištakos

Filomena Kavoliutė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Vėlyvas lietuviškosios geografijos gimimas glaudžiai susijęs su lietuvių tautos ir valstybės istorija. 1925/26 m. geografija pradėta dėstyti dviejuose Lietuvos universiteto (įkurto 1922 m. Kaune, Vytauto Didžiojo nuo 1930 m.) fakultetuose: Teologijos ir Filosofijos bei Matematikos – Gamtos, kuriame atidaryta Geografijos ir antropologijos katedra bei kabinetas. Pavadinimas nurodo, kad pasirinkta jau šimtmetį plėtojusi bendroji geografija su fizinės (gamtinės) ir visuomenės geografijos kryptimis. Formavimosi pradžioje ryškūs trys etapai, bet ne mažiau svarbios personalijos. Kitus mokslus baigę, laisvon tėvynėn sugrįžę tapo geografijos šakinių mokslų pradininkais. Sociologiją ir politiką Čikagoje studijavęs, doktoratą Freiburge apgynęs K. Pakštas dėsto ir plėtoja politinę geografiją Filosofijos skyriuje. Sankt Peterburgo karinę jūrų akademiją baigęs T. Daukantas išrenkamas vadovauti Geografijos ir antropologijos katedrai. Tai jų siūlymu pasirinkta bendrosios geografijos kryptis. Odesoje fiziką – matematiką baigęs K. Sleževičius dėsto meteorologiją ir vadovauja Geofizikos ir meteorologijos katedrai. Inžineriją Maskvoje studijavęs St. Kolupaila vykdo hidrologinius tyrimus, vadovauja Hidrologijos ir hidraulikos katedrai Statybos fakultete. Prie 1932 m. suvienytos katedros prisijungia VDU absolventai: biologas K. Bieliukas, apgynęs doktoratą iš limnologijos, habilitacija Prahoje ir geografas, doktoratą iš politinės geografijos Berlyne apgynęs V. Viliamas. Neilgas, bet labai sudėtingas 1940-47 m. tarpsnis sutampa su kitu sunkiu valstybės laikotarpiu: atgautoje istorinėje sostinėje lietuviško Vilniaus universiteto atkūrimas, sovietinė okupacija ir II Pasaulinis karas. Iš VDU į Vilniaus universitetą perkelta Geografijos katedra susidūrė su vyresniojo mokslinio personalo trūkumu. Į aneksuotą Lietuvą iš stažuotės negrįžo K. Pakštas, karo pabaigoje pasitraukia St. Kolupaila, V. Viliamas. Greta K. Bieliuko, K. Sleževičiaus, trūkstamiems dalykams dėstyti kviečiami patyrę mokytojai, geografijos vadovėlių autoriai P. Šinkūnas, St. Tarvydas bei fizikas-matematikas V. Chomskis. Dalindamiesi didžiuliu krūviu, kartu su Meteorologijos ir klimatologijos katedra, jau savarankiškame Gamtos mokslų fakultete 1947 m. išleidžia pirmą pokarinę laidą. Su išskirtine paraiška – lietuvių kalba parengtais dviejų geografijos klasikų vadovėliais įžengia talentingasis A. Basalykas, vėliau sukūręs lietuviškąją kraštovaizdžio geografijos mokyklą. K. Kaušyla įsijungia į meteorologijos, E. Červinskas - hidrologijos kryptį. V. Gudelis MA Geologijos ir geografijos institute atveria jūrotyrą, juos sekdamas D. Galvydytė – dirvožemio geografiją. Visuomenės geografijos kryptis sovietinio pokario sąlygomis vakarietiškomis pažiūroms tapo rizikinga. Šešto dešimtmečio viduryje ši mokslininkų karta pradeda Lietuvos geografijos plėtotės etapą.

Apibendrinant galima teigti, kad Lietuviškoji geografijos mokykla gimė ir išaugo iš sutelktų intelektualinių lietuviškų pajėgų, pradėjusių veiklą Lietuvos universitete Kaune ir ją tęsusių bei plėtojusių lietuviškame Vilniaus universitete. Nuo pat geografijos mokslo Lietuvoje pradžios antropogeografinė kryptis išliko ir išsiplėtė. Geografija įsitvirtino kaip visuomenės ir gamtos mokslų sandūroje išryškėjančių reiškinių ir procesų tyrėja.

Padėka

Tyrimas atliktas gavus LMT projekto GEOGRIST paramą.

Dievas slypi detalėse arba falsifikatorių klaidos

Jūratė Senvaitienė

Prano Gudyno restauravimo centras

Šiandienos meno pasaulyje ir rinkoje šalia originalių kūrinių yra daugybė kopijų, reprodukcijų, pastišų ir falsifikatų. Falsifikatai sąmoningai apibūdinami kaip konkrečių dailininkų kūriniai, siūlomi interesantams kaip autentiški ir originalūs vieno ar kito dailininko arba jų dirbtuvių paveikslai, nors taip iš tikrųjų nėra.

Kiekvieno kūrinio meninės ir technologinės charakteristikos – medžiagos, sandara, atlikimo technika – yra nulemtos laikmečio. Taikant įvairius analizės metodus atskleidžiamos falsifikatorių klaidos – pagrindiniai neoriginalių „kūrinių“ požymiai.

Žemės gelmių panaudojimo galimybės Lietuvoje XXI amžiuje

Jurga Lazauskienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Pastaraisiais metais Europos Sąjungoje (ES) formuojama politika, orientuota į tvarų gamtos išteklių naudojimą, energetinę nepriklausomybę ir klimato kaitos mažinimą. Nauji ES teisės aktai numato priemones, skirtas užtikrinti strateginių žaliavų tiekimą ir plėtoti švarios energijos technologijas. Reglamentu (ES) 2024/1252 (Kritinių žaliavų aktas) – siekiama užtikrinti patikimą, diversifikuotą ir tvarią kritinių žaliavų tiekimo grandinę Europoje, mažinti priklausomybę nuo importo ir skatinti žaliavų gavybą, perdirbimą bei pakartotinį naudojimą. Reglamentas (ES) 2024/1735 (Nulinio balanso pramonės aktas) numato stiprinti Europos Sąjungos pramonės pajėgumus kurti ir gaminti nulinio balanso technologijas bei sudaryti palankias sąlygas investicijoms į strategines technologijas, būtinas klimatui neutraliai ekonomikai iki 2050 m. Reglamentas (ES) 2024/1787, skirtas metano emisijų mažinimui, nustato reikalavimus energetikos sektoriuje, ypač naftos, dujų ir anglių pramonėje, susijusius su emisijų stebėseną ir nuotėkių mažinimu.

Žemės gelmių panaudojimo klausimai svarbūs ir Europos žaliajo kurso kontekste. Europos Parlamento rezoliucijos projekte „Dėl visapusiško Europos požiūrio į energijos kaupimą“ (2019/2189(INI)) pabrėžiama geologinio energijos saugojimo potencialo svarba ir siūloma valstybėms narėms įvertinti tokias galimybes. Europos Komisijos dokumente „Tvarios Europos kūrimas iki 2030 m.“ akcentuojamas poreikis pereiti nuo iškastinio kuro prie atsinaujinančių energijos šaltinių ir siekti ekonomikos dekarbonizacijos.

Lietuvoje šie tikslai taip pat integruojami į strateginius dokumentus. Nacionaliniame energetikos ir klimato srities veiksmų plane 2021–2030 m. numatyta iki 2030 m. pasiekti 45 proc. atsinaujinančių energijos išteklių dalį galutiniame energijos suvartojime. Lietuvos Respublikos teritorijos bendrojo plano sprendiniuose iki 2050 m. tarp kitų tikslų numatyta įvertinti žemės gelmių sandaros ir savybių panaudojimo galimybes energijos kaupimui ir saugojimui, įskaitant šilumos, šalčio, vandenilio, gamtinių dujų, anglies dioksido bei suspausto oro saugojimą. Įgyvendinat LRV 2025-09-03 m. nutarimo Nr. 623 „Dėl Reglamento (ES) 2024/1252 įgyvendinimo“ nuostatas patvirtintas „Lietuvos ypatingos svarbos žaliavų ir ypatingos svarbos mineralų parengtinės žvalgybos 2026-2030 metais veiksmų planas.“

Nepaisant naujų žemės gelmių panaudojimo krypčių, Lietuvoje ir toliau išlieka aktualus ir įprastų naudingųjų iškasenų (smėlio, žvyro, molio, klinties, dolomito, durpių, naftos ir kt.) ir žemės gelmių išteklių (pvz. požeminio vandens) naudojimas. Naftos gavyba Lietuvoje vykdoma nuo 1990 m., šiuo metu nafta išgaunama iš 11 sausumos telkinių. Lietuvos geologijos tarnybos prie Aplinkos ministerijos duomenimis, didžiausias naftos gavybos mastas buvo pasiektas 2002 metais, kai buvo išgauta >550 tūkst. m³ naftos. 2024 m. Lietuvoje išgauta 27,85 tūkst. m³ naftos, (apie 7 proc. mažiau nei 2023 m).

Apibendrinant galima teigti, kad žemės gelmių panaudojimas Lietuvoje tampa vis labiau susijęs su energetikos transformacija ir klimato kaitos mažinimu. Tradicinę žemės gelmių išteklių gavybą papildo naujos kryptys, tokios kaip geoterminės energijos naudojimas, anglies dioksido bei vandenilio geologinis saugojimas.

Elektroanalizės taikymas gyvenimo kokybės gerinimui

Rasa Pauliukaitė¹, Pamela Rivera¹, Justina Stonytė¹, Paulina Morkytė¹, Islam Hassan¹, Edita Voitechovič¹, Dijana Belostudseva¹, Rūta Rasikė², Gintarė Rimkutė², Justina Gaidukevič²

¹*VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centro Nanoinžinerijos skyrius*

²*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

Elektroanalizė yra palyginti greitas metodas daugelio analizių nustatymui, todėl ji yra perspektyvi ir gali būti minimizuojama. Dėl šios priežasties elektroanalizė arba elektrocheminiai jutikliai gali būti integruojami į robotus, didesnius prietaisus ar naudojami namuose gyvenimo kokybės kontrolei tiriant maiste, aplinkoje ar organizme esančias analites. Vienas pirmųjų egzistuojančių jutiklių yra gliukometras diabetikams. Dabar tokių jutiklių jau yra nemažai, tie patys gliukometrai yra nuolatinio veikimo ir neinvaziniai, kuriami ir įvairūs kiti.

Elektrocheminiai jutikliai kuriami mūsų grupėje jau daugiau nei 15 metų ir taikomi tiek maisto kokybės tyrimams, neurotransmiterių nustatymui, sunkiųjų metalų aptikimui tiek augaluose, tiek vandenyje, tiek prakaite. Kitaip tariant, tai yra elektrocheminiai jutikliai gyvenimo kokybės užtikrinimui. Be to, tokie jutikliai pradedami kurti ir archeologinių bandinių analizei.

Visais atvejais svarbiausia yra jutiklio sudėtis, nuo kurios ir priklauso jutiklio jautris ir patikimumas. Pranešime bus pateikti pagrindiniai aspektai ir iššūkiai su kuriais susiduriame kuriant elektrocheminius jutiklius.

Visa yra erdvėje: GIS ir kartografija tarpdisciplininuose tyrimuose

Giedrė Beconytė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Geografinės informacinės sistemos (GIS) ir kartografija yra itin tarpdisciplininės sritys. Jos jungia erdvinius duomenis, analitinius metodus ir vizualinę komunikaciją. Erdvinių duomenų ir žemėlapių mokslas seniai peržengė geografijos ribas. Jo metodai tampa vis svarbesne mokslo, viešojo valdymo bei verslo sprendimų priėmimo dalimi. GIS leidžia erdviniu pagrindu susieti skirtingos kilmės duomenis, o kartografija suteikia priemones šią informaciją struktūruotai ir suprantamai perteikti skirtingoms auditorijoms.

Žemėlapiai naudojami įvairiose mokslo srityse – nuo gamtos mokslų iki socialinių ir humanitarinių tyrimų. Jie padeda analizuoti reiškinių pasiskirstymą, ryšius ir pokyčius laike bei erdvėje. Valstybės sektoriuje GIS ir kartografiniai sprendimai taikomi teritorijų planavimui, infrastruktūros valdymui, rizikų vertinimui ir krizių valdymui. Versle jie naudojami rinkų analizei, logistikos optimizavimui, klientų elgsenos tyrimams ir strateginiam planavimui, suteikiant konkurencinį pranašumą duomenimis grįstų sprendimų kontekste. Bet pagrindinė jų vertė yra priemonės sujungti skirtingų tyrimų sričių žinias ir atlikti sudėtingų reiškinių analizę gaunant naują kokybę.

Svarbią vietą tarpdisciplininuose GIS tyrimuose užima informatikos metodai ir sąsajos su technologijos mokslais. Erdvinių duomenų gavyba, apdorojimas ir dalijimasis turi neatsilikti nuo technologijų pažangos. Nuotolinių tyrimų technologijos, jutiklių tinklai, debesų kompiuterija ir atvirosios duomenų platformos dar labiau išplečia GIS taikymo galimybes ir skatina inovacijas.

Gamtos moksluose GIS tarpdiscipliniškumas pasireiškia per daugiakriterinę analizę, kuri naudojama klimatologijoje, ekologijoje, geologijoje, hidrologijoje ir aplinkotyroje, siekiant suprasti gamtinius procesus, jų sąveikas ir poveikį aplinkai. Biomedicinoje erdvinė analizė padeda tirti ligų paplitimą, sveikatos paslaugų prieinamumą ir aplinkos veiksnių įtaką visuomenės sveikatai. Socialiniuose moksluose GIS taikomas demografiniams, ekonominiams ir urbanistiniams procesams analizuoti, o humanitariniuose moksluose – istorinių žemėlapių analizei, kultūrinio paveldo tyrimams ir erdvinių naratyvų kūrimui.

Apibendrinant, geografinės informacijos mokslas šiandien kuria galingas įžvalgų darymo priemones, kurių dėka atskleidžiami sudėtingi erdviniai ryšiai. Žemėlapis kaip niekad yra universali ir labai veiksminga komunikacijos priemonė, kuri padeda perteikti žinias ir daryti kokybiškus sprendimus šiuolaikiniame, duomenimis grįstame pasaulyje.

Antikoroziinių dažų kūrimas: chemija, formulė ir danga

Alma Bočkuvienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Korozija yra vienas reikšmingiausių metalinių konstrukcijų ilgaamžiškumą ribojančių veiksnių, sukeliantis didelius ekonominius nuostolius ir saugumo riziką įvairiose pramonės srityse – nuo statybos ir transporto iki energetikos bei chemijos pramonės. Siekiant sumažinti šio proceso poveikį, kuriamos specialios apsauginės sistemos – antikoroziniai dažai, kurių sudėtis ir veikimas grindžiami chemijos bei medžiagų mokslo principais.

Antikoroziinių dažų kūrimas apima sistemingą formulės projektavimą, komponentų tarpusavio suderinamumo analizę ir eksploatacinių savybių optimizavimą. Formulės projektavimo etape parenkamas rišiklis, užtikrinantis sukibimą su metalo paviršiumi ir vientisos plėvelės susidarymą, antikoroziniai pigmentai, suteikiantys aktyvią apsaugą, bei užpildai ir funkciniai priedai, reguliuojantys mechanines, reologines ir chemines savybes. Siekiant užtikrinti reikiamą dangos efektyvumą, atliekami laboratoriniai bandymai, kurių metu nustatomas atsparumas drėgmei, temperatūrų svyravimams, agresyvioms cheminėms terpėms bei mechaniniam poveikiui.

Kuriamos dangos gali veikti skirtingais apsaugos mechanizmais – sudarydamos fizinį barjerą aplinkos veiksniams, pasyvindamos metalo paviršių arba užtikrindamos katodinę apsaugą. Todėl kūrimo procese svarbus ne tik cheminės sudėties parinkimas, bet ir sistemingas formulės optimizavimas, atsižvelgiant į numatomas eksploatacines sąlygas. Atsižvelgiama į tai, ar konstrukcija bus naudojama jūrinėje, pramoninėje ar vidaus aplinkoje, nes kiekviena jų kelia skirtingus reikalavimus dangos atsparumui ir ilgaamžiškumui.

Pastaraisiais metais antikoroziinių dažų kūrimas vis labiau orientuojamas į inovatyvius sprendimus. Taikant nanotechnologijas siekiama sumažinti dangų poringumą ir padidinti jų mechaninį stiprumą, o savaimė atsistatančios sistemos su mikrokapsulėmis leidžia dangai reaguoti į mikroįtrūkimus ir prailginti apsaugos trukmę. Taip pat diegiami žaliosios chemijos principai – kuriamos vandens pagrindo, mažiau toksiškos formulės, atsisakant kenksmingų junginių. Taigi antikoroziinių dažų kūrimas apima ne tik cheminės sudėties analizę, bet ir nuoseklų projektavimo, bandymų bei optimizavimo procesą, leidžiantį sukurti efektyvias, ilgaamžes ir aplinkai draugiškas apsaugos sistemas.

Naujausi kvartero nuogulų kosmogeninio datavimo rezultatai – pagrindas Lietuvos kvartero stratigrafijos schemos revizijai

Albertas Bitinas¹, Michal Šujan^{1,2}, Aldona Damušytė³

¹Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Gamtos tyrimų centras, Vilnius, Lietuva

²Comenius universitetas, Bratislava, Slovakija

³Lietuvos geologijos tarnyba, Vilnius, Lietuva

Lietuvos kvartero nuogulų tyrimuose susiduriame su problema – šiuo metu neturime unifikuotos kvartero stratigrafijos schemos. Viena iš pagrindinių šalies geologinių tyrimų institucijų – Lietuvos geologijos tarnyba – vadovaujasi 2009 metais pasitvirtinta žinybine kvartero stratigrafijos schema. Tuo metu mokslinių institucijų tyrėjai kuria ir propaguoja „asmenines“ kvartero stratigrafijos schemas, kurios nelabai dera su kitomis – skirtingose schemose būna skirtingas stratigrafinių vienetų kiekis, skiriasi šių vienetų rangas bei jiems priskiriamas absoliutus amžius, schemos nevienareikšmiškai koreliuojasi su gretimų valstybių bei tarptautinėmis stratigrafijos schemomis, ir pan.

Iki šiolei sudarant kvartero stratigrafijos schemas dažniausiai buvo vadovujamasi klimatostratigrafinių principu, kuomet nuogulos suskirstomos į šaltų (ledynmečių, stadialų, kriomerų) bei šiltų (tarpledynmečių, tarpstadialų, termomerų) laikotarpių stratigrafinius padalinius. Pagrindiniu tokio suskirstymo kriterijumi yra paleobotaninių tyrimų rezultatai, ir tik jų nesant – litostratigrafiniai kriterijai. Tačiau pastaruoju metu stratigrafijos schemų sudarymo pagrindu vis dažniau tampa geochronologinių tyrimų rezultatai.

2024-2026 metais VMTI Gamtos tyrimų centras, vykdant podoktorantūros projektą „CosmoLith“, finansuojamą pagal Europos Sąjungos ekonomikos atgaivinimo ir atsparumo didinimo priemonę NextGenerationEU „Naujosios kartos Lietuva“ (Nr. 10-036-T-0008), Lietuvos kvartero nuogulų datavimui pasitelkė metodus, pagrįstus kosmogeninių nuklidų $^{26}\text{Al}/^{10}\text{Be}$ ir $^{10}\text{Be}/^9\text{Be}$ tyrimų rezultatais. Tirtos seniausios Lietuvoje kvartero periodo nuogulos, paplitusios Pietryčių Lietuvoje (tirtas gręžinių kernas), o taip pat Rytų Lietuvoje – atsidengiančios Daumantų, Šlavės ir Vetygalos atodangose bei Anykščių kvarcinio smėlio karjere. Nuogulų datavimo bei paraleliai atliktų litologinių mikrostruktūrinių tyrimų rezultatai leidžia teigti, kad Pietryčių Lietuvoje aptiktos ir seniausio apledėjimo (Kalvių) reliktu laikytos nuogulos (morena) nėra ledyninės kilmės darinys, o tik purvo srauto (*mudflow*) suformuotas diamiktonas. Tad kyla abejonių ir dėl stratigrafijos schemoje gretimai išskirtų Daumantų priešledynmečio bei Vindžiūnų tarpledynmečio pagrįstumo. Nustatytas pastarųjų nuogulų absoliutus amžius yra apie 1.00 ± 0.06 mln. metų. Anykščių apylinkių atodangose ir Anykščių kvarcinio smėlio karjere datuotų ikiledynmetinio laikotarpio nuogulų vidurkinis amžius yra apie $0,96 \pm 0,11$ mln. metų, nors iki šiol Anykščių kvarcinio smėlio sluoksniai buvo priskiriami neogeno periodui.

Gauti kosmogeninio datavimo rezultatai tiriant kvartero nuogulas Rytų bei Pietryčių Lietuvoje, o taipogi prieš keletą metų optiškai stimuliuotos liuminescencijos (OSL) metodu patikslintas kai kurių Vakarų Lietuvos viršutinio pleistoceno nuogulų amžius, duoda gana rimtą pagrindą teigti, kad pribrendo laikas esminiam Lietuvos kvartero stratigrafijos schemos atnaujinimui, galbūt – ir vienos unifikuotos schemos sudarymui.

Kompleksiniai klimato įvykiai rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje

Laurynas Klimavičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Sparčiai vykstančios klimato kaitos kontekste daugėja įvairių ekstremalių orų reiškinių, o pastaraisiais metais ypač daug dėmesio skiriama kompleksiniams klimato įvykiams (KKĮ). Tokie įvykiai išskiriami, kai vienas reiškinys sustiprina kito neigiamą socioekonominį poveikį. Pagrindinis šio darbo tikslas – įvertinti skirtingų KKĮ pasikartojimo, trukmės ir intensyvumo pokyčius rytinėje Baltijos jūros regiono dalyje 1950–2022 metais bei sudaryti šių charakteristikų prognozes iki XXI a. pabaigos.

KKĮ įvertinti teritorijoje nuo 53,5° iki 59,5° š. pl. ir nuo 20° iki 28,5° r. ilg. Siekiant identifikuoti skirtingus KKĮ 1950–2022 metų laikotarpiu panaudoti kasdieniai ERA5 reanalizės duomenys, o pokyčiai ateityje nustatyti naudojant penkių skirtingų CMIP6 globalios cirkuliacijos modelių dviejų SSP scenarijų (SSP2–4.5 ir SSP5–8.5) duomenis, gautus iš NASA NEX-GDDP-CMIP6 duomenų bazės. Prognozės sudarytos 2081–2100 metų laikotarpiui. Bazinis laikotarpis – 1995–2014 metai. Duomenų gardelės dydis 0,25° × 0,25°. Tyrimo metu įverti trys KKĮ: kompleksiniai sausros ir karščio bangos įvykiai (KSKĮ), vėlyvos pavasario šalnos (VPŠ) ir kompleksiniai kritulių kiekio bei vėjo greičio ekstremumai (KKVE).

KSKĮ nustatyti kai ir sausra, ir karščio banga fiksuota tuo pat metu. Sausros identifikuotos pasitelkus standartizuotą kritulių indeksą SPI, o karščio bangos – apskaičiavus maksimalios paros oro temperatūros 90-to percentilio vertes. Nustatyta, kad per 1950–2022 metų laikotarpį dienų, kai buvo fiksuotas KSKĮ, skaičius išaugo 73% gardelių. Vis dėlto, pokyčiai nedideli ir statistiškai reikšmingi (kai $p < 0,05$) tik 1,9 % tyrimo teritorijos. Prognozuojama, kad 2081–2100 metais per metus bus fiksuojama 1–5 dienomis (SSP2–4.5) ir 6–18 dienų (SSP5–8.5) daugiau KSKĮ nei baziniu laikotarpiu.

VPŠ identifikuota jei atitinkamoje gardelėje paskutinė pavasario šalna (kai minimali paros oro temperatūra nukrinta žemiau 0 °C) fiksuota vėliau nei vegetacijos sezono pradžia. 1950–2022 metų laikotarpiu VPŠ skaičius išaugo 85,9 % teritorijos, tačiau statistiškai reikšmingai (kai $p < 0,05$) – tik 30 % gardelių. VPŠ prognozės ateityje nepasižymi viena tendencija – dalis darbe naudojamų modelių numato šių įvykių skaičiaus didėjimą, kiti mažėjimą.

KKVE atitinkamoje gardelėje nustatyti, jei tą pačią dieną ir kritulių kiekis, ir maksimalus paros vėjo greitis viršijo 98-to percentilio reikšmes. Per 73 metų laikotarpį KKVE skaičius išaugo 70,2 % gardelių. Pokyčiai statistiškai reikšmingi (kai $p < 0,05$) 21,7 % gardelių. XXI a. pabaigoje KKVE skaičius lyginant su 1995–2014 metų laikotarpiu turėtų išaugti daugiau nei pusėje tyrimo teritorijos. Prognozuojama, kad 2081–2100 metais susidarys vidutiniškai 1,4–5,4 (SSP2–4.5) ir 1,7–9,0 (SSP5–8.5) KKVE daugiau nei baziniu laikotarpiu.

Lydytų druskų sintezė: pagrindai ir neorganinių medžiagų gavimas

Dovydas Karoblis¹, Aleksej Žarkov¹, Tomas Murauskas¹, Agnė Kizalaitė¹, Salah Eddin El Jama², Sarah Stoll², Aivaras Kareiva¹

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Georgetown universitetas (JAV), Chemijos katedra*

Kietafazė sintezė yra vienas iš seniausių ir vis dar plačiai taikomų neorganinių medžiagų gavimo metodų. Pagrindiniai šio metodo privalumai yra paprastumas, kai pradinės medžiagos sumaišomos ir iškaitinamos aukštoje temperatūroje, ir pradinių medžiagų prieinamumas. Tačiau norint gauti galutinį junginį, yra reikalinga aukšta kaitinimo temperatūra ir ilgas kaitinimo laikas. Be to, dažnu atveju gaunami nesureagavę reakcijų mišiniai ir dėl to atliekamas antras kaitinimo etapas, kas prailgina reakcijos laiką ir energijos sąnaudas. Tokie trūkumai gali būti kompensuojami, jeigu į reakcijos mišinį pridedame neorganinių druskų, kurios reakcijos metu išsilydo, kas palengvina pradinių jonų difuziją bei sumažina reakcijos temperatūrą ir kaitinimo laiką. Toks medžiagų gavimo būdas yra vadinamas lydytų druskų sinteze ir gali būti taikomas įvairių neorganinių medžiagų paruošimui.

Keičiant įvairius sintezės parametrus, tokius kaip pradinių ar naudojamų druskų prigimtis, santykis tarp pradinių medžiagų ir druskų, kaitinimo trukmė ir temperatūra, galima gauti ne tik skirtingos formos daleles, tačiau ir skirtingų kristalinių struktūrų fazes. Šiame darbe šis metodas buvo pritaikytas gauti tris skirtingas Y-Mn-O sistemos fazes, kaip YMnO_3 , turintį arba ortorombinę, arba heksagoninę struktūras, ir $\text{Y}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ pirochlorą. Optimalios sintezės sąlygos buvo pritaikytos gauti ir $\text{R}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ (kur R – Ho-Lu) junginius atmosferos slėgyje, nors anksčiau šios medžiagos buvo gaunamos naudojant aukštą slėgį.

Šiame tyrime taip pat buvo tirtas Ruddlesden-Popper struktūros perovskitų gavimas, naudojant lydytų druskų sintezės metodą. Naudojant NaCl ir KCl druskų mišinį, sėkmingai pavyko gauti Ca_2MnO_4 fazę, o CaMnO_3 , $\text{Ca}_3\text{Mn}_2\text{O}_7$ ir $\text{Ca}_4\text{Mn}_3\text{O}_{10}$ junginiai turėjo skirtingą kiekį įvairių priemaišų. Visiems junginiams buvo ištirtos struktūrinės, morfologinės bei magnetinės savybės.

Priekrantės sėklių morfologijos ir protrūkio srovių ryšys Lietuvos Baltijos jūros priekrantėje

Rasa Janušaitė^{1,2}, Laurynas Jukna¹

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Gamtos tyrimų centras, Geoaplinkos tyrimų laboratorija

Protrūkio srovės – stiprūs, jūros link nukreipti vandens srautai, būdingi bangų skalaujamų jūrų ir vandenynų gožos zonoms. Jos yra viena pagrindinių poilsiautojų skendimo jūroje priežasčių ir kasmet nusineša šimtus gyvybių pasaulyje. Protrūkio srovės sukelia vandens lygio gradientai, nulemti netolygios bangų gožos ties išilgai kranto besikaitaliojančiais sėklių ragais ir įlankomis. Palankiausios sąlygos šių morfologinių elementų formavimuisi ir protrūkio srovių pasireiškimui yra, kai krantą pasiekia nedidelės-vidutinės energijos statmenos krantui bangos. Dėl Lietuvos Baltijos jūros krante dažniausiai pasitaikančių vakarinių (V, PV, ŠV) krypčių bangų ir vyraujančios šiaurės-pietų krypties kranto orientacijos tokios sąlygos čia yra dažnos. Tačiau dėl sudėtingų matavimo metodų Lietuvos Baltijos jūros priekrantėje protrūkio srovės yra mažai ištirtos. Šio tyrimo tikslas – nustatyti protrūkio srovių susidarymui palankius kranto ruožus Lietuvos Baltijos jūros priekrantėje, remiantis sėklių morfologinėmis ypatybėmis 2017–2024 m., ir įvertinti protrūkio srovių ypatybes identifikuotuose jų pasireiškimo karštuosiuose taškuose.

Priekrantės sėklių morfologiniams bruožams įvertinti buvo naudojami 2017–2024 m. „PlanetScope“ palydoviniai vaizdai (3 m). Skirtingų datų vaizduose buvo identifikuojamos ir taškais žymimos sėklių ragus skiriančios įlankos – protrūkio srovių kanalai. Remiantis šių įlankų pasikartojimo dažniu, tankiu ir morfologinio išsivystymo laipsniu, buvo skiriamos protrūkio srovių pasireiškimo vietos. Šešiose iš identifikuotų vietų 2024 m. gegužę–rugsėį vykdytos penkios ekspedicijos, kurių metu buvo sekama protrūkio srovių judėjimo trajektorija ir greitis, panaudojant 12 specialios konstrukcijos plūdurių su GPS imtuvais.

Nustatyta, kad 2017–2024 m. sėklių ragų ir įlankų sistemos, rodančios protrūkio srovių pasireišimą, buvo būdingos beveik visai Lietuvos Baltijos jūros priekrantei, išskyrus trumpus klifų ruožus ties Karkle ir Šaipiais. Žemyniniame krante didžiausias šių sistemų skaičius buvo būdingas priekrantės ruožams ties Melnrage-Giruliais, piečiau Nemirsetos rago bei Šventosios uosto ir ties Būtinge. Kuršių nerijoje labiausiai išvysčiusios ir dažniausios sėklių ragų bei įlankų sistemos buvo būdingos Smiltynės-Juodkrantės ruožui, o Juodkrantės-Nidos ruože jų pasireiškimo dažnis ir išsivystymo laipsnis mažėjo pietų kryptimi. Tyrimo rezultatai rodo, jog pavasarį–vasarą sėklių ragų bei įlankų sistemos vystėsi palaipsniui, o didžiausias jų išsivystymo laipsnis ir skaičius visais analizuotais metais buvo pasiektas rugpjūtį.

Identifikuotose sėklių ragų ir įlankų vietose atlikus protrūkio srovių matavimus, užfiksuoti 282 šių srovių pasireiškimo atvejai. Jų metu stebėtas dvejopo pobūdžio protrūkio srovių judėjimas: greitas, nukreiptas jūros link (27% atvejų) ir sukūrinio pobūdžio judėjimas (73% atvejų). Užfiksuotas momentinis protrūkio srovių greitis siekė iki 1,6 m/s. Atliktų matavimų metu buvo stebimos ne tik protrūkio, bet ir meandruojančios bei išilginės jūros priekrantės srovės. Atlikti tyrimai sukuria prielaidas tolesniam priekrantės sėklių ragų bei įlankų morfologinių ypatybių ir protrūkio srovių sąveikos vertinimui bei modeliavimui.

Polipirolo panaudojimas odos paviršiaus elektrinio laidumo didinimui

Povilas Virbickas^{1,2,3}, Sebastian Björklund², Skaidre Jankovskaja², Emelie Nilsson², Aušra Valiūnienė^{1,3}, Johan Engblom², Tautgirdas Ruzgas²

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

²Malmės universiteto Biomedicinos mokslų departamentas

³Fizinių ir technologinių mokslų centras

Odos paviršinio sluoksnio *stratum corneum* (SC) elektrinio laidumo didinimas taikant laidžius polimerus yra aktualus derminių jutiklių vystymui bei kontroliuojamos vaistų pernašos per odą technikų, tokių kaip elektroporacija, efektyvumo gerinimui. Vystant derminius jutiklius, elektrai laidūs polimerai gali būti panaudojami gerinant srovės perdavą per odą, o laidžių polimerų panaudojimas elektroporacijoje remiasi pagerintu elektriniu kontaktu tarp odos ir SC, taip pagerinant elektros indukuotų porų, pro kurias pernešamos farmacinės medžiagos, susidarymo našumą. Vis dėlto, odos modifikavimo laidžiais polimerais tyrimai *in vivo* neretai limituojami toksiškos monomerų prigimtės, apsunkinant bioelektronikos mokslo plėtrą.

Šiame darbe pristatoma Franzo difuzijos celės panaudojimu paremta odos modifikacijos elektrai laidžiu polimeru – polipirolo (PPy) – strategija *in vitro*. 500 µm storio kiaulės ausies odos membrana buvo patalpinta tarp 2 tirpalų: pirolo (iš derminės membranos pusės) ir geležies(III) chlorido (iš SC pusės). 24 valandas trukusio eksperimento metu buvo suformuota PPy danga SC paviršiuje, o Rentgeno spindulių difrakcijos tyrimai parodė, kad PPy galimai susiformuoja ir SC sluoksnio viduje. Elektrocheminio impedanso spektroskopijos tyrimai parodė, kad PPy modifikacija padidina SC elektrinį laidumą ~6 kartus, parodant didelį PPy modifikacijos potencialą bioelektronikoje. Kiek žinoma, tai pirmasis tyrimas, leidęs padidinti SC laidumą dėl PPy panaudojimo. Be to, tikimasi, kad šiame darbe pademonstruota Franzo celės panaudojimu paremta odos modifikavimo laidžiais polimerais technika bus naudinga tiriant ir kitų laidžių polimerų potencialią odos laidumo didinimui, prieš pritaikant šiuos polimerus *in vivo* naudojant sudėtingesnes technikas, tokias, kaip tatuiruotės tipo injekcijos.

Inovatyvi bioįvykių analizė: LIBS ir Bajeso metodų integracija Mulde įvykio tyrimuose

Simona Rinkevičiūtė¹, Žygintas Dabulis², Gintarė Lukoševičiūtė¹, Liudas Daumantas¹, Ona Balachninaite²

¹ Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

² Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto Lazerinių tyrimų centras

Silūro laikotarpiui būdingi reikšmingi bioįvykiai, pasireiškiantys ryškiais biotos įvairovės ir gausos pokyčiais. Paleontologiniuose duomenyse šie procesai identifikuojami remiantis organizmų įvairovės ir gausos svyravimais, stabilųjų izotopų bei cheminių elementų anomalijomis. Nepaisant to, šių pokyčių priežastiniai mechanizmai išlieka nepakankamai ištirti. Vienas iš reikšmingiausių intervalų silūro periode yra Mulde bioįvykis, kurio interpretacijos literatūroje yra nevienareikšmės dėl skirtingų metodologinių prieigų, duomenų skiriamosios gebos ir kompleksinių tyrimų trūkumo. Vykdomu projektu siekiama patikslinti Mulde įvykio interpretaciją, išplėsti aukštos rezoliucijos paleontologinę ostrakodų duomenų bazę geografiniu aspektu ir įvertinti šio bioįvykio mechanizmą, taikant lazeriu indukuotos plazmos spektroskopiją (LIBS) bei Bajeso statistinius metodus.

Tyrimams skirti ėminiai surinkti iš Gėluva-118 grėžinio vidurio Lietuvoje ir keturių atodangų Gotlando saloje (Švedija). Kiekybinė ostrakodų bendrijų analizė Mulde įvykio intervale leido gauti didelės skiriamosios gebos (<10 tūkst. metų) duomenis, atskleidžiančius šio įvykio poveikį ostrakodų faunai kitų silūro bioįvykių ir ilgalaikių ekologinių tendencijų kontekste. Taikant binarinio segmentavimo algoritmą (Daumantas & Spiridonov, 2024), nustatyta Mulde įvykio struktūra ir bendrijų pokyčių dinamika vidurinio homerio laikotarpiu: išskirti penki etapai – priešįvykinė fazė, griūtis (50 tūkst. m), maksimalus stresas (120 tūkst. m), atsigavimas (80 tūkst. m) ir poįvykinė fazė. Apskaičiuota, kad bendra Mulde įvykio trukmė siekė apie 260 tūkst. metų.

Ostrakodų karapaksų cheminė sudėtis plačiai taikoma paleoaplinkos rekonstrukcijoms, ypač vertinant Mg/Ca ir Sr/Ca santykius, susijusius su vandens temperatūros ir druskingumo pokyčiais. Nors įprasti geocheminės analizės metodai pasižymi dideliu tikslumu, jie yra brangūs, laikui imlūs ir destruktivūs. Šiame tyrime taikomas femtosekundinis LIBS metodas leidžia greitai ir minimaliai destruktiviai nustatyti cheminę sudėtį, kartu sumažinant analizės kaštus (Harmon et al., 2005). Preliminarūs rezultatai rodo ryškius Mg/Ca ir Sr/Ca santykių skirtumus tarp tirtų fosilijų ir jas supančios uolienos, taip pat patvirtina LIBS metodo potencialą geocheminiams ir paleoaplinkos tyrimams.

Padėka

Tyrimas finansuojamas VU MSF projekto lėšomis (Nr. MSF-JM-11/2025).

Literatūra

Daumantas, L., & Spiridonov, A. (2024). hespdiv: An R package for spatially constrained, hierarchical and contiguous regionalization in palaeobiogeography. *Palaeontology*, 67, e12702.

Harmon, R. S., De Lucia, F. C., McManus, C. E., McMillan, N. J., Jenkins, T. F., Walsh, M. E., & Miziolek, A. W. (2005). Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS): An emerging field-portable sensor technology for real-time, in-situ geochemical and environmental analysis. *Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis*, 5, 21–28.

Nuo chemijos iki endodontologijos: hidrauliniai kalcio silikatiniai užpildai

Goda Bilvinaitė¹, Vaidas Klimkevičius¹, Tatjana Kirtiklienė², Saulius Drukteinis³, Simas Šakirzanovas¹

¹Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

²Biomokslų institutas, Gyvybės mokslų centras, Vilniaus universitetas

³Odontologijos institutas, Medicinos fakultetas, Vilniaus universitetas

Hidrauliniai kalcio silikatiniai (HKS) užpildai – itin plačiai dantų šaknų kanalų pildyme naudojamos ir aukso standartu šiuolaikinėje endodontologijoje laikomos medžiagos. Nors HKS užpildai pasižymi puikiu biosuderinamumu ir biologiniu aktyvumu, klinikinis šių užpildų naudojimas ilgiau nei dešimtmetį išryškino tam tikrus jų trūkumus – santykinai didelį tirpumą ir porėtumą, ilgą kietėjimą bei ribotą ir trumpalaikį antimikrobinį aktyvumą, kas gali tapti vienu pagrindinių endodontinio gydymo nesėkmės veiksnių. Dėl šios priežasties endodontologijos mokslo srityje vis daugiau dėmesio skiriama įvairiems junginiams ir dalelėms, kurios pagerintų šių užpildų antimikrobinį aktyvumą bei fiziko-chemines savybes.

Sidabro nanodalelių plataus spektro antimikrobinis aktyvumas jau žinomas ir moksliskai patvirtintas seniai, tačiau duomenų apie itin mažo dydžio sidabro dalelių įjungimą į HKS užpildų sudėtį kol kas nebuvo publikuota. Taip pat netirtas poli[2-(metakriloiloksietil)trimetilamonio chlorido] (pMETAC) pritaikomumas odontologijoje, nors šio polimero antimikrobinės savybės buvo pastebėtos kitų mokslo sričių tyrimuose. Kartu atsižvelgiant į mokslinėje literatūroje esančius įrodymus, kad hidroksiapatito įjungimas gali pagerinti įvairių odontologinių užpildų fiziko-chemines bei remineralizacines savybes, vienas pagrindinių kliniškai naudojamų HKS užpildų buvo modifikuotas hidroksiapatitu, pMETAC ir sidabro nanodalelėmis.

Atliktų tyrimų rezultatai parodė, kad HKS užpildų modifikacijai optimaliausia naudoti 10% hidroksiapatito – užpildai su 10% hidroksiapatito pasižymėjo reikšmingai mažesniu tirpumu ir porėtumu, greitesniu kietėjimu bei didesniu atsparumu spaudimo jėgoms, lyginant su nemodifikuotu HKS užpildu. Papildomas pMETAC ir sidabro nanodalelių įjungimas į HKS užpildų sudėtį reikšmingai pagerino užpildų antimikrobinį aktyvumą prieš pagrindinius endodontinių ligų patogenus – *Enterococcus faecalis*, *Staphylococcus aureus* ir *Candida albicans*, be jokios neigiamos įtakos užpildų fiziko-cheminėms savybėms. Tyrimu metu taip pat pastebėta, kad nors sidabro nanodalelės pasižymi kur kas geresniu antibakteriniu poveikiu nei pMETAC, šis polimeras būtinas norint stabilizuoti sidabro nanodaleles ir išvengti jų aglomeracijos.

Visi šie pirmųjų tyrimų rezultatai rodo, kad trijų komponentų – hidroksiapatito, pMETAC ir sidabro nanodalelių – įjungimas į HKS užpildų sudėtį leidžia pagerinti šių šaknų kanalų pildymui skirtų medžiagų savybes ir sukurti funkcionaliai subalansuotą užpildą, galintį potencialiai didinti endodontinio gydymo prognozuojamumą bei bendrą gydymo efektyvumą.

Teritorijų diferencijavimo eksperimentai, remiantis detaliais geografiniais duomenimis

Kostas Gružas

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Detalūs geografiniai duomenys vis dažniau taikomi erdvinėje analizėje, tačiau teritorijų diferencijavimas dažniausiai atliekamas, remiantis formaliais administraciniais vienetais ir iš anksto į juos agreguotais statistiniais rodikliais. Tokia praktika riboja galimybes lanksčiai apibrėžti analizuojamus teritorinius vienetus ir įvertinti realų užstatymo bei funkcinių charakteristikų pasiskirstymą erdvėje. Šio tyrimo tikslas – atlikti teritorijų diferencijavimo eksperimentus, remiantis detaliais geografiniais duomenimis.

Tyrimo naudoti tik atviri duomenų rinkiniai – Georeferencinio pagrindo kadastro pastatų duomenys, Nekilnojamojo turto registro duomenys apie pastatus, Lietuvos gyventojų ir būstų surašymo duomenys, vietos vienetai, statybos leidimai iš IS „Infostatyba“ bei užstatytų teritorijų (kvartalų) ribos, suformuotos Statybos sektoriaus vystymo agentūros. Remiantis šiais duomenimis buvo apskaičiuoti nauji rodikliai, apibūdinantys pastatų morfologiją (vidutinis pastatų plotas ir perimetras), užstatymo struktūrą (vienbučių, dvibučių ir daugiabučių santykis), paslaugų koncentraciją, gyventojų tankį ir teritorijų plėtrą. Skaičiavimai atlikti tiesiogiai naudojant detalius geografinius objektus, vengiant išankstinio duomenų agregavimo į administracinius vienetus.

Teritorijų diferencijavimui taikyta daugiamatė klasterinė analizė (K-means algoritmas), prieš tai rodiklius normalizavus logaritmine transformacija. Atlikti eksperimentai su skirtingais klasterių skaičiais, optimalų jų skaičių vertinant pagal Pseudo-F statistiką. Analizė taikyta tiek visoms Lietuvos užstatytoms teritorijoms, tiek gyvenvietėms kaip stambesniems teritoriniams vienetais.

Gauti rezultatai parodė, kad naudojant detalius geografinius duomenis galima aiškiai atskirti tankiai urbanizuotas teritorijas, pramonines zonas, skirtingo intensyvumo individualių namų kvartalus bei pereinamojo pobūdžio teritorijas. Taip pat nustatyta, kad dalis gyvenviečių, ypač didžiųjų miestų aplinkoje, pagal užstatymo ir funkcines charakteristikas gali būti traktuojami kaip miestai. Tyrimas atskleidžia, jog detalių geografinių duomenų ir inovatyvių GIS analizės metodų taikymas leidžia lanksčiau ir detaliau diferencijuoti teritorijas. Atliekant tolimesnę analizę dėl optimalaus kriterijų parinkimo bei taikant skirtingus klasterizavimo/rajonavimo metodus, tikėtina, galima sudaryti tikslesnę, optimalesnę ir duomenis grįstą Lietuvos teritorijų diferencijavimo metodiką.

Elektrocheminiai biologiniai jutikliai ir jų tobulinimas panaudojant įvairias nanostruktūras

Benediktas Brasiūnas, Anton Popov, Almira Ramanavičienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos instituto Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras

Šiuolaikinių biologinių jutiklių kūrimui yra plačiai taikomos įvairios nanotechnologijų mokslo sritys. Nanomedžiagos pasižymi dideliu paviršiaus ploto ir tūrio santykiu ir, priklausomai nuo medžiagos, pasižymi išskirtinėmis elektrinėmis ar optinėmis savybėmis. Be to, šias nanomedžiagų savybes taip pat galima papildomai kontroliuoti keičiant nanostruktūrų dydį, morfologiją, ar modifikuojant jų paviršių. Nanodalelių integravimas į biologinių jutiklių struktūrą gali reikšmingai pagerinti jų jautrumą bei patikimumą, taip sudarant galimybes pasiekti nuolat augančius diagnostikos srities poreikius.

Elektrocheminiai biologiniai jutikliai pasižymi dideliu jautrumu bei plačiu analitės koncentracijos nustatymo intervalu. Taip pat šiuos jutiklius lengva miniatiūrizuoti, jų gamybos sąnaudos nedidelės, o kompaktiška signalo registravimo įranga gali būti patogiai pritaikoma tyrimams už laboratorijos ribų. Dėl šių priežasčių vienas plačiausiai paplitusių ir kliniškai reikšmingiausių biologinių jutiklių yra elektrocheminiu principu veikiantis gliukozės jutiklis. Be gliukozės nustatymo sistemų, reikšmingą vietą elektrocheminių biologinių jutiklių srityje užima ir imuniniai jutikliai.

Dabartinę pažangą elektrocheminių biologinių jutiklių kūrimo srityje daugiausia lėmė vis sudėtingesnių nanostruktūrų kompozitų sintezė ir taikymas, siekiant pagerinti jutiklių elektrines savybes. Nanostruktūros taikomos tiek elektrodo paviršiaus modifikavimui, tiek biologinių komponentų žymėjimui. Šiame tyrime pristatoma kaip skirtingos morfologijos aukso nanostruktūros, naujoviškos „MXene“ medžiagos, cinko oksidas, bei aukso nanostruktūrų ir berlyno mėlio kompozitas yra taikomi elektrocheminių biologinių jutiklių tobulinimui. Apžvelgiamos skirtingos elektrodų charakterizavimo ir modifikavimo nanostruktūromis galimybės.



STENDINIAI PRANEŠIMAI

High-Performance NiCo/Cu Bifunctional Electrocatalysts for Alkaline Overall Water Splitting

Huma Amber, Gitana Valeckytė, Zita Sukackienė, Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, Eugenijus Norkus

Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Department of Catalysis

Water splitting is regarded as a sustainable, economical, and eco-friendly method of producing hydrogen fuel. This ideal energy carrier exhibits ultrahigh energy density and the potential to replace fossil fuels. However, the practical implementation of this process is limited by the sluggish kinetics and high overpotentials of both the hydrogen evolution reaction (HER) and the oxygen evolution reaction (OER). The development of bifunctional, earth-abundant, and non-precious metal electrocatalysts capable of efficiently driving both HER and OER in alkaline media provides a promising approach to enhance overall water splitting, reduce energy losses, and enable economically viable hydrogen production. In this study, nickel-cobalt (NiCo) bifunctional electrocatalysts were fabricated via a facile electroless deposition method on copper (Cu) substrates, resulting in a cost-effective, highly conductive, and robust platform. In order to determine the impact of composition on catalytic performance, a series of NiCo catalysts with varying cobalt contents (4, 10, 20, 50, and 80 wt.%) was prepared, allowing for a comprehensive evaluation of the relationship between composition and activity. The electrocatalysts were thoroughly characterized via a range of analytical techniques, including scanning electron microscopy (SEM), energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), X-ray diffraction (XRD), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), and inductively coupled plasma optical emission spectroscopy (ICP-OES). These detailed analyses offer comprehensive insights into the surface morphology, crystal structure, and elemental distribution of the catalysts. The electrocatalytic performance of the NiCo electrocatalysts was evaluated in 1.0 M KOH using a two-electrode configuration.

Amongst all the compositions studied, the NiCo catalyst with 50 wt.% Co ($\text{Ni}_{50}\text{Co}_{50}$) demonstrated the most effective bifunctional activity for overall water splitting (OWS). It is noteworthy that when $\text{Ni}_{50}\text{Co}_{50}$ was utilized as both the anode and cathode, the system exhibited OWS at a cell voltage of 1.62 V, achieving a current density of 10 mA cm^{-2} . The enhanced performance of $\text{Ni}_{50}\text{Co}_{50}$ is attributed to the synergistic effect of Ni and Co, which has been demonstrated to enhance redox activity, optimize the adsorption energies of reaction intermediates, and facilitate efficient charge transfer during both HER and OER. This study proposes a rational and viable approach for the development of cost-effective bifunctional electrocatalysts for OWS. The findings indicate that the synergistic combination of compositional engineering, facile electroless synthesis, and comprehensive characterisation leads to enhanced catalytic performance, providing a promising alternative to noble-metal-based systems for sustainable hydrogen production.

2

Development of Molecularly Imprinted Polypyrrole for Methylene Blue Recognition

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

¹*Department of Nanotechnology, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology (FTMC)*

²*Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Lithuania*

Molecularly imprinted polymers (MIPs) are synthetic materials designed to selectively detect specific target molecules. Now, artificial recognition materials designed to simulate natural binding processes are widely explored topic in modern sensor research.

In regard to the materials implemented in MIP-based sensor design, conducting polymers such as polypyrrole (Ppy) play an important role. Polypyrrole is widely applied in sensor fabrication due to its electrical conductivity, chemical stability, and ability to form uniform coatings on conductive substrates. In the present study, Ppy was employed to form thin layers on indium tin oxide (ITO) electrodes, providing a suitable platform for molecular imprinting.

Methylene blue (MB) is a phenothiazine dye widely used in textile processing as well as clinical practice. Despite its electroactive properties and redox activity, there may also be potential risks to human health and the environment.

This recent study focused on the development and evaluation of molecularly imprinted polypyrrole layers for methylene blue recognition. Different deposition conditions were investigated to assess their influence on layer thickness and mechanical durability. This study aimed to prepare both molecularly imprinted and non-imprinted polymer coatings onto the working electrodes for comparative analysis. The resulting layers were characterized using potential pulse chronoamperometry and cyclic voltammetry to evaluate their electrochemical behavior and stability. The results demonstrate that polypyrrole-based MIPs incorporating methylene blue imprints can serve as a promising platform for the development of sensors sensitive to MB.

3

Klimato kaita ir miesto medžiai: galimi medžių rūšių sudėties pokyčiai Vilniaus mieste

Liepa Bučinskaitė, Justina Kapilovaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Klimato kaita reikšmingai veikia medžių rūšių paplitimą. Urbanizuotose teritorijose medžiai teikia svarbias ekosistemines paslaugas – reguliuoja mikroklimatą ir vandens apytaką, mažina oro taršą, suteikia vėsinamąjį poveikį bei prisideda prie žmonių fizinės ir emocinės gerovės. Todėl svarbu įvertinti, kaip ateityje gali kisti Vilniaus miesto želdinių rūšinė sudėtis. Šio tyrimo tikslas – nustatyti klimato kaitos poveikį medžių rūšims, galinčioms augti Vilniaus mieste, ir įvertinti, kurios iš šiuo metu augančių rūšių išliks atsparios prognozuojamiems klimato sąlygų pokyčiams, o kurioms jie taps nepalankūs.

Šiame tyrime, remiantis 1995-2024 m. stebėjimų duomenimis ir CMIP6 MPI-ESM1-2-LR modelio 2071-2100 m. laikotarpio projekcijomis pagal SSP2-4.5 ir SSP5-8.5 scenarijus, nustatyta Vilniaus miesto vidutinė metinė oro temperatūra (°C), kritulių kiekis (mm), sausiausio mėnesio kritulių kiekio suma (mm) ir sezoninis kritulių kiekio pasiskirstymas. MPI-ESM1-2-LR modelis pasirinktas dėl patikimo Šiaurės Atlanto regiono cirkuliacijos procesų, reikšmingai veikiančių Baltijos regiono klimatą, modeliavimo. Taip pat surinkti duomenys apie 2025 m. Vilniaus mieste inventorizuotas medžių rūšis, jų optimalias gyvavimo sąlygas ir rizikos veiksnius bei rūšių tolerancijos ribas. Klimato rodikliai palyginti su rūšių optimaliomis augimo sąlygomis, atsižvelgiant į jų jautrumą temperatūros ir drėgmės pokyčiams.

Nustatyta, jog 1995-2024 m. Vilniaus miesto metinė oro temperatūra sparčiai kilo, vidutinė metinė oro temperatūra buvo 7,4 °C, vidutinis metinis kritulių kiekis 676,1 mm, sausiausi mėnesiai buvo kovas (kritulių suma 40,0 mm) ir balandis (36,1 mm), kritulių kiekio sezoninis pasiskirstymas SI = 0,25. Šie rodikliai atitiko daugelio inventorizuotų medžių rūšių optimalias sąlygas, tačiau nelabai tiko maumedžiams, paprastiesiems šermukšniams, paprastiesiems uosiams. Pagal SSP2-4.5 klimato scenarijaus prognozes 2071-2100 m. laikotarpiu vidutinė metinė oro temperatūra bus apie 9,5 °C, vidutinis metinis kritulių kiekis apie 669,1 mm, o sausiausias mėnesis prognozuojamas rugpjūtis (50,1 mm). Kritulių kiekio sezoninis pasiskirstymas SI = 0,21. Vidutinė metinė oro temperatūra bus per aukšta paprastajai eglei, maumedžiui, mažalapei liepai, baltajai tuopai ir paprastajam šermukšniui, vidutinis metinis kritulių kiekis bus per didelis baltajai tuopai ir kalninei guobai, o sausiausio mėnesio kritulių kiekio suma bus per maža maumedžiui, juodalksniui, uosialapiui klevui ar vėlyvajai ievai. Pagal SSP5-8.5 scenarijų 2071-2100 m. laikotarpiu vidutinė metinė oro temperatūra bus apie 11,3 °C, vidutinis metinis kritulių kiekis apie 607,3 mm, sausiausias mėnesis prognozuojamas rugpjūtis (32,5 mm), kritulių kiekio sezoninis pasiskirstymas SI = 0,28. Vilniaus mieste augančioms medžių rūšims vidutinė metinė oro temperatūra bus per aukšta, o kritulių kiekis per mažas (ypač maumedžiui, paprastajam šermukšniui, juodalksniui, paprastajam uosiui ir vėlyvajai ievai). Remiantis klimato scenarijais daugeliui Vilniuje augančių medžių rūšių ateities klimatas gali tapti netinkamas, todėl būtini tolimesni tyrimai ir sprendimų paieška.

4

Sidabro vitlokito sintezė tirpinimo-nusodinimo metodu

Gabrielė Eglė Budžytė, Aivaras Kareiva, Inga Grigoravičiūtė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Keramikinės medžiagos, konkrečiai kalcio fosfatai (KF), plačiai nagrinėjamos todėl, kad jų sandara yra artima žinduolių kietųjų audinių mineralinei fazei, o jų bioaktyvus paviršius skatina kaulo regeneraciją. Dėl palankios sąveikos su biologiniais audiniais šios keramikos laikomos perspektyviomis tiek kaulo pakaitalams, tiek implantų paviršių dangoms. Pastaraisiais metais didesnis dėmesys skiriamas vitlokito tipo fosfatams kaip galimai alternatyvai įprastiniams KF junginiams. Literatūroje dažnai minima stipresnė osteogeninė reakcija ir greitesnis kaulo gijimas. Reikšminga paminėti tai, kad vitlokito kristalinė struktūra išlieka stabili net esant sudėties pokyčiams. Dėl šios priežasties kalcio (Ca) jonai gali būti pakeičiami kitais jonais, o tokia galimybė leidžia kryptingai formuoti naujas, legiravimo nulemtas vitlokito funkcines savybes.

Viena aktualiausių pakaitos kryptių yra legiravimas sidabru (Ag). Ag įvedimas į vitlokito struktūrą domina tuo, kad jis suteikia medžiagai antibakterinių savybių ir taip sumažina infekcinių komplikacijų tikimybę kaulo rekonstrukcijos ar implantacijos metu. Antibakterinis sidabro aktyvumas dažniausiai siejamas su Ag^+ jonų išsiskyrimu, kurie sąveikauja su bakterijų membranomis, baltymais ir genetinė medžiaga, slopindami kolonizaciją medžiagos paviršiuje. Tačiau patikimų ir praktiškai pritaikomų Ag legiruoto vitlokito sintezės metodų sukūrimas tebėra sudėtingas uždavinys.

Šiame tyrime Ag-vitlokitas buvo sintetinamas naudojant kalcio sulfato hemihidratą ($\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$) kaip kalcio (Ca) šaltinį. Reakcija buvo vykdoma fosfato ir sidabro jonų turinčioje terpėje, kurioje pirmiausia tirpo $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$, o vėliau susiformavo Ag-vitlokito nuosėdos. Tyrimo metu įvertinta pagrindinių sintezės sąlygų įtaka fazių formavimuisi ir galutinei produkto sudėčiai. Tirtos sąlygos apėmė reakcijos trukmę, Ca ir Ag santykį bei fosfatinės terpės pH. Gautų mėginių fazinė sudėtis ir grynumas, taip pat jų morfologinės savybės nustatytos naudojant rentgeno spinduliuotės difrakciją (XRD), Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR), induktyviai susietos plazmos spektroskopiją (ICP) ir skenuojančią elektroninę mikroskopiją (SEM).

5

Redukuoto grafeno oksido ir kalcio deficitinio hidroksiapatito kompozitai: sintezė, struktūrinė ir elektrocheminė analizė

Dovilė Burakovaitė¹, Greta Linkaitė¹, Inga Grigoravičiūtė¹, Justina Gaidukevič^{1,2}

¹ Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

² Fizinių ir technologijos mokslų centras

Dopaminas (DA) yra vienas svarbiausių katecholaminų grupės neurotransmiterių, atliekantis reikšmingą vaidmenį žmogaus nervinėje, hormoninėje ir kraujotakos sistemose. Dopamino koncentracijos pokyčiai organizme siejami su Parkinsono ir Alzheimerio ligomis, depresija, šizofrenija, hipertenzija ir širdies nepakankamumu. Siekiant anksti diagnozuoti šiuos sutrikimus, labai svarbu greitai ir tiksliai nustatyti DA koncentraciją. Nors DA aptikimui naudojami įvairūs analitiniai metodai, daugelis jų yra brangūs ir sudėtingi, todėl vis didesnis dėmesys skiriamas elektrocheminiams jutikliams. Elektrocheminių jutiklių analitinis atsakas priklauso nuo elektrodų paviršiaus savybių, todėl jų efektyvumą galima didinti elektrodą modifikuojant redukuotu grafeno oksidu (rGO), kuris dėl didelio paviršiaus ploto, gero elektrinio laidumo bei deguoninių funkcinių grupių, kurios lieka medžiagos paviršiuje po terminio apdorojimo, yra plačiai taikomas elektrocheminių jutiklių modifikavimui. Siekiant pagerinti jutiklių funkcines savybes, rGO gali būti modifikuojamas įvairiomis medžiagomis, pavyzdžiui, su kalcio deficitiniu hidroksiapatitu (CDHA), pasižyminčiu didele jonų adsorbcijos geba ir geru biologiniu suderinamumu.

Šio tyrimo tikslas – šlapios ir hidroterminės sintezės metodais susintetinti rGO/CDHA kompozitus ir įvertinti jų struktūrines bei elektrochemines savybes DA aptikimui.

rGO/CDHA kompozitai gauti dviem būdais. Šlapios sintezės metodu – gipso ir GO (santykis 2:1) bei dinatrio vandenilio fosfato mišinį kaitinant 80 °C 28 valandas – gautas CDHA rGO kompozitas. Hidroterminės sintezės metodu – analogiškas gipso ir GO (santykis 2:1) bei dinatrio vandenilio fosfato mišinys buvo kaitinamas hidroterminėje bomboje 180 °C 12 valandų – gautas CDHA rGO hid kompozitas.

Atlikti struktūriniai ir morfologiniai tyrimai parodė, kad rGO/CDHA kompozitai buvo sėkmingai susintetinti. XRD analizės duomenys parodė, kad kompozitų difraktogramose dominuoja CDHA difrakcinės smailės. Taip pat nustatyta, kad šlapios sintezės būdu gauti mėginiai pasižymi mažesniu kristališkumu ir didesniu amorfiškumu, palyginti su mėginiais, susintetintais hidroterminėje aplinkoje. Ramano spektroskopijos rezultatai patvirtino, kad kompozitų paviršiuje yra CDHA charakteringos fosfatinės smailės ir rGO charakteringos D ir G juostos. FTIR ir XPS analizės taip pat patvirtino sėkmingą rGO/CDHA kompozitų formavimąsi ir parodė P, Ca bei O buvimą rGO paviršiuje. Elektrocheminiai tyrimai, atlikti trijų elektrodų celėje naudojant fosfatinį buferinį tirpalą, parodė, kad GCE/CDHA rGO jutiklis pasižymi didžiausiu jautrumu (11,11 $\mu\text{A } \mu\text{M}^{-1} \text{ cm}^{-2}$) ir mažiausia aptikimo riba (LOD = 100,35 nM) lyginant su GCE/CDHA rGO hid jutikliu. Be to, šis jutiklis pasižymėjo aukštu selektyvumu, stabilumu ir geru atsikartojamumu. Šie rezultatai rodo patikimą jutiklio veikimą, kurį ateityje galima dar labiau pagerinti plečiant tiesinį analitės aptikimo intervalą ir mažinant LOD.

6

Comparative Study of the Effects of Dopant Concentration on the Structural and Photoluminescent Properties of CAGDALO₄ and CAYALO₄ Phosphors

Domantas Černius^{1,2}, Monika Skruodienė^{2,3}, Milda Petruleviečienė^{2,3}, Meldra Kemere³, Ramūnas Skaudžius^{1,2}

¹Vilnius University, Department of Inorganic Chemistry

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

³University of Latvia, Institute of Solid-State Physics

CaGdAlO₄ (CALGO) and CaYAlO₄ (CALYO) have gained considerable interest as host matrices for rare-earth ions due to their advantageous thermal and structural properties. Both materials crystallize in the *I4/mmm* space group and exhibit a disordered crystal structure in which Ca²⁺ and RE³⁺ ions occupy the same crystallographic sites. This structural disorder results in the broadening of absorption and emission bands, which is an essential characteristic for high-efficiency laser materials. In addition, CALGO and CALYO demonstrate high thermal conductivity and excellent mechanical stability, enabling them to withstand the thermal loads associated with high-power optical applications.

This study aims to determine the optimal concentrations of Holmium (Ho³⁺) and Ytterbium (Yb³⁺) dopants, introduced separately, in order to maximize optical performance while preserving the structural integrity of the host lattice. X-ray diffraction (XRD) is used to evaluate how increasing dopant concentration affects phase purity and crystal structure. Scanning electron microscopy (SEM) is employed to examine surface morphology and determine particle size distribution. Photoluminescence measurements provide direct information about the optical behavior of the dopant ions within the host lattice. Analysis of the emission spectra enables quantification of Ho³⁺ and Yb³⁺ emission intensities and evaluation of their dependence on dopant concentration. These measurements reveal the efficiency of radiative transitions, identify characteristic emission bands and allow observation of concentration-dependent effects such as energy transfer and concentration quenching. By correlating structural data obtained from XRD and SEM with photoluminescence results, this study aims to identify the optimal dopant concentrations for CALGO and CALYO and confirms their suitability as high-performance optical materials.

Phase purity of all samples was confirmed by XRD. Absorption spectra revealed that these samples doped with Ho exhibit a broad absorption band in the UV region with a maximum near 350 nm (for CALGO). The characteristic narrow Ho³⁺ absorption bands appear partially distorted in these samples, suggesting possible lattice defects or defect-related centers, potentially associated with oxygen interstitials or vacancies. Interestingly, the intensity of the broad UV absorption decreases with increasing Ho concentration. In CaGdAlO₄:Yb samples, the near-infrared absorption around 980 nm scales proportionally with Yb concentration. Narrow absorption features in the UV range appear largely independent of Yb concentration.

Nizino kapsuliavimas polisacharidinėse matricose: sintezė, charakterizavimas ir stabilumo tyrimai

Agnė Česnulevičiūtė¹, Aistė Galinskaitė¹, Rūta Gruškienė¹, Tatjana Kavleiskaja², Jolanta Sereikaitė¹

¹Vilniaus Gedimino technikos universiteto Fundamentinių mokslų fakulteto Molekulinės biotechnologijos laboratorija

²Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Nizinas – mažos molekulinės masės (3,5 kDa) peptidas, gaminamas bakterijų *Lactococcus lactis*, pasižymintis plačiu antimikrobiniu aktyvumu prieš gramteigiamas bakterijas. Dėl šių savybių jis plačiai taikomas maisto pramonėje, taip pat svarstomas naudoti farmacijos ir sveikatos srityse. Vis dėlto nizino praktinį pritaikymą riboja jo jautrumas aplinkos veiksniams, tokiems kaip pH pokyčiai, temperatūros svyravimai bei proteolitinis skilimas. Siekiant padidinti nizino stabilumą ir apsaugoti jį nuo degradacijos, taikomas kapsuliavimas – bioaktyvių medžiagų įterpimas į apsauginę matricą arba jų apgaubimas apsauginiu sluoksniu.

Polisacharidai yra perspektyvūs kapsuliavimo medžiagų kandidatai dėl savo biosuderinamumo, netoksiškumo, biodegraduojamumo ir gebėjimo sudaryti stabilias daleles ar kompleksines sistemas. Gautų dalelių/sistemų savybės priklauso ir nuo naudojamų polimerų struktūros, krūvio bei tankio, o jų susidarymą lemia elektrostatinės, vandenilinės ir hidrofobinės sąveikos. Nizino įterpimas į polisacharidinę matricą galėtų pagerinti jo atsparumą nepalankioms sąlygoms ir sudaryti prielaidas kontroliuojamam atpalaidavimui.

Tyrimo tikslas buvo sukurti stabilizuotas nizino daleles taikant paprastą ir ekonomišką kompleksavimo metodą. Šiam tikslui naudoti keli polisacharidai: fukoidanas, ulvanas, κ-karageninas, bei skirtingo esterifikacijos laipsnio pektinai. Komponentų tarpusavio sąveika įvertinta taikant FT-IR spektroskopiją, dinaminės šviesos sklaidos metodą, termogravimetrinę analizę ir diferencialinę skenuojančią kalorimetriją. Gautos dalelės buvo charakterizuotos pagal jų dydį, zeta potencialą ir stabilumą, atsižvelgiant į naudojamo polisacharido tipą, jo santykį su nizinu ir tirpalo pH. Taip pat buvo tiriamas sistemose esančio nizino proteolitinis stabilumas ir pH, temperatūros bei joninės jėgos įtaka nizino atpalaidavimui. Gauti rezultatai parodė, kad kapsuliuotas nizinas išlaiko antimikrobinį aktyvumą, pasižymi geresniu proteolitiniu stabilumu, gautų dalelių dydis bei krūvis išlieka nepakitęs mažiausiai 4 savaites, o biopolimerinės sistemos leidžia efektyviai reguliuoti nizino išsiskyrimą.

Apibendrinant galima teigti, kad šiame darbe tirti polisacharidai yra tinkami kaip nizino nešikliai, o sukurtos kapsuliavimo sistemos turi potencialo būti pritaikytos maisto pramonėje biologiniam konservavimui.

Saulės aktyvumo ciklų nustatymas Vilniaus vidutinės oro temperatūros klimatinėse eilėse

Gintarė Dapkuvienė, Aistė Griciūtė, Mantas Jazdauskas, Kamilė Skinkytė, Deividas Stragis, Jolita Vroblevičienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Tyrimo tikslas - nustatyti Saulės aktyvumo ciklus Vilniaus vidutinės kiekvieno mėnesio oro temperatūros klimatinėse eilėse. Kadangi analizuotos oro temperatūros klimatinės eilės apima periodą nuo 1778 iki 2024 metų, vidutinės oro temperatūros svyravimo priklausomybei nuo Saulės aktyvumo identifikuoti buvo naudojamas epochų kompozicijos metodas ir taikomas neparametrinės statistikos testas (Wilkoksono kriterijus). Tyrimo metu apskaičiuoti vidutinės oro temperatūros klimatinė eilių vidurkiai bei nuokrypiai, kurie sugrupuoti į 7 metų eilės imtis (epochas) – $n-3$, $n-2$, $n-1$, n , $n+1$, $n+2$, $n+3$ – pagal Saulės aktyvumo ciklus. Kiekvienam mėnesiui buvo sudarytos nuokrypio imčių poros (viso 49 per mėnesį), kurioms pritaikytas Wilkoksono kriterijus siekiant patikrinti ar nuokrypių skirtumai Saulės aktyvumo laikotarpiais yra statistiškai reikšmingi.

Įvertinus kiekvieno mėnesio vidutinės oro temperatūros nuokrypių skirtumus tarp Saulės aktyvumo minimumo ir maksimumo laikotarpių, daugiausiai statistiškai reikšmingų skirtumų nustatyta spalio – sausio mėnesiais likus 2 metams iki Saulės aktyvumo minimumo ($n-2$), kai iš 49 imčių porų statistiškai reikšmingi skirtumai tarp porų siekė nuo 10 iki 14 iš visų galimų 49 porų. Daugiausiai reikšmingų porų skirtumų nustatyta gruodžio mėnesį ir siekė 14, o mažiausiai – kovo ir rugsėjo mėnesį (po 3 poras). Spalio – vasario mėnesių laikotarpiu tarp imčių porų dominuoja 95 % patikimumas pagal Wilkoksono kriterijų, likusiais mėnesiais – 90 %. Didesnis reikšmingų skirtumų patikimumas spalio – sausio mėnesiais iš esmės koreliuoja su didesniu porų su reikšmingu nuokrypių skirtumu pasikartojimu tų pačių mėnesių laikotarpiu ir leidžia daryti prielaidą, kad Saulės aktyvumo ciklas Vilniaus meteorologijos stoties vidutinės mėnesio oro temperatūros klimatinėse eilėse gali būti identifikuojamas likus dvejiems metams ($n-2$) iki Saulės aktyvumo minimumo, kai spalio ir sausio mėnesį vidutinis oro temperatūros nuokrypis siekė atitinkamai $+0,6$ ir $+1,7$ °C, ir yra ryškesnis rudens – žiemos laikotarpiu. Tiesa, lapkričio ir gruodžio mėnesį Saulės aktyvumo minimumo $n-2$ metų vidutinis oro temperatūros nuokrypis siekė po $-0,2$ °C, tačiau jis buvo $0,2$ – $0,5$ laipsniais mažesnis lyginant su Saulės aktyvumo maksimumo $n-2$ metais. Šie skirtumai galimai susiję su pasaulinio vandenyno inertiškumu, kai šilumą, sukauptą Saulės aktyvumo maksimumo laikotarpiu, vandenynas į atmosferą atiduoda jau po Saulės aktyvumo maksimumo, dėl to matomas vidutinės oro temperatūros nuokrypių padidėjimas ar tik nežymus sumažėjimas Saulės aktyvumo minimumo ciklo pradžioje. Kovo – rugsėjo mėnesių laikotarpiu tik pavienių imčių skirtumai buvo statistiškai reikšmingi (dominavo 90 % patikimumas), todėl daroma prielaida, kad Saulės aktyvumo ciklai šiuo laikotarpiu Vilniaus meteorologijos stoties vidutinės oro temperatūros klimatinėse sekose neidentifikuojami.

9

Medžių tipo indekso kūrimas remiantis palydoviniais duomenimis ir jo taikymas Vilniaus mieste

Diana Deltuvaitytė, Edvinas Stonevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Šiame pranešime pristatomas metodikos kūrimas, kuris leidžia identifikuoti medžių tipą remiantis palydoviniais duomenimis. Metodikai sukurti buvo naudojami 2023 metų birželio ir kovo mėnesių NDVI duomenys, kuriais remiantis buvo apskaičiuotas dNDVI indeksas. dNDVI indekso klasifikacijai naudotasi Corine Land Cover lapuočių, spygliuočių ir mišrių miškų klasėmis. Remiantis šiomis klasėmis ir dNDVI indeksu buvo nustatytas indekso reikšmių pasiskirstymas skirtingo tipo medynuose. Remiantis jais sukurti lapuočių, mišrių ir spygliuočių medžių reikšmių pasiskirstymo intervalai, kurie yra pritaikomi Vilniaus miesto savivaldybėje pagal European Urban Atlas išskiriamas žaliąsias ir užstatytas teritorijas. Siekiant įvertinti ar indekso klasifikacija leidžia teisingai identifikuoti medžių tipą buvo atlikta indekso validacija. Validacijai naudoti ortofoto vaizdai ir *in situ* stebėjimai. Medžių tipų nustatymo patikimumas patikrintas 5 reprezentatyviose miško ir žaliųjų miesto erdvių teritorijose. Rezultatai parodė, kad homogeniškuose pikseliuose dNDVI indeksas su nustatytomis klasių ribomis klasifikuoja medžių tipus teisingai, o pikseliai su heterogeniška danga dažniausiai priskiriami mišrių medžių tipui. Siekiant padidinti klasifikacijos tikslumą vertėtų naudoti didesnės raiškos palydovinius duomenis.

Nors indeksas sukurtas medžių tipo nustatymui žaliosiose teritorijose, jis gali būti pritaikomas ir užstatytų teritorijų analizėje. Čia šis indeksas gali būti naudojamas žaliųjų plotų identifikacijai užstatytose teritorijose. Atliekant statistinę analizę skirtingo užstatymo lygio teritorijose ir infrastruktūroje nustatyta, kad antropogeniniuose paviršiuose, tokiuose kaip: keliai, pastatai ar kita asfaltu dengta teritorija dNDVI indekso reikšmė bus artima 0, nes ši sezoninės kaitos neturi. Teritorijose, kurios yra labai aukšto užstatymo lygio, dažniausiai vyrauja pikseliai su dirbtinėmis dangomis, tačiau pasitaiko ir mišrių pikselių, kurie identifikuoja, kad teritorijoje yra ir žaliųjų erdvių. Kuo teritorijos užstatymo lygis mažesnis, tuo daugiau žaliųjų plotų joje yra, todėl ir pikselių su aukštesnėmis indekso reikšmėmis daugiau, todėl dNDVI gali būti taikomas urbanizuotų teritorijų žalumo vertinimui.

Taigi, sukurtas ir patikrintas dNDVI indeksas yra tinkamas naudoti medžių tipų nustatymui ne tik Vilniuje, bet ir kituose miestuose ir jų apylinkėse. Dvilypis indekso pritaikymas parodo dNDVI indekso daugiafunkciškumą ir pritaikymą skirtingoms situacijoms siekiant gauti skirtingus rezultatus. Ši metodika yra naudinga ir patogi medžių tipų nustatymui urbanizuotose teritorijose ir ne tik. Siekiant pagerinti rezultatų tikslumą rekomenduojama sumažinti pikselių raišką, tokiu būdu teritoriją suskirstant į mažesnius ir homogeniškesnius plotus.

10

Savitvarkio monosluoksnio sudėties įtaka fosfolipidinių membranų savybėms

Auksė Dobikaltytė, Gerda Lukrecija Žižiūnaitė, Aušra Valiūnienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Fosfolipidinės dvisluoksnės membranos yra svarbi ląstelių struktūra atskirianti ir apsauganti ląstelę nuo aplinkos. Norint geriau suprasti kaip membranos apsaugo ląstelę ir vykdo jonų pernašą, kuriami fosfolipidinių membranų modeliai. Formuojant tokias membranų sistemas stengiamasi, kad jos kiek įmanoma labiau atkartotų gyvose ląstelėse esančių membranų struktūrą ir savybes. Taip pat, tai plačiai naudojamos sistemos biojutiklių kūrimo. Norint suformuoti kuo mažiau heterogeniškas membranas reikalingas lygus ir mažai defektų turintis paviršius. Dėl to kaip pagrindas dažniausiai naudojami įvairūs metalai ir lydiniai tokie kaip auksas, sidabras ir t.t. Ant pasirinkto substrato imobilizuojami molekuliniai inkarai, ant kurių tvirtinamas fosfolipidinės membranos dvisluoksnis. Viena medžiaga ar medžiagų mišinys iš kurio savaime susiformuoja molekulių inkarų sluoksnis vadinamas savitvarkiu monosluoksniu (SAM). Ant tokio sluoksnio užliejamos vezikulės iš kurių susiformuoja membranos. Suformavus tokią sistemą membranos tiesiogiai nesąveikauja su substratu ir sukuriamas po membrana esantis skysčio sluoksnis, dėl kurio membrana turi takumo savybę ir yra panašesnė į natūralią membraną. Galiausiai tokias membranas galima veikti toksinu ir stebėti jų sukeltus pokyčius membranoje. Kadangi substratas yra kieta ir elektros srovei laidus medžiaga, sistemoje vykstančius kitimus galima tirti elektrocheminio impedanso spektroskopijos būdu. Šis metodas leidžia greitai fiksuoti elektrocheminių parametrų pokyčius laike ir iš užfiksuotų duomenų galima nuspręsti apie formuojamų savitvarkių monosluoksnių ir fosfolipidinių membranų savybes bei toksino poveikį joms. Siekiant suformuoti homogenišką fosfolipidinio dvisluoksnio sistemą, reikia sukurti pakankamai homogenišką molekulių inkarų sluoksnį. Naudojant tik vieno tipo ilgą grandinę turintį molekulinį inkarą WC14 (20-(tetradeksioksi)-3,6,9,12,15,18,22-heptaoksaheksatriakontano-1-tiolis) tolygus SAM sluoksnis nesusidaro. Pastebėta, kad molekulės paviršiuje išsidėsto labai tankiai ir sunkiau formuojasi membranos. Dėl šių priežasčių WC14 reikia skiesti trumpas grandines turinčiomis molekulėmis, nes jų pridėjimas pakeičia WC14 molekulių išsidėstymą, orientaciją erdvėje ir ant tokio SAM gali formotis homogeniškesnės membranos.

Šio tyrimo tikslas buvo ant aukso nanosluoksniu dengtų stiklo plokštelių suformuoti savitvarkius monosluoksnius iš tiolio WC14 ir skirtingų trumpas grandines turinčių tiolių bei jų skirtingos sudėties mišinių. Ant jų formuotos dvisluoksnės fosfolipidinės membranos tokia sudėtimi: 60% DOPC (1,2-diolioilo-sn-glicero-3-fosfocholinas) ir 40% cholesterolio. Formuoti savitvarkiai monosluoksniai, ant jų formuotos membranos ir melitino toksino poveikis tirti elektrocheminio impedanso spektroskopijos (EIS) metodu.

Atlikus tyrimą iš EIS duomenų buvo pastebėta, kad naudojant mišinius su skirtingas trumpas grandines turinčiais tioliais ir jų įvairių sudėčių gauti savitvarkiai monosluoksniai bei ant jų suformuotos membranos pasižymėjo skirtingu homogeniškumu ir dviguba elektrinio sluoksnio talpa.

Legiruoto bario metaborato tyrimas

Marius Dzvinka, Martynas Misevičius

Vilniaus Universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

β -bario metaboratas BaB_2O_4 pasižymi įdomiomis netiesinėmis optinėmis savybėmis. Dėl šios priežasties tokie monokristalai yra naudojami lazeriuose bangos ilgio keitimui (harmonikų generavimui). Šio darbo metu buvo tirtos europio legiruoto bario metaborato optinės savybės.

Nelegiruoto bei europio legiruoto β -bario metaborato mėginiai buvo susintetinti kietafazių reakcijų metodu. Šiam tikslui stochiometriniai kiekiai bario karbonato, boro rūgšties bei europio (III) oksido buvo sumaišyti agatinėje grūstuvėje (naudojant 5 ml acetono homogenizavimui). Gauti mišiniai buvo kaitinami mufelinėje krosnyje du kartus 800 °C temperatūroje po valandą.

Rentgeno spindulių difrakcine analize nustatyta, jog beveik visi mėginiai gauti vienfaziai. Tik mėginyje su 16 molinių procentų europio (III) nustatyta α -bario metaborato priemaiša. Naudojantis gautomis rentgeno spindulių difraktogramomis buvo atlikti Rytveldo (Rietveld) metodo skaičiavimai.

Optinės legiruotų mėginių savybės buvo nustatytos matuojant spektrofluorimetru. Gauti mėginiai pasižymėjo europio (III) jonams būdinga liuminescencija. Intensyviausia emisija užfiksuota ties 611 nm bangos ilgiu (sužadinus 393 nm bangos ilgio šviesa). Dvivalenčiu europio legiruoti mėginiai nepasižymėjo jiems paprastai būdingomis plačiomis emisijos smailėmis, todėl galima teigti, kad nepavyko suredukuoti europio iki dvivalenčio būvio.

12

QM/MD study of structure and NMR spectra of tetrapeptide in aqueous ionic liquid mixtures

Amina Elkady¹, Žyginta Murnikova²

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

² *Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University*

Ionic liquids (ILs) have been known as “green” and biocompatible solvents for quite some time and their possible biological uses include making molecules permeate more easily through membranes, changing catalytic activity of enzymes, as well as stabilizing or destabilizing various proteins (Gomes et al., 2019). The nature of the interactions between ILs and proteins varies and is difficult to evaluate. Therefore, smaller peptides with amino acid sequences common in proteins are often used as model systems to discover how different ILs interact with these peptides and change their structure in aqueous solution. Nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy is the best method for identifying both intermolecular interactions and intramolecular structural changes, since the chemical shifts of atoms, particularly hydrogen, are highly sensitive to changes in the local environment of the peptide.

In this work, trans- and cis- Ala-Asp-Pro-Phe tetrapeptides were investigated using molecular dynamics (MD) simulations and quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) calculations in both aqueous environment and in IL/water mixture. Such systems were analysed experimentally using NMR methods before (Richardt et al., 2014), showing a difference of the peptide’s hydrogen atoms depending on its’ surroundings. The chosen ionic liquid [MMIM][DMP] constituted of 1,3-dimethylimidazolium and a common IL anion dimethyl phosphate. Computed chemical shift differences of atoms enabled us to evaluate various interactions present in peptide/IL/water systems. Meanwhile, trajectories from the MD simulations revealed structural changes in the peptide itself, as well as differences in its immediate surroundings.

Acknowledgement

This study was supported by the Research Council of Lithuania, grant no. S-MIP-22-74. Computations were performed on resources provided by the High-Performance Computing Center “HPC Saulėtekis” at Vilnius University, Lithuania.

13

Functionalization of calcium-deficient hydroxyapatite with bioactive propolis

Maab Elsheikh, Justina Karciauskaite, Inga Grigoraviciute, Zivile Stankeviciute, Aivaras Kareiva

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

Objectives: to fabricate and characterize calcium deficient hydroxyapatite [CDHA; $\text{Ca}_9(\text{HPO}_4)(\text{PO}_4)_5(\text{OH})$]-propolis composites and evaluate their antibacterial activity for their potential use in biomedical applications.

Methodology: A precipitation reaction was applied to synthesize CDHA composites. In brief, Di-ammonium hydrogen phosphate $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ and ammonia solution $\text{NH}_3(\text{aq.})$ were added to calcium nitrate tetrahydrate $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ solution to obtain a desirable Ca/P ratio and adjust pH of the reaction mixture, respectively. Commercialized propolis powder was incorporated during the synthesis at concentrations of 10, 7.5, 5, 2.5 and 0 %. The mixture was stirred at room temperature for 24 h, then solutions were filtered and the obtained precipitates were dried at 40°C . Finally, the dried powders were collected for further characterizations. X-ray diffraction (XRD) analysis was utilized to identify the phase composition. Fourier Infrared (FTIR) spectroscopy was employed to determine the functional groups in the composites containing propolis compound. Thermogravimetric (TG) analysis was used to investigate the thermal degradation of the samples. Scanning electron microscopy (SEM) was conducted to observe the morphology and structure. Furthermore, the Brunauer–Emmett–Teller (BET) method was applied to determine the specific surface area (S_{BET}) of the materials.

Results: XRD patterns confirmed the phase composition of CDHA in all samples. FTIR spectra of the CDHA and its composites showed bands corresponding to functional groups of organic compounds from propolis, indicating the successful incorporation of propolis. TG analysis showed higher thermal degradation when the propolis concentration increased, confirming the presence of larger propolis content. Moreover, the BET measurement exhibited a decrease in the S_{BET} in composites with increased propolis content, suggesting partial agglomeration and/or decreased porosity influenced by the presence of propolis during reaction. In conclusion, the incorporation of propolis in the CDHA was confirmed by the FTIR, the increased thermal degradation in the samples with higher propolis content, and decreased surface area. The obtained CDHA–propolis composites feature their potential to be used in medical applications as bioactive agents.

14

Influence of Ti^{4+} Substitution on Phase Composition and Structural Parameters of LAMOX Synthesized via an Aqueous Sol–Gel Method

Giedrė Gaidamavičienė, Jonas Labutis, Ugnė Vazgelevičiūtė, Artūras Žalga

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

Although the potential applications of oxygen-ion-conducting solid electrolytes have been recognized and developed for over 60 years, their practical relevance to energy conversion - particularly in galvanic cells, oxygen sensors, and high-temperature fuel cells - has only recently become significant. Traditional solid electrolytes, such as yttria-stabilized zirconia (YSZ), exhibit optimal ionic conductivity at high operating temperatures of 800–1000 °C. In contrast, gadolinium-stabilized ceria operates at significantly lower temperatures, typically between 600 °C and 800 °C. However, under these conditions, it suffers from mixed electronic and ionic conduction, as well as enhanced sensitivity to reducing environments. In this context, lanthanum molybdate ($\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$), commonly referred to as LAMOX, is an interesting candidate. The remarkable conductivity of oxygen ions at elevated temperatures was first reported just over 25 years ago. The main drawback of this double oxide system is a reversible phase transition in the 500–600 °C range, during which the low-temperature monoclinic $\alpha\text{-La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ crystalline phase transforms into a high-temperature, stable cubic modification that exhibits exceptionally high oxygen-ion conductivity. The high-temperature phase transition in the complex $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ system has been widely investigated by modifying the oxide system with various metallic dopants, thereby controlling the structural characteristics of the resulting ceramics.

In this work, the substitution of lanthanum by Ti^{4+} ions in the complex $\text{La}_{2-x}\text{Ti}_x\text{Mo}_2\text{O}_{9+x/2}$ oxide system was achieved for the first time using an environmentally friendly, cost-effective, and technologically simple aqueous sol-gel synthesis method. The ceramic synthesized at 1000 °C was characterized by X-ray diffraction (XRD), and the obtained diffraction patterns were analyzed in detail using the Rietveld refinement method. The results provided a quantitative evaluation of the phase composition, crystallite size, and lattice parameter as a function of the initial molar composition, facilitating the analysis and interpretation of the observed trends.

The results indicate that titanium ions have a significant effect on the amount of impurity phases in the ceramic mixture and promote a slight but clearly observable decrease in the concentrations of both the cubic and monoclinic crystalline phases.

15

Jūrinės karščio bangos pasauliniame kontekste – ką žinome apie Baltijos jūrą?

Gustė Gečaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Jūrinės karščio bangos (*JKB*) yra reikšmingas klimato kaitos rodiklis, leidžiantis įvertinti jūrų ir vandenynų šiluminio režimo pokyčius bei jų galimas pasekmes skirtingų regionų akvatorijose. *JKB* atskleidžia ne pavienius temperatūros svyravimus, bet ilgiau trunkančius ir stipresnius vandens šiluminės būklės įvykius, paveikiančius jūrų natūralius fizinius procesus ir ekosistemas. Dėl spartėjančios klimato kaitos jūrinės karščio bangos tampa vis dažnesnės ir ilgesnės, todėl jų tyrimai yra būtini siekiant suprasti tiek globalias, tiek regionines klimato kaitos tendencijas akvatorijose.

Tyrimo tikslas – įvertinti jūrinių karščio bangų tyrimų raidą ir metodologinius akcentus pasauliniu mastu bei Baltijos jūros regione. Tyrime taikyta kiekybinė mokslinių publikacijų santraukų analizė, naudojant „*Web of Science*“ duomenų bazę ir *KH Coder* tekstinės analizės programą: pasauliniam jūrinių karščio bangų tyrimų kontekstui nagrinėtos 2 721 publikacijos, Baltijos jūros regiono analizei atrinktos 407 mokslinių straipsnių santraukos. Analizuotas publikacijų pasiskirstymas pagal šalis ir regionus, taip pat sudaryti žodžių sutapties (*co-occurrence*) tinklai, leidžiantys identifikuoti dominuojančias tyrimų kryptis ir jų tarpusavio sąsajas.

Atlikta kiekybinė mokslinių publikacijų santraukų analizė leido įvertinti jūrinių karščio bangų tyrimų erdvinį pasiskirstymą pasauliniu mastu ir išryškinti pagrindines regionines tendencijas. *JKB* tyrimai pasižymi netolygiu pasiskirstymu, nes didžiausias mokslinis dėmesys buvo skiriamas didiesiems vandenynų baseinams ir regionams, kuriuose *JKB* pasireiškia dažniau ir intensyviau, pavyzdžiui, tropiniams ir subtropiniams Ramiojo vandenyno rajonams bei Pietų ir Rytų Kinijos jūroms. Didelė dalis mokslinių straipsnių yra susieti su Kinijos ir Jungtinių Amerikos Valstijų mokslo institucijomis. Teminė analizė atskleidė stiprų ryšį tarp *JKB* ir didelio masto klimato procesų, tokių kaip musoninė cirkuliacija ir El Niño-Pietų osciliacija (ENSO). Mažesni, tačiau klimato kaitai itin jautrūs regionai, tokie kaip pusiau uždaros jūros ir lagūnos, moksliniuose tyrimuose dažnai lieka periferijoje. Baltijos jūros regionas pasauliniame kontekste išlieka nepakankamai ištirtas, nes dauguma čia atliekamų tyrimų apsiriboja ilgalaikių vandens temperatūros tendencijų ir paviršinių procesų analize. Atliktas tyrimas atskleidė, kad jūrinių karščio bangų tyrimai regioniniu mastu ir vertikalioje vandens stovymėje yra būtini, siekiant išsamiau įvertinti klimato kaitos poveikį jautriausioms santykinai uždaroms jūrinėms sistemoms.

Aukso nanodalelėmis pagrįstos strategijos SARS-CoV-2 anti-RBD imuninio jutiklio jautrio didinimui

Agnė Giniūnaitė, Asta Kaušaitė-Minkštimienė

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

Nors COVID-19 prevencija ir kontrolė perėjo į popandeminę fazę, nuolatinė SARS-CoV-2 cirkuliacija bei ilgalaikės infekcijos pasekmės išryškina poreikį testuoti imuninio atsako stebėseną. Antikūnai prieš SARS-CoV-2 smaigalio baltymo receptorių surišantį domeną (anti-RBD) laikomi vienais svarbiausių biožymenų, leidžiančių įvertinti imunitetą, susiformavusį po persirgimo ar vakcinacijos. Tikslus anti-RBD antikūnų kiekio nustatymas suteikia vertingų įžvalgų apie natūraliai įgytą ir vakcinos sukeltą imuninį atsaką, sudarydamas galimybes objektyviau vertinti individualią imuninę būklę.

Paviršiaus plazmonų rezonanso (PPR) biologiniai jutikliai pasižymi galimybe realiuoju laiku stebėti antikūnų ir antigenų sąveikas bei leidžia greitai, jautriai ir atrankiai aptikti antikūnus biologiniuose mėginiuose. Tai užtikrina patikimą imuninio atsako vertinimą ir suteikia didelį potencialą jautriai serologinei analizei. Vis dėlto, siekiant sumažinti aptikimo ribas sudėtingose biologinėse terpėse, būtina toliau gerinti šių jutiklių analizes charakteristikas. Aukso nanodalelės (AuND) yra plačiai taikomos optinio signalo stiprinimui, todėl šio darbo tikslas buvo sukurti PPR imuninius jutiklius kiekybiniam anti-RBD antikūnų nustatymui, pasitelkiant AuND analizinio signalo stiprinimui ir analizės jautrio didinimui.

Sukurti du imuninių jutiklių variantai, taikant netiesioginį detekcijos formatą ir sluoksniuotą imunoanalizės metodą. Kuriant pirmąjį jutiklį, komerciškai įsigytos streptavidinu modifikuotos AuND buvo konjuguotos su biotinintais anti-IgG antikūnais, suformuojant anti-IgG_{biot}-SAv-AuND konjugatus. Kuriant antrąjį jutiklį, AuND buvo susintetintos Turkevich metodu, vėliau funkcionalizuotos mišriu 11-merkaptoundekano rūgšties ir 2-merkaptoetanolio savitvarkiu monosluoksniu bei modifikuotos 3-aminoborono rūgštimi, suformuojant AuND-11-MUR/2-MEA-3-ABR žymes. Atliekant analizę, anti-IgG_{biot}-SAv-AuND ir AuND-11-MUR/2-MEA-3-ABR buvo naudojamos analizinio signalo sustiprinimui antrajame biologinio atpažinimo etape, siekiant padidinti analizės jautrį.

Abu sukurti imuniniai jutikliai leido kiekybiškai nustatyti anti-RBD antikūnus skirtinguose koncentracijų intervaluose ir pasižymėjo geru signalo pakartojamumu, atkuriamumu bei stabilumu. Jutiklis, kurio analizinio signalo stiprinimui buvo naudoti anti-IgG_{biot}-SAv-AuND konjugatai, užtikrino jautrų aptikimą pikomolines–nanomolines koncentracijos diapazone. Tuo tarpu jutiklis, kuriuo atliekant analizę buvo naudotos AuND-11-MUR/2-MEA-3-ABR žymės, pasižymėjo dar didesniu jautriu ir sudarė galimybes nustatyti anti-RBD pikomolinių koncentracijų intervale. Abiejų jutiklių tinkamumas realių mėginių analizei buvo įvertintas tiriant kraujo serumo mėginius. Analizę atliekant priedo metodu, abu jutikliai pasižymėjo dideliu tikslumu. Gauti rezultatai patvirtina, kad sukurti PPR imuniniai jutikliai yra tinkami jautriam ir patikimam SARS-CoV-2 anti-RBD antikūnų kiekybiniam nustatymui biologiniuose mėginiuose.

4-((2-Benzimidazolil)tio)-6-izopropilrezorcinolių sintezė

Gabija Griškonytė, Ieva Žutautė, Algirdas Brukštus

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Pasaulyje vis daugėjant vėžinių susirgimų atvejų, šiluminio šoko baltymo Hsp90 slopikliai yra viena iš daug žadančių vėžio gydymo krypčių. Hsp90 yra eukariotuose aptinkamas molekulinis šaperonas, kuris gyvybiškai svarbus ląstelių ciklo reguliatorius, t. y. proliferacijos, signalo perdavimo ir transkripcijos. Esant nepalankiems aplinkos veiksniams, tokiems kaip aukšta temperatūra, hipoksija, ląstelės inicijuoja molekulinio šaperono ekspresiją ir taip stengiasi palaikyti dinaminę pusiausvyrą tarp baltymų sulankstymo ir skaidymo. Per didelę Hsp90 ekspresiją pastebėta vėžinėse ląstelėse. Dėl mutavusių klientinių baltymų, naviko ląstelės labiau pasikliauja Hsp90 nei sveikosios, todėl Hsp90 slopikliai yra geras būdas stabdant vėžio vystymąsi. Šio darbo metu siekiama susintetinti įvairiai pakeistus sieros atomą turinčius rezorcinolinius junginius, kurie galėtų veikti kaip Hsp90 slopikliai ir stabdyti vėžio progresavimą.

Tikslinių junginių sintezei pradiniu junginiu pasirinktas 1-(2,4-dihidroksifenil)etan-1-onas. Siekiant išvengti šalutinių reakcijų hidroksigrupės apsaugotos įvedant metoksigrupes. Toliau sekė karbonilo grupės modifikavimas, su ja atlikta Wittigo reakcija, kurios metu gautas 2,4-dimetoksi-1-(prop-1-en-2-il)benzenas, dvigubasis ryšys suredukuotas ir gauta izopropilo grupė. Norint įvesti pakaitus per sieros atomą į penktąją 1-izopropil-2,4-dimetoksibenzono padėtį pirmiau įvedama jodido grupė. Tuomet atliekama kryžminio sujungimo Ulmanno tipo reakcija su tioazaheterociklais. Paskutinėje stadijoje pašalintos apsauginės grupės ir gauti įvairūs rezorcinoliniai junginiai su sieros atomu.

Poli(pirolo-antranilo rūgšties) kopolimerų, sintetintų esant skirtingiems amonio peroksosulfato ir monomerų santykiams, struktūrinė ir morfologinė analizė

Amelia Hendik¹, Justina Gaidukevič^{1,2}

¹*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

²*Fizinių ir technologijos mokslų centras*

Laidieji polimerai (CP) - tai medžiagos, pasižyminčios metalams ar puslaidininkiams būdingomis elektrinėmis savybėmis, struktūriniu universalumu bei geromis modifikavimo galimybėmis. Mokslinėje literatūroje daug dėmesio skiriama poli(pirolo) (PPy) tyrimams, nes šiam homopolimerui būdingas didelis laidumas, atsparumas aplinkos poveikiui ir paprasta sintezė, todėl jis yra plačiai taikomas elektrochemijos srityje. Tuo tarpu poli(antranilo rūgštis) (AA) vertinama dėl gero tirpumo ir stabilaus elektroaktyvumo neutraliose ir šarminėse terpėse. Karboksilo grupė polimero struktūroje suteikia papildomą cheminį funkcionalumą, dėl ko AA taikoma (bio)sensorių ir atminties įrenginių gamyboje bei apsaugai nuo korozijos. Šių medžiagų ir iš jų sintetintų kopolimerų struktūra ir savybės tiesiogiai priklauso nuo sintezės sąlygų, ypač nuo pasirinkto oksidatoriaus tipo ir jo kiekio cheminės oksidacinės polimerizacijos metu. Pavyzdžiui, oksidatoriaus amonio peroksosulfato (APS) kiekis yra esminis veiksnys, lemiantis polimero grandinių augimą, oksidacijos laipsnį ir morfologiją.

Šio darbo tikslas - ištirti oksidatoriaus ir monomerų santykio įtaką poli(pirolo-antranilo rūgšties) (PPy-AA) kopolimerų struktūrinėms ir morfologinėms savybėms. Monomerų santykis buvo išlaikytas pastovus (pirolas:antranilo rūgštis = 3:1), keičiant APS kiekį. Susintetintų PPy-AA kopolimerų struktūra ir morfologija analizuota naudojant skenuojančiąją elektroninę mikroskopiją (SEM), energijos dispersinę rentgeno spindulių spektroskopiją (EDX), Ramano sklaidos ir Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių (FTIR) spektroskopijas.

SEM analizė parodė, kad gauti kopolimerai pasižymi granuliuota, sferine morfologija, o didėjant APS santykiui formuojasi mažesnės, tačiau labiau linkusios aglomeruotis dalelės. Elementinės analizės, Ramano sklaidos ir FTIR spektrų rezultatai patvirtino kopolimerų oksidacijos laipsnio ir konjugacijos pokyčius, susijusius su delokalizotos π elektronų sistemos pakitimais. Nustatyta, kad perteklinis APS kiekis skatina intensyvesnę pirolo žiedų oksidaciją ir dalinę polimerinių grandinių degradaciją. Gauti rezultatai leidžia daryti išvadą, kad APS ir monomerų santykis turi esminę įtaką PPy-AA kopolimerų struktūrinėms ir morfologinėms savybėms bei leidžia optimizuoti sintezės sąlygas siekiant geresnio medžiagų funkcionalumo.

19

Molecularly imprinted conducting polymer for macromolecular sensing

Artem Yerniazov¹, Sarunas Zukauskas¹, Alma Rucinskiene², Arunas Ramanavicius^{1,3}

¹*Centre for Physical Sciences and Technology, Department of Nanotechnology*

²*Centre for Physical Sciences and Technology, Department of Electrochemical Material Science*

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

Molecularly imprinted polymer (MIP) for the detection of 50–100 kDa macromolecules, such as bovine serum albumin (BSA), is a low-cost alternative with long shelf-life to biosensors of this analytical range. An overoxidized polypyrrole (PPy) nanofilm-based impedometric MIP deposited on a glassy carbon electrode (GCE) was employed as a model system.

Chronoamperometric polymerisation kinetically immobilises the monomer–template complex on the electrode's surface by freezing the equilibrium between adsorption and desorption. Following proteolytic extraction of the template, complementary cavities remain within the polymer interface and serve as recognition elements.

Before the Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) measurement, the DC bias or open-circuit potential (OCP) is measured as such, where no significant faradaic processes are driven. The sinusoidal amplitude of the EIS input signal is 5mV above the measured OCP. The main advantage of the EIS is that it uses minimal signal perturbation, which minimises electrochemically induced polymer changes compared to wide-potential window techniques such as CV, pulse voltammetry and chrono methods. Signal transduction is governed by a positive gate effect arising from an increase in charge-transfer resistance (R_{ct}) of the polymer. Non-Faradaic sensing was additionally investigated in a low-ionic-strength electrolyte.

Analytical performance was assessed through concentration-dependent calibration plots. In addition, binding kinetics studies revealed pseudo-first-order behaviour. The behaviour is consistent with surface-controlled association under excess analyte conditions, which is characteristic of nanofilm-based MIPs.

Temperatūros pasiskirstymas lydale β -BaB₂O₄ monokristalų auginimo metu

Gabija Janušauskaitė^{1,2}, Martynas Misevičius^{1,2}

¹ Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras

² Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

β -BaB₂O₄ (BBO) monokristalai plačiai taikomi netiesinės optikos srityje, tačiau jų auginimas aukštatemperatūrių tirpalų (Top-Seeded Solution Growth – TSSG) metodu reikalauja itin tikslios terminės aplinkos kontrolės. Temperatūros pasiskirstymas lydale daro reikšmingą įtaką proceso stabilumui, kristalo augimui ir rezultatų pakartojamumui. Šiame darbe sistemiškai tiriami vertikalūs ir radialiniai temperatūros gradientai lydale, keičiant krosnies dangčio geometriją.

Eksperimentams paruoštas 20:80 mol.% Na₂O:BBO sudėties lydalas iš Na₂CO₃, BaCO₃ ir H₃BO₃. Temperatūros pasiskirstymo lydale matavimai atlikti esant 15 °C aukštesnei temperatūrai už kristalizacijos temperatūrą (~925 °C). β -BaB₂O₄ monokristalai auginti individualiai suprojektuotoje dviejų zonų krosnyje, naudojant 60 mm skersmens platininį tiglj. Vertikalūs matavimai atlikti nuo maždaug 2 cm virš lydalo paviršiaus iki tiglio dugno, o radialiniai – daugiausia ties lydalo paviršiumi, dalį matavimų atliekant ir gilesniuose lydalo sluoksniuose. Tirti dangčiai su 8,5–35 mm skersmens centrinėmis skylėmis.

Nustatyta, kad dangčio centrinės skylės skersmuo reikšmingai veikia temperatūros gradientų dydį lydale. Didinant skylės skersmenį nuo 8,5 mm iki 35 mm, vertikalūs temperatūros gradientai padidėjo nuo ~20 °C iki ~37 °C, o radialiniai – nuo ~14 °C iki ~25 °C. Parametras X, apibūdinamas kaip gylis, kuriame lydalo centre temperatūra sutampa su radialinio matavimo metu lydalo paviršiuje užfiksuota temperatūra, kito nuo –20 mm iki –6 mm, rodydamas ryškius temperatūros lauko pokyčius lydalo tūryje.

Gauti duomenys leidžia įvertinti šiluminio lauko valdymo galimybes tirpalo augimo sistemose ir parodo krosnies dangčio geometrijos svarbą temperatūros gradientų kontrolei. Tai sudaro prielaidas kryptingam terminės aplinkos optimizavimui ir patikimesniam β -BaB₂O₄ monokristalų auginimui TSSG metodu.

Modeling the Epoxidation Kinetics of Vegetable Oils via ANN-Integrated FT-IR Spectroscopy

Jūratė Jonikaitė-Švėgždienė, Daniel Novikovas

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

Driven by the growing demand for bio-based compounds as a sustainable alternative for synthesizing biodegradable and various other polymers, vegetable oils (VO) are increasingly recognized as a highly promising feedstock. The structural basis of VOs consists of triglycerides, whose chemical behavior is determined by their constituent fatty acids. Oxirane moieties are incorporated into the fatty acid chains via a peroxyacid-mediated epoxidation of the VO's double bonds. These epoxy groups significantly enhance molecular reactivity, enabling further chemical functionalization or the synthesis of polymers through polyaddition.

This study investigated the epoxidation kinetics of sunflower and waste cooking oils (WCO) via a homogeneous in situ process mediated by performic acid. The reaction was conducted over a 6 hours, with samples systematically collected every 30 minutes to monitor the progression of the chemical transformation. The final resulting modified oils attained an average epoxy content of 0.42 mol/100 g, representing a relative oxirane yield of approximately 84 mol%.

Beyond process characterization, the research sought to validate FT-IR spectroscopy combined with mathematical modeling as a more efficient, green alternative to conventional titrimetry. To ensure analytical reliability, the titrimetric data were directly compared with the results derived from the FT-IR spectra and mathematical models. This comparative analysis focused on the consumption of double bonds (3060–2992 cm^{-1}) and the concurrent formation of oxirane functionalities (860–800 cm^{-1}).

Predictive mathematical models were established using Partial Least Squares (PLS) regression and Artificial Neural Networks (ANN). The results demonstrated that while both mathematical modeling approaches provided accurate estimations of IV and EV, the ANN architecture exhibited higher precision, particularly during the advanced stages of the reaction (beyond 60 min). When benchmarked against conventional titration, the ANN model yielded significantly lower error margins (0.47 %–2.91 %) compared to the PLS method (0.97 %–4.74 %). These findings confirm that FT-IR data processing via ANN offers a highly reliable, rapid, and solvent-free methodology for monitoring epoxidation kinetics, effectively supporting the transition toward more sustainable analytical practices in polymer science.

Kompaktiškų cinko oksido dangų sintezė naudojant zolių-gelių metodą

Gintautas Jonkus, Vidas Pakštas, Rokas Kondrotas

Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras

Šiais laikais puslaidininkų technologijos yra naudojamos bene visur – nuo šviestukų (LED), tranzistorių iki saulės elementų. Cinko oksidas yra viena iš plačiausiai naudojamų medžiagų optoelektronikoje dėl jo skaidrumo, draustinės juostos pločio (3.4 eV) bei lengvos galimybės legiruoti ar sudaryti $Zn_xMg_{1-x}O$, $Zn_xCd_{1-x}O$ lydinius taip kontroliuojant sluoksnio elektrinį laidumą bei draustinės juostos plotį.

Cinko oksido dangų sintezė buvo vykdoma naudojant zolių-gelių sukamojo dengimo metodą. Lyginant su kitais cinko oksido sintezės būdais, zolių-gelių metodas reikalauja mažiau investicijų ir yra lengviau taikomas. Tačiau naudojant sukamąjį dengimą yra gaunamos porėtos dangos bei dėl proceso ypatumų susidaro netolygus dangos storis: storiausias sluoksnis formuojasi lašo nukritimo vietoje, o ploniausias – kraštuose, tad esant mažam dangos storiui danga gali būti neištįsinė. Mūsų darbo tikslas – ištirti greito atkaitinimo sintezę, bei gauti tankesnes ir kokybiškesnes cinko oksido dangas naudojant zolių-gelių metodą.

Mūsų darbe buvo tirta džiovavimo ir atkaitinimo sintezės dalių įtaka cinko oksido dangų morfologijai, kristalinei struktūrai ir sluoksnių storiams. Dangų struktūrinės savybės buvo išmatuotos taikant struktūrinės analizės metodus – skenuojančiąją elektronų mikroskopiją (SEM) ir rentgeno spindulių difrakciją (XRD). Buvo nustatyta, jog vadovaujantis įprastine ZnO zolių-gelių sintezės tvarka, dangos nors iš paviršiaus morfologijos atrodė pakankamai tankios, tūryje buvo porėtos. Porėtumo laipsnis šiek tiek priklausė nuo naudojamos tirpalo koncentracijos ir nuo iškaitinimo temperatūros. Žemesnėje temperatūroje iškaitintos dangos buvo mažiau porėtos. Tačiau analizė parodė, kad mėginių sintetintų be džiovavimo dalies storis yra daugiau nei 2 kartus mažesnis lyginant su mėginiais džiovintais 200°C, oro atmosferoje. Morfologijos tyrimai taip pat atskleidė, kad dangos porėtumas buvo ženkliai mažesnis lyginant su dangomis suformuotomis naudojant džiovavimo etapą.

Preliminarūs rezultatai rodo, kad dangos kokybė tankumo (porėtumo) atžvilgiu, gali būti pagerinta panaudojant greitą kristalizacijos eigą ir apeinant džiovavimo žingsnį. Tikimasi, kad tokiu būdu suformuotos ZnO dangos pagerins p-n heterosandūros kokybę.

Synthesis of new AOH1996 and indazoleethylamines conjugates for development of targeted cancer therapy

Simona Jonušienė¹, Dovydas Garuckas¹, Mantas Jonušis², Denis Sokol¹

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

² Vilnius University, Life Sciences Center, Institute of Biochemistry

Indazoles are nitrogen-containing heterocycles present in numerous marketed drugs and clinical candidates that display broad pharmacological activities, including potent anticancer effects. AOH1996 - *N*-(2-((2-(3-methoxyphenoxy)phenyl)amino)-2-oxoethyl)-1-naphthamide is a first-in-class small-molecule inhibitor of a cancer-associated proliferating cell nuclear antigen (PCNA) isoform that exploits transcription-replication conflict as a selective vulnerability in tumor cells, showing cytotoxic, anti-metastatic, and immunomodulatory effects. Motivated by the combination of indazole's medicinal relevance and the emergence of AOH1996 as a clinically advanced caPCNA inhibitor, this work focuses on improving the synthesis of 2-(1*H*-indazol-3-yl)ethan-1-amine derivatives and integrating AOH1996 fragment to generate putative PCNA-targeting anticancer agents. An efficient, inexpensive, and scalable Henry reaction based route was developed to access 2-(5-substituted-1*H*-indazol-3-yl)ethanamines starting from 5-substituted 1*H*-indazole-3-carbaldehydes obtained via nitrosative indole-to-indazole ring transformation, followed by ammonium-acetate-catalyzed nitroaldol condensation with nitromethane and lithium aluminium hydride reduction. The resulting amines were converted to fumarate salts and subsequently coupled with 2-chloro-*N*-(2-(3-methoxyphenoxy)phenyl)acetamide, previously prepared by our group developed protocol, to furnish a series of 2-((2-(5-substituted-1*H*-indazol-3-yl)ethyl)amino)-*N*-(2-(3-methoxyphenoxy)phenyl)acetamides incorporating an AOH1996 fragment. To conclude, our group has improved efficient synthesis method for 2-(1*H*-indazol-3-yl)ethan-1-amine derivatives and created a series of compounds containing AOH1996 and an indazole ring fragment.

Modifikuotų chitozano junginių sintezė ir jų pritaikymas prailginti sezoninių uogų galiojimo laiką

Viktorija Juščenko, Tatjana Kavleiskaja

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Maisto galiojimo laiko prailginimas yra vienas pagrindinių šiuolaikinės maisto pramonės iššūkių, susijusių su maisto kokybės išsaugojimu ir atliekų mažinimu. Siekiant sulėtinti oksidacinius procesus, kontroliuoti maisto toksines infekcijas ir patenkinti vis didėjančių vartotojų poreikį saugiams ir tvariams maisto konservavimo būdams, kuriamos naujos maisto pakuočių ir dangų technologijos. Šiems uždaviniams įgyvendinti naudojamos medžiagos, pasižyminčios antioksidacinėmis ir antibakterinėmis savybėmis. Viena iš krypčių, skirtų apsaugoti uogas nuo greito irimo, tai jas dengti modifikuoto chitozano sluoksniu.

Atlikto darbo tikslas buvo susintetinti vandenyje tirpius chito-oligosacharidus (Chit), kvaternizuotus chitozano (QCh) ir chito-oligosacharidus (QChit) darinius su chloridu ir askorbatu priešjoniais ir ištirti jų visų, kaip apsauginės uogų dangos, taikymo perspektyvas. Chito-oligosacharidai (Chit) buvo gauti rūgštine hidrolize, produktus gryninant dializės būdu arba preparativine molekulinį sietų chromatografija naudojant sorbentą *Sephadex G-15*. Analitinės molekulinį sietų chromatografijos rezultatai parodė, kad gautų chito-oligosacharidų molekulinė masė svyravo nuo 0,5 iki 10,7 kDa. Chitozano ir chito-oligosacharidų kvaternizavimas atliktas naudojant glicidiltrimetilamonio chloridą. Kvaternizavimo reakcija ir priešjono pakeitimas buvo patvirtinti FT-IR ir ^1H BMR spektroskopiniais tyrimais. Kvaternizuotų junginių ^1H BMR spektre ties 3,37 ir 3,14 m.d. stebimos naujos metileno ir trimetilamonio grupių smailės, taip pat metileno protonų smailės šalia $-\text{NH}-$ grupės ties 2,91–2,76 m.d. Kvaternizavimo chitozano chloridų laipsniai, apskaičiuoti iš ^1H BMR spektrų, siekė 3. Kvaternizuotų chitozano ir chito-oligosacharidų FT-IR spektruose nustatytas absorbcijos juostos ties 1560 cm^{-1} intensyvumo sumažėjimas ir identifikuota papildoma virpesių juosta ties $\sim 1475\text{ cm}^{-1}$, priskiriama ketvirtinės amonio grupės $\text{C}-\text{H}$ deformaciniais virpesiais, patvirtina sėkmingą junginių kvaternizaciją. Chito-oligosacharidų ir kvaternizuoto chitozano askorbatų ^1H BMR spektruose atsiranda naujos ties 4,47, 3,98 ir 3,70 m.d. smailės, o FT-IR spektruose naujos absorbcijos juostos ties $1720\text{--}1730\text{ cm}^{-1}$ ir $\sim 755\text{ cm}^{-1}$, rodančios askorbato anijono įsijungimą. Chito-oligosacharidų, QChit ir QCh antioksidacinis aktyvumas įvertintas naudojant 1,1-difenil-2-pikrilhidrazilio (DPPH•) radikalus ir geležies (III) jonų redukcijos antioksidacinės galios nustatymo metodu. Nustatyta, kad didžiausias antioksidacinis aktyvumas priklauso kvaternizuoto chitozano askorbatui ($\sim 80\%$) ir 5,5 kDa chito-oligosacharido askorbatui ($\sim 75\%$).

Galiausiai chitosano darinių dangų apsauginis poveikis uogų (aviečių ir šilauogių) kokybei ir galiojimo laikui buvo vertintas matuojant uogų masės pokyčius bei stebint vizualinius pokyčius fotografijant produktus per eksperimento laikotarpį. Uogų, dengtų modifikuotais chitozano junginiais, išvaizdos, taip pat drėgmės netekimo dinamika ir chitozano darinių antioksidacinio aktyvumo vertės neparodė priklausomybės. Bet visgi chitozano arba chito-oligosacharidų danga sustabdo uogų drėgmės praradimą laikymo metu.

(Imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)fenolių sintezė ir modifikavimas**Fausta Kairytė, Ieva Žutautė***Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

Amiloidozė yra bendras terminas, apibūdinantis ligas, kurios vystosi kai organizme padidėja baltymų, praradusių savo funkciją dėl pakitusios antrinės struktūros, kiekio organizme. Tokie baltymai atsiranda jiems netaisyklingai susilankstant arba skylančiam į atskirus, netaisyklingus fragmentus, kurie jungiasi tarpusavyje ir sudaro netirpią, stabilią betafibrilinę struktūrą. Amiloidais vadinami susidarę šių struktūrų agregatai. Tokie dariniai yra atsparūs fermentams, tokiems kaip peptidazėms, kurių funkcija yra skaidyti baltymus. Sutrikus šiam procesui, pradeda vystytis sisteminės bei lokalizuotos amiloidozės formos, kurios sukelia neurodegeneracines ligas, tokias kaip Parkinsono ir Alzheimerio ligos, lokalizuotas smegenyse. Įvairių mokslinių tyrimų metu buvo pastebėta, jog mažamolekulinius heterociklinius fragmentus turintys junginiai geba slopinti amiloidinių agregatų susidarymą organizme.

Šio darbo tikslas - praplėsti junginių imtį, kurie pasižymėtų amiloidinių agregatų moduliatorių savybėmis. Todėl pagrindinis šio darbo uždavinys susintetinti (imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)fenolius, turinčius heterociklinį fragmentą skirtingose padėtyse, ir juos modifikuoti. Pradiniais junginiais pasirinkti 2-jod ir 4-jodfenoliai. Dėl reaktingumo hidroksigrupės buvo modifikuotos pirmajame žingsnyje. Toliau sekė trigubo ryšio prijungimas ir įvestos propargilbromido grupės pakeitimas tioimidazolo fragmentais. Atlikus auksu katalizuojamą ciklizacijos reakciją, išskirti tiksliniai (imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)fenoliai 1 ir 2, kurių atitinkamos hidroksigrupės toliau modifikuojamos iki tikslinių amidų, esterių bei eterių tolimesniems amiloidinių baltymų agregacijos tyrimams.

Bridging Molecular Targeting and Analytical Sensing with Polydopamine-Based Imprinted Sensors for Tetracycline Detection

Danish Khalid¹, Ernestas Brazys^{1,2}, Vilma Ratautaitė², Arūnas Ramanavičius^{1,2}

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

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

Molecularly imprinted polymers (MIPs) are purpose-built polymers featuring specific molecular recognition sites. The integration of MIPs as a recognition element, combined with a portable screen-printed electrode (SPE) as an electrochemical transducer, offers a practical strategy for routine environmental analysis (Ayankojo et al., 2020). Tetracycline (TC) is a principal class of antibiotics, used in veterinary medicine, in human clinical therapy, and as an additive in animal feed. Because of its extensive use, TC has attracted significant attention, as it poses notable ecological and human health risks. Consequently, accurate detection of tetracycline is highly significant for pharmaceutical quality control, food safety, and environmental monitoring. Traditional techniques for TC detection present certain drawbacks, such as complicated operation, expensive instrumentation, and time-consuming protocols (Cheng et al., 2024). Therefore, a combination of MIP-based platforms with portable electrochemical systems offers a valuable approach for selective, sensitive, and rapid analysis of tetracycline residues in complex systems.

In this work, a MIP-based sensor was prepared for the selective determination of tetracycline, using dopamine hydrochloride as the functional monomer and tetracycline as the template, thereby generating recognition sites complementary to the target's molecular structure. MIP fabrication was performed via drop-casting of polydopamine nanoparticles synthesized via auto-oxidation of dopamine hydrochloride in tris buffer (pH 8.5) and electrochemical polymerization via cyclic voltammetry in phosphate-buffered saline (PBS, pH 7.4), with TC. Non-imprinted polymers (NIPs) were prepared using the same procedure but without a template and served as controls. Template removal was performed by solvent washing with an ethanol-acetic acid mixture (9:1, v/v). Rebinding studies using electrochemical techniques, including cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy, confirmed that MIPs exhibited enhanced sensitivity and selectivity for tetracycline compared with NIPs, demonstrating the system's potential for tetracycline detection.

References

Ayankojo, A. G., Reut, J., Ciocan, V., Öpik, A., & Syritski, V. (2019). Molecularly imprinted polymer-based sensor for electrochemical detection of erythromycin. *Talanta*, 209, 120502.

Cheng, Q., Abdiryim, T., Jamal, R., Liu, X., Liu, F., Xue, C., Tang, X., Chen, J., & Wei, J. (2024). Detection of tetracycline by molecularly imprinted electrochemical sensor based on the modification of poly(3,4-propylene dioxythiophene)/chitosan/au. *International Journal of Biological Macromolecules*, 281(Pt3), 136468.

Influence of Polyaniline on Conductivity and Drug Release from Alginate-Based Hydrogels

Shahbaz Khan, Šarūnas Žukauskas

Department of Nanotechnology, Center for Physical Sciences and Technologies

Sodium alginate-based hydrogels are used in studies for drug delivery application due to their biocompatibility and the ability to hold high water content. However, sodium alginate lacks electrical conductivity which limits its use in electroactive environments. In this study composite containing sodium alginate and PANI was fabricated to study the electrical conductivity and drug release behavior. Polyaniline was incorporated into sodium alginate via in situ polymerization of aniline using ammonium persulfate as oxidizing agent and was crosslinked by calcium ions by using calcium chloride as crosslinker. Methylene blue was used as drug model to evaluate the release behavior from the hydrogel. Release study in phosphate buffered saline showed that the release of methylene blue was dependent on dye concentration as with the low concentration of methylene blue negligible amount of the dye was released due to electrostatic and π - π interactions within the dense composite network. While with increased dye concentration it showed diffusion controlled sustained release, fitting Higuchi model $R^2 \approx 95$ over 48 hrs. Electrical conductivity was checked by using four probe method which confirmed that the conductivity increased significantly with higher PANI content, rising by over two orders from the low PANI concentrations. Results demonstrate that polyaniline plays a critical role in governing the conductivity and passive drug release behavior in alginate-based hydrogels highlighting their importance in alginate-based hydrogel systems. The increase in electrical conductivity suggests that the system could serve as a promising system for controlled release upon further optimization.

Molecularly Imprinted Conducting Polymer–Hydrogel Composites for Tetracycline Loading and Electro-Responsive Drug Delivery

Samuel A. Kosoko^{1,2}, Ernestas Brazys^{1,2}, Vilma Ratautaite², Arūnas Ramanavičius^{1,2}

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

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

Precise, on-demand drug delivery remains a critical challenge in modern therapeutics, particularly for localized treatments requiring high loading efficiency and spatiotemporal control. Electronic drug delivery systems (EDDS) based on electroactive materials offer programmable release profiles; however, their practical application is often limited by insufficient drug loading capacity and poor mechanical compliance. In this work, we report the development of a molecularly imprinted conducting polymer–hydrogel composite designed to address these limitations and enable electrically tunable drug delivery. Polypyrrole (PPy) was incorporated at varying concentrations (0–2%) into a hydrogel matrix, with molecular imprinting introduced to enhance selective tetracycline recognition. Drug loading was quantified using UV–Vis spectroscopy at 360 nm, while swelling behaviour was evaluated to elucidate structure–property relationships. The composites exhibited reproducible tetracycline adsorption, with loading strongly dependent on PPy content. A low PPy concentration (0.2%) produced the highest adsorption capacity ($\approx 381 \mu\text{g g}^{-1}$), attributed to enhanced π – π and electrostatic interactions between tetracycline and the conducting polymer. In contrast, higher PPy contents ($\geq 0.4\%$) resulted in reduced drug loading, correlating with decreased swelling ratios and increased network rigidity. Swelling systematically decreased from 84.1% for the PPy-free hydrogel to 71.3% at 2% PPy, highlighting the trade-off between binding selectivity and hydrogel permeability. These results demonstrate that careful optimization of conducting polymer content is essential to maximize drug loading while maintaining favourable hydrogel swelling properties. The presented molecularly imprinted PPy–hydrogel platform shows strong potential for integration into electroceutical systems, enabling high drug loading combined with electrically controlled, on-demand release.

Amperometrinis gliukozės biologinis jutiklis 5-amin-1,10-fenantrolino, aukso nanodalelių ir gliukozės oksidazės pagrindu

Aistė Krikštaponytė, Katažyna Blaževič, Anton Popov, Almira Ramanavičienė, Asta Kaušaitė-Minkštimienė

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

Cukrinis diabetas – tai liga, kurią sukelia angliavandenių apykaitos sutrikimai, lemiantys gliukozės kiekio kraujyje padidėjimą. Nekontrnuojama ir negydoma ši liga gali išsivystyti iki rimtų komplikacijų ar net mirties. Todėl, norint suvaldyti diabetą, labai svarbu yra stebėti gliukozės koncentraciją kraujyje. Gliukozės kiekiui nustatyti yra daugybė būdų, tačiau vienas iš dažniausiai naudojamų, dėl savo itin paprasto veikimo principo, yra amperometriniai biologiniai jutikliai. Šiuose jutikliuose dažniausiai naudojamas fermentas – tai gliukozės oksidazė, kuri yra atranki gliukozei, lengvai išgryninama ir nebrangi.

Šiame darbe buvo sukurtas bereagentis amperometrinis gliukozės biologinis jutiklis. Indikatorinis jutiklio elektrodas buvo ruošiamas ant grafito strypelio paviršiaus sluoksnis po sluoksnio absorbuojant 5-amin-1,10-fenantroliną, aukso nanodaleles ir gliukozės oksidazę. Po to fermento molekulės buvo chemiškai sujungtos skersiniais ryšiais glutaro aldehido garais. Tokioje konstrukcijoje 5-amin-1,10-fenantrolinas veikė kaip redokso mediatorius, užtikrinantis efektyvią elektronų pernašą, o aukso nanodalelės stiprino analizinį signalą. Siekiant užtikrinti optimalų jutiklio veikimą buvo optimizuojamos elektrodo paruošimo bei veikimo sąlygos. Taip pat buvo ištirtos pagrindinės analitinės charakteristikos.

Sukurtas biologinis jutiklis pasižymėjo plačiu tiesiniu diapazonu, žemomis aptikimo ir nustatymo ribomis, dideliu pakartojamumu ir priimtiniu atkuriamumu, taip pat puikiu atrankumu gliukozei bei patenkinamu saugojimo stabilumu bei atsparumu urino ir askorbo rūgščių interferencijai. Šios savybės rodo, kad sukurtas biologinis jutiklis yra tinkamas rutininiams ir sveikatos priežiūros įstaigose atliekamam gliukozės koncentracijos nustatymui. Be to, biologinio jutiklio konstrukcija pasižymi universalumu ir gali būti pritaikoma kitų kliniškai ar aplinkos požįūri svarbių analičių nustatymui, taip atskleidžiant jos potencialą platesniam analitiniam taikymui.

Padėka

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

Vakarų Lietuvos (Rietavo-1 gręžinio) ordoviko uolienų chemostratigrafija

Donatas Kudžma¹, Anna Cichon-Pupienis², Leho Ainsaar³, Tõnu Meidla³, Sigitas Radzevičius¹

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Gamtos tyrimų centras

³Tartu universiteto Ekologijos ir Žemės mokslų institutas

Chemostratigrafija – geologijos disciplina, kuria tiriama cheminių elementų ir izotopų reikšmės ir tendencijos geologiniuose pjūviuose. Nepaisant to, kad chemostratigrafija nėra oficialiai pripažintas stratigrafijos padalinys, šie tyrimai yra labai geras pagalbinis įrankis uolienų storymių padalijimui ir jų koreliacijai. Šiuo tyrimu siekiama apibūdinti stabilių anglies izotopų ($\delta^{13}\text{C}$) ordoviko chemostratigrafiją Rietavo-1 gręžinyje (Vakarų Lietuva). Naujai surinkta medžiaga yra iš Rietavo-1 gręžinio, kuris yra išgręžtas Vakarų Lietuvoje, mėginiai surinkti iš ordoviko ir apatinio silūro sluoksnio. Jie imti vidutiniškai kas 1 metrą, apatinėje pjūvio dalyje mėginius imant tankiau, kas 0,5 metro. Tirtas pjūvis sudarytas iš mišrios sudėties karbonatinės – siliciklastinės sudėties uolienų (daugiausiai klintis ir mergeliai). Anglies izotopinei analizei buvo paruošta daugiau nei 120 mėginių (naudojant grūstuvę uolienos sutrintos į pudrą). Mėginiai analizuoti Tartu universitete, Geologijos katedroje.

Atlikus izotopų analizę viduriniame ir viršutiniame ordovike išskirtos 7 teigiamos anomalijos ir 1 neigiama. Išskirtos šios teigiamos anomalijos pjūvyje: vidurio Darivilio (*angl. Middle Darriwilian Isotopic Carbon Excursion* (MDICE)), kuri nustatyta Segerstad svitoje, Gutenbergo anomalija (*angl. Guttenberg Isotopic Carbon Excursion* (GICE)), kuri nustatyta Blidene svitoje, Rakverės (vidurinėje Mossen svitos dalyje), Saunjos (viršutinėje Mõntu svitos dalyje ir Saunja svitoje), Moe (apatinėje Jonstorp svitos dalyje), Parovėjos (apatinėje Parovėjos svitos dalyje) ir Hirnančio (*angl. Hirnantian* (HICE)). Tarp MDICE ir GICE teigiamų anomalijų yra išskirta vienintelė neigiama anomalija vadinama apatinio Sandbio neigiama anomalija (*angl. Lower Sandbian Negative Isotope Carbon Excursion* (LSNICE)), kuri išskirta ties Dreimani ir Adze svitų riba. Pjūvyje ryškiausios Parovėjos ir HICE anomalijos. Parovėjos $\delta^{13}\text{C}$ ekskursijos metu reikšmės siekia beveik 2 ‰. HICE anomalija turi geriausiai išreikštą viršūnę, kur reikšmės siekia 4,2 ‰. Pagal izotopų kreivės formą išskiriama 17 Baltijos anglies izotopų zonų (BC) (*angl. Baltic Carbon*). Zonų išskyrimas buvo paremtas L. Ainsaar ir kt. (2010) įžvalgomis.

Chemostratigrafiniai tyrimai yra naudingas įrankis uolienų tyrimuose ypač derinant su kitais tyrimų metodais (biostratigrafiniais, litostratigrafiniais). Pagal gautus duomenis pavyko koreliuoti tirtą pjūvį su JAV ir Skandinavijos pjūviais ir Baltijos anglies izotopų zonų suskirstymą pritaikyti kituose ordoviko sedimentaciniuose baseinuose.

Literatūra

Ainsaar, L., Kaljo, D., Martma, T., Meidla, T., Männik, P., Nölvak, J. & Tinn, O. 2010. Middle and Upper Ordovician carbon isotope chemostratigraphy in Baltoscandia: a correlation standard and clues to environmental history. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, 294, 189–201.

Machine Learning Approaches for Linking Groundwater Level Changes and Hydrochemical Patterns

Assemzhan Kunsakova, Vytautas Samalavičius

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

Groundwater systems are influenced by both natural processes and human activities, making it important to understand how groundwater levels and water chemistry change together over time. This study examines the relationship between groundwater level dynamics and hydrochemical variability across Lithuania by combining long-term monitoring data with satellite observations and data-driven analysis methods. Groundwater level and chemical measurements collected between 2002 and 2024 were obtained from the Lithuanian Geological Survey and linked with terrestrial water storage anomalies derived from NASA's GRACE satellite mission.

To analyse these datasets consistently, a Python-based workflow was developed that integrated in situ monitoring records and satellite-derived information within a single analytical framework. The study focused on identifying hydrochemical indicators that respond most clearly to changes in groundwater levels. Chloride, calcium, and sulphate concentrations were selected as representative parameters based on hydrogeological understanding and preliminary data analysis. Regularized linear regression methods (LASSO and Ridge) were then applied to explore statistical relationships and estimate relative groundwater-level variability at a representative monitoring well.

The analysis revealed consistent links between fluctuations in groundwater levels and variations in the selected chemical parameters. Model results show moderate predictive performance, indicating that relatively simple linear models can capture an important part of short-term groundwater behaviour. Among the tested methods, LASSO regression produced slightly more stable results by limiting the influence of less informative variables.

The findings demonstrate that combining satellite gravimetry, national monitoring data, and machine learning techniques can provide additional insight into groundwater system dynamics. Such integrated approaches may support more informed groundwater assessment and contribute to sustainable management of water resources at the regional scale.

PDMS-Enhanced Polyester Networks for UV-Cured Thin Films Formation

Evaldas Kvietkauskas, Tatjana Kochanė, Saulutė Budrienė

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

Polyesters play a significant role in tissue engineering due to their favorable combination of biodegradability, biocompatibility, and adaptable mechanical properties (Middleton & Tipton, 2000; Woodruff & Hutmacher, 2010). In tissue engineering applications, three-dimensional scaffolds are required to mimic the extracellular matrix and provide structural and biochemical support for cell attachment, proliferation, and differentiation (O'Brien, 2011). Biodegradable polyesters are well suited for this application because their degradation rate can be adjusted to align with the pace of new tissue growth, enabling the scaffold to be gradually replaced by natural tissue (Middleton & Tipton, 2000). Additionally, the chemical structure of polyesters can be modified to improve properties such as elasticity, strength, porosity, and surface hydrophilicity, which are critical for successful cell–material interactions (Woodruff & Hutmacher, 2010). Owing to their versatility and processability into various forms, including porous scaffolds, films, and fibrous matrices, polyesters remain one of the most extensively studied and applied material classes in tissue engineering research (O'Brien, 2011).

In this study, a series of modified polyesters were synthesized via polycondensation of azelaic acid, maleic anhydride, diethylene glycol, PDMS, and malic acid. The chemical structure of the obtained polymers was confirmed using FT-IR and ¹H NMR spectroscopy. Thin films were produced by incorporating different crosslinking agents glycidyl methacrylate, butyl methacrylate, acrylamide, and N,N'-methylenebisacrylamide together with the photoinitiator 2,2-dimethoxy-2-phenylacetophenone, followed by UV induced curing. Mechanical performance was assessed by measuring Young's modulus and elongation at break. Mechanical properties were strongly dependent on the type of crosslinking agent used. Young's modulus ranged from 0.2 MPa to 170 MPa, while elongation at break varied from 0% to 190%. Contact angle measurements showed that the films exhibited lower contact angles (70° – 99°) compared to pure PDMS, indicating enhanced surface hydrophilicity. SEM analysis revealed smooth film surfaces with uniformly distributed silicon domains.

References

- Middleton, J. C., & Tipton, A. J. (2000). Synthetic biodegradable polymers as orthopedic devices. *Biomaterials*, 21(23), 2335–2346.
- O'Brien, F. J. (2011). Biomaterials & scaffolds for tissue engineering. *Materials Today*, 14(3), 88–95.
- Woodruff, M. A., & Hutmacher, D. W. (2010). The return of a forgotten polymer—Polycaprolactone in the 21st century. *Progress in Polymer Science*, 35(10), 1217–1256.

From Amorphous Calcium Phosphate to Magnesium Whitlockite: Governing Phase Selection by Solution Chemistry

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

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

Bone defects caused by trauma, disease, or surgery affect millions of people worldwide annually, promoting demand for bioactive ceramics that integrate seamlessly with host tissue, restoring structural integrity and biological function. Among calcium phosphate-based biomaterials, magnesium whitlockite (Mg-WH: $\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$) has emerged as a promising candidate in hard-tissue engineering research due to its excellent osteoconductive and bioresorbable properties. Implanted into the defective bone site, Mg-WH functions as a temporary scaffold that gradually resorbs and is gradually replaced by newly formed bone tissue. Moreover, it is known that magnesium ions released during degradation accelerate the healing process through cellular pathways. The combination of these properties makes Mg-WH an excellent candidate for hard tissue regeneration applications.

In this work, the solution mediated conversion of amorphous calcium phosphate into Mg-WH via a dissolution–precipitation method in buffer solution was investigated. Influence of phosphate buffer composition and added magnesium ion concentration on the final product was examined to identify optimal conditions for achieving single-phase Mg-WH. The selected conditions led to the successful production of a single-phase Mg-WH particles ranging in size of 100–300 nm. Purity of the synthesized product was verified by X-ray diffraction (XRD) accompanied with Rietveld refinement, Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and inductively coupled plasma optical emission spectroscopy (ICP-OES).

Lipidinių membranų modeliavimas su skirtingomis savitvarkio monosluoksnio sudėtimis ant fluoro legiruoto alavo oksido paviršiaus ir jų savybių tyrimas

Augustina Lipnevičiūtė¹, Narvydas Dėnas^{1, 2}, Aušra Valiūnienė^{1, 2}

¹*Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas*

²*Organinės chemijos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras*

Fosfolipidinė membrana yra svarbi biologinių sistemų dalis, užtikrinanti gyvų ląstelių apsaugą ir funkcijų reguliavimą. Dėl membranoms būdingo sudėtingumo, siekiant tirti jos pagrindinių struktūrinių komponentų – glicerolfosfolipidų – sąveikas su vaistais, toksinais ir baltymais, dažnai naudojami modelinių membranų dariniai. Šios modelinės membranos, ne tik atkartoja pagrindines fosfolipidinės membranos funkcijas, bet ir suteikia geresnę eksperimentinę kontrolę. Tokie modeliai gali būti formuojami ant elektrai laidžių kietų paviršių ir tiriama elektrocheminiais metodais. Šio darbo tikslas – ant fluoro legiruoto alavo oksido paviršiaus suformuoti dvisluoksnės lipidinės membranas, naudojant skirtingos sudėties savitvarkius monosluoksnius (SAM), bei ištirti suformuotų membranų elektrocheminių parametrų priklausomybę nuo naudoto SAM sudėties.

Eksperimento metu fosfolipidinės dvisluoksnės membranos (DSM) buvo konstruojamos ant FTO paviršiuje suformuotų SAM-ų, kurie buvo gauti naudojant skirtingus oktadeciltrichlorosilano (OTS) ir acetoksi-2-acetoksietiltrichlorosilano (ACT) medžiagų santykius. DSM formavimas buvo atliktas naudojant vezikulių susiliejimo metodą iš 1,2-dioleoil-sn-glicero-3-fosfocholino (DOPC) ir cholesterolio mišinio santykiu 6:4. Suformuotų membranų biologinio relevantiškumo įvertinimui buvo tiriama jų sąveika su toksinu melitinu. SAM ir DSM savybių tyrimui buvo naudoti paviršiaus kontaktinio kampo matavimai bei elektrocheminio impedanso spektroskopija (EIS).

Gauti rezultatai parodė, kad DSM stabilumas ir vientisumas stipriai priklauso nuo SAM sudėties ir formavimo sąlygų. Paviršiaus hidrofobiškumo matavimai parodė aiškią priklausomybę nuo OTS/ACT santykio, o optimaliomis sąlygomis kontaktiniai kampai siekė apie 100–110°. Suformuotų SAM kompleksinės talpos vertės, nustatytos iš EIS duomenų, svyravo nuo 1.1 iki 6.0 $\mu\text{F}/\text{cm}^2$. DOPC/cholesterolio membranos formavimui optimalios SAM sudėties nustatyti nepavyko dėl nepakankamo eksperimentinių duomenų atsikartojamumo. Dėl nepilnai ir nevienodai susiformavusių membranų specifinį melitino poveikį vienareikšmiškai įvertinti sunku. Tyrimų metu gauti rezultatai rodo, kad tolimesniems tyrimams būtinas membranų formavimo sąlygų optimizavimas, siekiant pagerinti eksperimentų atsikartojamumą ir patikimai įvertinti šios sistemos sąveikas su toksinais.

Synthesis of YFeO_3 through the use of intermediate metal oxides

Evaldas Lugauskas, Dovydas Karoblis, Aivaras Kareiva

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

Yttrium orthoferrite (YFeO_3) is one of the rare earth orthoferrite class of materials, which have become well known due to their unique physical properties. These materials are of the perovskite oxide type structure (ABO_3), where A and B are cations with different ionic radii. In the ideal case, the perovskite structure should be cubic, though due to differences in the cation ionic radii and due to defect formation, other structures can also be formed (orthorhombic, hexagonal etc.). Such is the case with YFeO_3 , which can form either an orthorhombic or a hexagonal phase, which can lead to very different magnetic and optical properties.

The synthesis of YFeO_3 has posed quite a lot of problems due to its metastability, which causes the orthoferrite phase to turn into an yttrium-iron garnet ($\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$) and ferric oxide (Fe_2O_3) at high temperatures. Because of this, conventional solid-state synthesis is not applicable due usually requiring multiple high-temperature ($>1000\text{ }^\circ\text{C}$) heating steps. Other synthesis routes can be utilized for metastable phase formation, such as gel combustion or ultra-fast high-temperature sintering, but they are often difficult to control and offer quite poor result reproducibility. In contrast, the so-called cometathesis method makes it possible to obtain high purity metastable ternary oxides at significantly lower temperatures.

Cometathesis synthesis relies on the use of a mixture of intermediate oxides for the formation of the metastable phase and some thermodynamically stable secondary phase. These byproducts provide a driving force for the reaction to come to fruition. The removal of the byproduct is the only drawback of this method, but it can be resolved through careful choice of the precursor materials to ensure the formation of a compound which can be easily removed (i.e. water-soluble).

The main goal of this research is to synthesize yttrium orthoferrite, using various oxide precursors (MgFe_2O_4 , CaFe_2O_4 , YOCl) and their mixtures, changing their ratio to tailor the synthesis parameters for single phase YFeO_3 formation as well as the physical property analysis of the obtained products.

This research elucidates the dependence of the phase purity of the obtained material on the choice of synthesis conditions, as well as the synthesis of the precursors themselves and their characterization.

Lietuvos upių potvynių parametrų kaitos tendencijos 1961–2020 metų laikotarpiu

Laurynas Mackevičius

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Per pastaruosius dešimtmečius klimato kaita reikšmingai paveikė Lietuvos upių hidrologinį režimą – pavasariniai potvyniai ankstėja, kinta jų intensyvumas, trukmė ir sezoniškumas. Auganti oro temperatūra, trumpėjanti sniego dangos išsilaikymo trukmė bei kintantis kritulių kiekio pasiskirstymas lemia nuotėkio sezoniškumo pokyčius. Tokie procesai keičia hidrologinio ciklo eigą ir turi įtakos potvynių formavimosi sąlygoms skirtinguose šalies baseinuose. Todėl šio tyrimo tikslas yra įvertinti 1961–2020 m. laikotarpio pagrindines Lietuvos upių potvynių pokyčių kaitos tendencijas. Tyrime siekiama atskleisti Lietuvos upių hidrologinio sezoniškumo pokyčius ir galimas jų formavimosi priežastis kintančio klimato sąlygomis.

Tyrime naudoti Lietuvos hidrometeorologijos tarnybos 1961–2020 m. penkiolikos upių kasdieniai debitų duomenys. Maksimalių metinių debitų ($Q_{\max}$) analizė atlikta 60 metų laikotarpiu dviem trisdešimtmečiais (1961–1990 ir 1991–2020). Kiekvienais metais buvo nustatomas vienas debito maksimumas ir analizuojamas jo pasiskirstymas mėnesiais. Tyrime potvynių ekstremalumas vertintas standartizuojant $Q_{\max}$ reikšmes, taip analizuojant standartizuotas didžiausias potvynio reikšmes (z). Papildomai nagrinėti debito, didesnio už vidutinį daugiamečių potvynio debitą (DDVP), atvejai. Nustatytos dienos, kai paros debitas viršijo upės daugiamečių potvynio debitą, vertintas jų pasiskirstymas mėnesiais bei dešimtadieniais. Tokia metodika leido įvertinti potvynių sezoniškumo, intensyvumo ir ekstremalumo kaitą Lietuvos upėse.

Tirtose Lietuvos upėse dėl sniego tirpsmo poveikio maksimalaus debito ($Q_{\max}$) atvejai dažniausiai nustatomi kovo–balandžio mėnesiais. Tačiau lyginant 1961–1990 ir 1991–2020 m. laikotarpius nustatyta aiški sezoniškumo kaita – pavasariinių pikų skaičius sumažėjo (vidutinėse–mažose upėse vidutiniškai nuo 24,0 iki 16,3, didžiosiose – nuo 14,5 iki 9,0 atvejo vienai upei), o žiemos sezonu potvynių padaugėjo, ypač didžiosiose upėse. Vakarų Lietuvoje išryškėjo lapkričio pikai, siejami su dažnesnėmis ir intensyvesnėmis rudeninėmis liūtimis, atskleidžiančiomis mišraus tipo potvynių stiprėjimą. Didžiosiose upėse nustatytas potvynių ekstremalumo mažėjimas. Vidutinėse–mažose upėse po 1990 m. potvyniai taip pat silpnėjo, nors atskirais metais fiksuoti itin ekstremalūs atvejai Šušvėje ($z=4,5$) ir Ventoje ($z=4,1$). DDVP dienų analizė parodė, kad nors potvynių laike pavasaris išlieka dominuojantis, žiemą atvejų reikšmingai padaugėjo, ypač Žemaičių aukštumoje. Tai atskleidžia potvynių ankstėjimo ir hidrologinio režimo persiskirstymo tendenciją.

Tarppariniai oro temperatūros svyravimai Lietuvoje

Adrija Meilūnaitė, Egidijus Rimkus

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Tarppariniai oro temperatūros svyravimai yra vidutinės oro temperatūros skirtumai tarp dviejų gretimų parų, atspindintys trumpalaikį atmosferos procesų kintamumą, oro masių advekciją ir frontinės veiklos intensyvumą. Šis rodiklis leidžia įvertinti ne tik orų nepastovumą, bet ir klimato režimo ypatumus. Tyrimo tikslas – įvertinti tarpparinių oro temperatūros svyravimų dydį ir pasiskirstymą Lietuvoje, nustatyti jų sezoninius ir erdvinius dėsningumus, ilgalaikes tendencijas 1951-2024 m. laikotarpiu bei ryšį su vidutine mėnesio oro temperatūra.

Tyrime analizuojami 18 meteorologijos stočių vidutinės paros oro temperatūros duomenys iš Lietuvos hidrometeorologijos tarnybos duomenų bazės, tolygiai apimantys visą šalies teritoriją. Tarppariniai svyravimai buvo apskaičiuoti kaip vidutinės paros oro temperatūros skirtumai tarp gretimų dienų. Kiekvienai stčiai nustatytos vidutinės mėnesinės ir metinės reikšmės, apskaičiuoti standartiniai nuokrypiai bei tiesinės regresijos trendai ($^{\circ}\text{C}/10$ metų). Trendų statistinis reikšmingumas vertintas taikant Mann-Kendall testą. Pirsono koreliacijos koeficientas naudotas ryšiui tarp vidutinės mėnesio oro temperatūros ir tarpparinių svyravimų Vilniuje bei Klaipėdoje įvertinti.

Nustatyta, kad vidutinis metinis oro temperatūros pokytis tarp dviejų gretimų parų Lietuvoje siekia apie $1,8^{\circ}\text{C}$. Mažiausi svyravimai ($1,5\text{--}1,7^{\circ}\text{C}$) būdingi Vakarų Lietuvai, ypač pajūrio zonai, kur juntamas tiesioginis Baltijos jūros poveikis, o didžiausi (iki $2,0^{\circ}\text{C}$) – rytinėje ir pietrytinėje šalies dalyje, pasižyminčioje ryškesniais kontinentinio klimato bruožais. Sezoniniu požiūriu mažiausi svyravimai fiksuojami vasarą (ypač liepą ir rugpjūtį, apie $1,1\text{--}1,6^{\circ}\text{C}$), kai vyrauja stabilesnės atmosferos sąlygos ir mažėnė oro masių kaita, o didžiausi – žiemą (sausį išauga iki $1,9\text{--}2,5^{\circ}\text{C}$), kai dažnesni staigūs temperatūros pokyčiai dėl aktyvios cikloninės veiklos. Ilgalaikės kaitos analizė parodė, kad 1951-2024 m. laikotarpiu tarppariniai oro temperatūros svyravimai daugumoje stočių statistiškai reikšmingai mažėjo, ypač žiemos mėnesiais (vasarį iki $-0,14^{\circ}\text{C}/10$ metų). Tai rodo mažėjantį Lietuvos klimato kontrastingumą. Šiltuoju metų laiku pokyčiai daugiausiai nereikšmingi, tik rugpjūčio mėnesį visose meteorologijos stotyse tarppariniai temperatūros svyravimai augo (dalyje stočių statistiškai reikšmingai). Nustatyta, kad tarpparinių oro temperatūros pokyčių priklausomybė nuo vidutinės mėnesio temperatūros yra stipriausia žiemos sąlygomis: tiek Klaipėdoje, tiek Vilniuje sausio mėnesį nustatytas statistiškai reikšmingas neigiamas ryšys, t. y. augant oro temperatūrai, mažėja tarppariniai svyravimai. Gauti rezultatai išryškina jūrinio ir kontinentinio klimato skirtumus bei rodo mažėjantį trumpalaikį temperatūros kontrastingumą Lietuvoje.

Grafeno oksido ir laidžiųjų polimerų kompozitai: sintezė, struktūra ir savybės

Greta Melkūnaitė, Justina Gaidukevič

Chemijos ir Geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius

Grafeno oksidas (GO) pasižymi hidrofilinėmis savybėmis ir funkcinių grupių gausa, todėl yra tinkamas kompozitinėmis medžiagoms kurti. Derinant GO su laidžiaisiais polimerais galima gauti kompozitus, kurie išsiskiria puikiu elektrocheminiu aktyvumu ir geru mechaniniu stabilumu. Šios savybės ypač svarbios kuriant jautres ir patikimus elektrocheminius jutiklius. Serotoninas (5-hidroksitriptaminas, 5-HT) yra vienas svarbiausių neuromediatorių, kuris palaiko mūsų emocinį stabilumą. Jo pagrindinė sintezė vyksta žarnyne (apie 90 % viso serotonino), taip pat smegenyse, kur jis reguliuoja nuotaiką, miegą, apetitą, atmintį ir net mokymosi procesus. Aukštas serotonino lygis yra susijęs su laimės ir ramybės jausmu, o jo trūkumas gali sukelti depresiją, nerimą ir miego sutrikimus. Nepaisant serotonino biologinės svarbos, jo selektyvus ir greitas aptikimas sudėtingose biologinėse terpėse išlieka reikšmingu iššūkiu ypač esant jo mažoms koncentracijoms. Todėl aktualu kurti pažangias elektrochemines medžiagas ir jutiklių platformas, kurios užtikrintų didelį jautrumą, selektyvumą ir stabilumą serotonino aptikimui realiose biologinėse sistemose.

Šio tyrimo tikslas buvo susintetinti GO ir poli(anilino-antranilo rūgšties) kopolimero kompozitus (GO/PANI-AA), ištirti jų struktūrą ir įvertinti elektrocheminį atsaką į 5-HT. GO buvo sintetinamas modifikuotu Hummers'o metodu, grafitą naudojant kaip pradinę žaliavą. Grafito oksidacija buvo vykdoma su sieros rūgštimi, kalio persulfatu ir fosforo (V) oksidu. Susidaręs GO tarpinis produktas buvo toliau oksiduojamas, pridodant natrio nitrato ir kalio permanganato. GO/PANI-AA kompozitai gauti druskos rūgštyje ištirpinus GO, aniliną, antranilo rūgštį ir amonio persulfatą. Santykis GO : (PANI+AA) = 1 : 1. Anilino ir antranilo rūgšties santykis kompozite buvo keičiamas.

Rezultatai parodė, kad GO įterpimas reikšmingai paveikia PANI-AA kopolimero struktūrines, morfologines ir elektrochemines savybes. SEM analizė atskleidė, kad kompozitų paviršiaus morfologija, lyginant su grynu kopolimeru, yra homogeniškesnė, o tai rodo geresnę GO dispersiją polimerinėje matricoje. Elektrocheminiai matavimai parodė, kad kompozitas, kurio PANI ir AA santykis buvo 25:75, pasižymi geriausiomis elektrocheminėmis savybėmis elektrodo modifikavimui. GO/PANI-AA modifikuotas elektrodas pasižymi stabiliu ir sustiprintu atsaku į 5-HT, kas rodo jo potencialą 5-HT jutiklių kūrimui.

Aukso nanostruktūrų ir berlyno mėlynojo taikymas kuriant fermentinį gliukozės biologinį jutiklį

Giedrius Mickevičius, Asta Kaušaitė–Minkštimienė

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

Amperometriniai gliukozės biologiniai jutikliai (BJ), kuriuose biologiniu atpažinimo elementu naudojama gliukozės oksidazė (GOx), yra vieni pagrindinių analitinių įrenginių, plačiai taikomų medicininėje diagnostikoje, farmacijos tyrimuose, biotechnologijoje ir maisto pramonėje. Jie leidžia ne tik tiksliai ir kiekybiškai nustatyti gliukozės koncentraciją, bet ir suteikia galimybę atlikti greitus bei realaus laiko matavimus. Nepaisant didelio jautrio ir atrankumo gliukozei, tradiciniai fermentiniai BJ dažnai pasižymi ribotu stabilumu, nepakankamu atsparumu interferuojančioms medžiagoms, jautrumu aplinkos sąlygoms. Siekiant pagerinti jų analizines charakteristikas ir pritaikomumą realiuose mėginiuose, šiuolaikinėje biosensorikos srityje plačiai taikomos pažangios nanomedžiagos, tokios kaip aukso nanostruktūros, grafenas ar nanozimai. Šios medžiagos padidina elektrodo aktyvų paviršiaus plotą, pagerina elektronų perdavimą, stabilizuoja fermentą ant elektrodo paviršiaus ir tokiu būdu leidžia kurti jautresnius, tikslesnius ir patikimesnius BJ. Amperometrinių BJ adaptavimas naudojant nanostruktūras suteikia galimybę sumažinti analizės trukmę, pagerinti matavimų pakartojamumą ir sukurti sistemas, pritaikomas neinvaziniam ar miniatiūriniam stebėjimui realiu laiku. Tai pabrėžia šių BJ aktualumą šiuolaikinėje analizinėje chemijoje ir medicininėje diagnostikoje. Šio darbo tikslas buvo sukurti naują amperometrinį fermentinį gliukozės BJ ir ištirti jo analizines charakteristikas. Tyrimo metu grafitinis elektrodas buvo modifikuotas aukso nanostruktūromis (AuNS), naudojant pastovaus potencialo amperometrijos metodą, bei Berlyno mėlynuoju (BM), įterptu į poli(pirrol-2-karboksirūgšties) sluoksnį (BM-PPKR), pasitelkiant ciklinės voltamperometrijos metodą. Ant taip modifikuoto elektrodo paviršiaus buvo adsorbuojama GOx, o visas nanobiokompozitas padengtas Aquivion® polimerine membrana. Šio jutiklio veikimo principas buvo pagrįstas fermentinės gliukozės oksidacijos molekulinio deguonimi metu susidariusio vandenilio peroksido elektoredukcija katalizuojama BM. Tyrimo metu buvo optimizuotos pagrindinės indikatorinio elektrodo paruošimo sąlygos (AuNS ir BM-PPKR sintezės sąlygos, GOx ir Aquivion® kiekis) bei BJ veikimo parametrai (darbinis potencialas ir buferinio tirpalo pH). Gauti rezultatai parodė, kad AuNS žymiai padidina elektrodo paviršiaus plotą ir laidumą, didindamos BJ generuojamą srovės signalą, kuris tam tikrame diapazone buvo tiesiogiai proporcingas gliukozės koncentracijai. Sukurtas BJ pasižymėjo geromis analizinėmis charakteristikomis, įskaitant pakartojamumą, atkuriamumą ir atrankumą, parodant jo potencialą gliukozės kiekio nustatymui realiuose mėginiuose. Šie tyrimai pabrėžia amperometrinių gliukozės BJ aktualumą šiuolaikinėje analizinėje chemijoje ir medicininėje diagnostikoje, atskleidžiant nanomedžiagų ir fermentų sinergijos potencialą kuriant BJ, atitinkančius šiuolaikinius diagnostikos poreikius ir prisidedančius prie inovatyvių biotechnologinių sprendimų plėtos.

Padėka

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

Naujų benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino darinių – potencialių amiloidų agregacijos moduliatorių – sintezė

Urtė Milerytė, Rita Bukšnaitienė, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Parkinsono liga (PL) priskiriama progresuojančioms neurodegeneracinėms ligoms, kurių molekulinis pagrindas siejamas su α -sinukleino netaisyklingu susilankstymu ir agregacija, lemiančia Lewy kūnelių formavimąsi bei dopaminerginių neuronų degeneraciją. Šiuo metu taikomos terapijos daugiausia yra simptominės ir tiesiogiai neveikia molekulinės ligos progresavimo mechanizmų. Dėl šios priežasties vis daugiau dėmesio skiriama mažos molekulinės masės junginiams, gebantiems prasiskverbti per hematoencefalinį barjerą ir moduluoti α -sinukleino agregaciją. Nepaisant literatūroje aprašytų įvairių agregacijos moduliatorių, chemiškai įvairių ir mechanistiškai išsamiai ištirtų junginių spektras yra ribotas, todėl būtina ieškoti naujų struktūrinių karkasų. Vienu iš perspektyvių kandidatų laikomas imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino karkasas, kuris, kaip rodo naujausi tyrimai, gali slopinti ankstyvasias α -sinukleino agregacijos stadijas. Tai sudaro prielaidas kryptingoms šio karkaso struktūrinėms modifikacijoms ir detalesniems veikimo mechanizmo tyrimams.

Šio darbo tikslas – susintetinti 2-aril-4*H*-benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino darinius, gebančius moduluoti α -sinukleino agregaciją. Šiems junginiams būdinga nauja struktūrinė modifikacija – pakaitas C₂ padėtyje šalia dvigubą ryšio, lyginant su anksčiau mūsų grupėje sintetintais 4-aril-2*H*-benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinais. Kadangi tokios struktūros junginiai literatūroje iki šiol neaprašyti, pirmasis darbo uždavinys buvo parinkti ir optimizuoti tinkamą sintezės metodiką. Šiuo tikslu per du etapus buvo susintetintas modelinis junginys 1-(3-fenilprop-2-in-1-il)-1,3-dihidro-2*H*-benzo[*d*]imidazol-2-onas: pirmiausia atliktas 1,2-diaminobenzono alkilinis (3-bromoprop-1-in-1-il)benzenu, o po to gautas tarpinis produktas kondensuotas su tiokarbonildiimidazolu. Naudojant modelinį junginį, buvo optimizuota intramolekulinė ciklizacijos reakcija, vertinant skirtingų metalų katalizatorių ir tirpiklių įtaką selektyviam šešianario žiedo susidarymui. Didžiausias šešianario ir penkianario žiedų susidarymo santykis (6/5 = 12:1) pasiektas reakciją vykdant DCE, naudojant AuBr₃ (15 mol%) kaip katalizatorių. Remiantis optimizuotomis sąlygomis, tolesniuose tyrimuose sistemingai vertintas donorinių ir akceptorinių pakaitų poveikis ciklizacijos selektyvumui, siekiant nustatyti elektroninių veiksnių įtaką šešianario ir penkianario žiedų formavimuisi.

Application of the Czochralski method for LiF single crystal growth

Miglė Minalgaitė^{1,2}, Skirmantė Tutlienė², Ramūnas Skaudžius¹

¹*Department of Inorganic Chemistry, Vilnius University*

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

Lithium fluoride (LiF) is an inorganic compound that crystallises in a face-centred cubic structure described by the space group $Fm\bar{3}m$ (Mei et al., 2013). Due to its broad transmission range of 0.120-7 μm (Vincenti, 2017), LiF single crystals play an important role in advanced optical applications like laser systems, optoelectronics, X-ray and spectroscopic equipment (Baldacchini, 2002; Goodfellow, 2024).

The Czochralski method was a significant breakthrough in the field of crystal growth, thus enabling the production of crystals of unparalleled quality (Brandle, 2004). In this method crystal is grown from a melt. A crystal seed is immersed in a crucible containing the melt, slowly rotated and pulled out.

The aim of this work was to investigate the influence of Czochralski method parameters on LiF single crystal shape and to optimise the growth process. Lithium fluoride crystals were grown from the melt in a glassy carbon crucible under a nitrogen (N_2) atmosphere by adjusting the temperature, rotation speed and pulling speed parameters. The grown crystals were analysed using X-ray diffraction, X-ray Laue diffraction, and UV-VIS spectroscopy. The results showed that LiF single crystals were successfully grown, and optimal conditions were found for our Czochralski equipment.

Acknowledgment

This research has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. P-SV3-25-693.

References

- Baldacchini, G. (2002). Colored LiF: an optical material for all seasons. *Journal of Luminescence*, 100(1–4), 333–343.
- Brandle, C. (2004). Czochralski growth of oxides. *Journal of Crystal Growth*, 264(4), 593–604.
- Goodfellow, “Lithium Fluoride LiF - Lump - Material Information,” EU Website, Nov. 08, 2024. <https://www.goodfellow.com/eu/resources/lithium-fluoride-lif-lump-material-information/> (accessed Feb. 01, 2026).
- Mei, L., Cai, X., Jiang, D., Chen, J., Guo, W., & Xiong, W. (2013). Investigation of thermal neutron scattering data for BeF_2 and LiF crystals. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 50(4), 419–424.
- Vincenti, M. A. (2017). Advanced spectroscopic investigation of color centers in LiF crystals exposed to 6 MV X-ray clinical beams. *Nuovo Cimento C Geophysics Space Physics C*, 40(2), 93.

Imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino analogų sintezė elektrofilinės ciklizacijos būdu

Martyna Paulauskaitė, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Junginiai, turintys imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentą, pasižymi plačiu biologinio aktyvumo spektru, apimančiu prieštuberkuliozinį, priešuždegiminį, priešgrybelinį bei amiloidų agregacijos slopinimo poveikį. Be to, šie junginiai išsiskiria cheminiu stabilumu ir gebėjimu specifiskai sąveikauti su biomolekulėmis, todėl yra laikomi perspektyviais kuriant naujus farmakologiškai aktyvius darinius. Dėl šių savybių tokio tipo heterociklinės struktūros sulaukia didelio susidomėjimo šiuolaikiniuose organinės sintezės ir vaistų chemijos tyrimuose.

Klasikiniai imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmento formavimo metodai dažniausiai apima nukleofilinio pakeitimo arba kondensacijos reakcijas, kurios reikalauja kelių sintezės etapų ir pasižymi ribotu efektyvumu. Pastaruoju metu vis daugiau dėmesio skiriama elektrofilų inicijuojamoms nukleofilinės ciklizacijos reakcijoms, leidžiančioms efektyviai ir selektyviai formuoti sudėtingas heterociklines sistemas vieno etapo metu.

Šiame darbe buvo tiriamos 2-alkeniltiobenzimidazolų elektrofilinės ciklizacijos reakcijos, kurios literatūroje iki šiol yra mažai aprašytos. 2-cinamiltiobenzimidazolas buvo pasirinktas kaip modelinis junginys ciklizacijos reakcijos sąlygoms optimizuoti, kurios leistų efektyviai formuoti imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentą. Optimizuotos reakcijos sąlygos buvo sėkmingai pritaikytos kitų 2-alkeniltiobenzimidazolų analogų ciklizacijai, išplečiant metodo taikymo ribas. Gauti imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino dariniai gali būti naudojami tolimesniuose cheminiuose ir biologiniuose tyrimuose.

Synthesis of Advanced Functional Materials for 3D Lithography

Tomas Paznėkas, Simas Šakirzanovas, Greta Merkininkaitė

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

Climate change and rapid urbanization pose growing challenges to ensuring safe drinking water. Hundreds of thousands of people still rely on surface water sources, highlighting the urgent need for efficient and environmentally friendly water disinfection technologies. Photocatalysis, particularly solar-driven disinfection (SODIS), has emerged as a promising solution. However, the development of durable and highly active photocatalytic materials remains a significant challenge. This study aimed to fabricate hexagonal boron nitride (h-BN) semiconductor 3D photocatalysts using UV lithography and to evaluate their applicability for solar-light-driven water disinfection. The research sought to determine how structural design and thermal treatment influence photocatalytic efficiency.

Various 3D photocatalyst structures were fabricated using an Original Prusa SL1S Speed 3D printer from a prepared photopolymer resin containing h-BN microparticles. Refractive index measurements confirmed that the prepared resin's optical feature fell within the range of standard photopolymer resins. To increase surface area and improve material properties, the printed objects were pyrolyzed for 3 hours at 900 °C in a nitrogen atmosphere. Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) analysis of the annealed structures revealed characteristic h-BN peaks, confirming the retention of h-BN after pyrolysis. Photocatalytic performance was evaluated by monitoring the degradation of Rhodamine B dye under a halogen lamp simulating solar irradiation. Reaction rate constants were calculated from the obtained absorption curves. Selected structures were also tested for reusability and compared with non-pyrolyzed samples.

The results demonstrated that pyrolyzed h-BN 3D structures exhibited significantly higher photocatalytic activity compared to non-pyrolyzed samples. Among structurally stable samples, the diamond lattice structure showed the most efficient Rhodamine B degradation. Reusability tests indicated that h-BN photocatalysts could be reused, although with slightly reduced efficiency in subsequent cycles. Non-pyrolyzed structures were capable of dye degradation but exhibited substantially slower reaction rates.

The study demonstrates that 3D-printed boron nitride structures are promising photocatalysts for solar-driven water disinfection, particularly after pyrolysis treatment. Structural design and thermal processing significantly influence photocatalytic efficiency, suggesting strong potential for further optimization and application in sustainable water treatment technologies.

Acknowledgements

The research was funded by the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No P-SV3-25-105.

Hsp90 slopiklių, struktūroje turinčių rezorcinolio ir tiadiazolo fragmentus, išsišakojanti sintezė

Vilius Petraška, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto, Chemijos ir geomokslų fakulteto, Chemijos institutas

Hsp90 yra molekulinis šaperonas, priklausantis šiluminio šoko baltymų šeimai, užtikrinantis tinkamą baltymų susilankstymą, stabilizaciją streso sąlygomis ir palengvinantis jų degradaciją. Nors sveikose žmogaus ląstelėse jis sudaro 1–2 % viso baltymų kiekio, vėžinėse ląstelėse randama padidėjusi šio baltymo koncentracija (Tsutsumi et al., 2012). Tyrimai parodė, kad Hsp90 atlieka svarbų vaidmenį ląstelių migracijoje, metastazėje ir kituose naviko progresavimo procesuose. Dėl šios priežasties per pastarąjį dešimtmetį Hsp90 buvo intensyviai tiriamas kaip potencialus taikinyς priešvėžiniam gydymui (Neckers & Neckers, 2005).

Gamtinių junginių tyrimai parodė, kad rezorcinolio fragmentas yra ypač svarbus molekulės prisijungimui prie Hsp90 N-galo domeno. Būtent čia randama ATP kišenė, kuri yra ypač svarbi baltymo funkcijoms. Tolimesni tyrimai atskleidė, kad aromatinis ciklas šalia rezorcinolio fragmento reikšmingai pagerina Hsp90 slopiklių prisijungimo savybes (Ardestani et al., 2022). Nors buvo susintetinta daug įvairių junginių, rezorcinolio žiedo 4-oji padėtis išlieka mažai ištirta.

Šio darbo tikslas – susintetinti Hsp90 slopiklius, turinčius hidrofobinius pakaitus rezorcinolio fragmento 4-oje padėtyje. Taikant paladžio chemiją, Buchwald–Hartwig ir Suzuki sujungimo reakcijų metu buvo gauti du skirtingų tipų junginiai – atitinkamai su fenilamino ir fenilo grupėmis. Pranešimo metu bus aptartas išsišakojančios sintezės procesas, jo iššūkiai ir rezultatai.

Literatūra

- Ardestani, M., Khorsandi, Z., Keshavarzipour, F., Iravani, S., Sadeghi-Aliabadi, H., & Varma, R. S. (2022). Heterocyclic Compounds as Hsp90 Inhibitors: A Perspective on Anticancer Applications. *Pharmaceutics*, 14(10).
- Neckers, L., & Neckers, K. (2005). Heat-shock protein 90 inhibitors as novel cancer chemotherapeutics - an update. *Expert Opinion on Emerging Drugs*, 10(1), 137–149.
- Tsutsumi, S., Mollapour, M., Prodromou, C., Lee, C. T., Panaretou, B., Yoshida, S., Mayer, M. P., & Neckers, L. M. (2012). Charged linker sequence modulates eukaryotic heat shock protein 90 (Hsp90) chaperone activity. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 109(8), 2937–2942.

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

Polina Pylskaja, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Amiloidinių fibrilių susidarymas yra svarbus daugelio neurodegeneracinių ir sisteminių ligų, įskaitant Alzheimerio ligą, Parkinsono ligą ir II tipo cukrinį diabetą, patologinis požymis. Netaisyklingai susilanksčiusių baltymų kaupimasis į netirpius amiloidinius agregatus sutrikdo ląstelių homeostazę ir sukelia citotoksinį poveikį, todėl amiloidogenezė laikoma svarbiu terapiniu taikiniu. Dėl to daug mokslinių tyrimų skiriama mažamolekulių inhibitorių, galinčių moduluoti baltymų agregacijos procesus arba stabilizuoti netoksiškas baltymų konformacijas, kūrimui.

Tarp įvairių bioaktyvių junginių klasių heterociklinės sistemos, turinčios imidazolo arba benzimidazolo fragmentus, sulaukė didelio dėmesio dėl palankių elektroninių savybių ir gebėjimo sąveikauti su biomolekuliniais taikiniiais. Junginiai, turintys imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino karkasą, pasižymi plačiu biologinio aktyvumo spektru, įskaitant priešuždegiminį, priešgrybelinį, antituberkuliozinį bei amiloidų agregaciją slopinantį poveikį. Šie junginiai taip pat išsiskiria cheminiu stabilumu ir selektyvaus prisijungimo prie biomolekulių gebėjimu, todėl laikomi perspektyviais naujų amiloidinių fibrilių formavimosi moduliatorių kūrimo kandidatais.

Šiame darbe buvo susintetinta ir toliau modifikuota junginių serija, turinti imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino arba benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentus. Sintezės strategija buvo pagrįsta pradine ciklizacijos reakcija, leidusia suformuoti atitinkamus heterociklinius branduolius. Vėlesnės pociklizacinės modifikacijos buvo nukreiptos į aminogrupės funkcionalizavimą, leidžiant įvesti įvairius pakaitus reakcijomis su tinkamais elektrofiliniais reagentais. Toks metodas sudarė galimybę gauti struktūriškai įvairius darinius tolimesniems tyrimams.

Meteorologinių sąlygų poveikis alksnio ir beržo žiedadulkių koncentracijai

Silvija Pipiraitė-Januškienė¹, Egidijus Rimkus¹, Ingrida Šaulienė², Laura Šukienė²

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²Vilniaus universiteto Šiaulių akademijos Ekosisteminių tyrimų laboratorija

Klimato kaita ir didėjantis alerginių susirgimų skaičius lemia augantį poreikį detaliai tirti žiedadulkių koncentracijos svyravimus ir juos sąlygojančius aplinkos veiksnius. Meteorologinių ir aerobiologinių rodiklių sąsajų analizė sudaro prielaidas geriau įvertinti žiedadulkių koncentracijos sezoniškumo dėsningumus bei jų kaitą.

Tyrimo metu buvo analizuojamas meteorologinių sąlygų poveikis alksnio (*Alnus*) ir beržo (*Betula*) žiedadulkių koncentracijai Klaipėdos, Šiaulių ir Vilniaus miestuose 2005–2023 metų laikotarpiu. Analizei naudoti kasdieniai aerobiologinių stebėjimų duomenys, surinkti monitoringo stotyse bei atitinkamų vietovių meteorologijos stočių pateikta meteorologinė informacija. Vertintas vidutinės paros oro temperatūros, santykinio oro drėgnumo, vidutinio vėjo greičio ir paros kritulių kiekio poveikis žiedadulkių koncentracijai atmosferoje. Analizė buvo atliekama tik žiedadulkių sezono laikotarpiu, kuris identifikuotas taikant Europos alergologijos ir klinikinės imunologijos (EAACI, angl. *European Academy of Allergy and Clinical Immunology*) metodiką. Pagal šią metodiką žiedadulkių sezonas laikomas prasidėjusiu pirmąją iš penkių iš eilės einančių dienų, kai kiekvieną dieną žiedadulkių koncentracija siekia ne mažiau kaip 10 žiedadulkių/m³, o per šias penkias dienas sukaupta suma yra ne mažesnė kaip 100 žiedadulkių/m³. Sezonas laikomas pasibaigusiu paskutinę dieną, atitinkančią tas pačias kriterijų sąlygas kaip ir sezono pradžios nustatymui.

Alksnio žiedadulkių sezonas vidutiniškai prasideda kovo viduryje ir baigiasi balandžio pradžioje, o vidutinė sezono trukmė tiriamosiose vietovėse kito nuo 24 iki 31 dienos. Tuo tarpu beržo žiedadulkių sezonas vidutiniškai prasideda balandžio viduryje ir baigiasi gegužės viduryje, o vidutinė trukmė 28-35 dienos. Vasario mėnesio ir ankstyvo pavasario oro temperatūra yra svarbiausi veiksniai, lemiantys sezono pradžios datą.

Didžiausios žiedadulkių koncentracijos dažniausiai fiksuojamos paromis kai kritulių nėra, tuo tarpu vidutinio gausumo (1-5 mm) bei gausūs krituliai (>5 mm), žiedadulkių koncentraciją ore sumažina beveik dvigubai. Sausais periodais sezono metu žiedadulkių koncentracija nežymiai didėja. Analizuojant vėjo greičio poveikį, nustatyta, jog žiedadulkių kiekis ore dažniausiai didėja vidutiniam paros vėjo greičiui artėjant iki 4 m per sekundę. Būtent pučiant 3-4 m/s vėjui fiksuojamas sezoninis žiedadulkių maksimumas. Kita vertus, kai pučia stipresnis vėjas, dėl intensyvaus oro maišymosi žiedadulkių koncentracija gali sumažėti. Vertinant vidutinės santykinės drėgmės ryšius su žiedadulkių kiekiu, buvo nustatyta, jog beržo žiedadulkių daugiausiai užfiksuota kai santykinė drėgmė yra <50%, o alksnio žiedadulkių – kai drėgmė yra 60-70%. Kai santykinis drėgnumas yra artimas 100%, žiedadulkių ore yra mažiau, nes neretai tokiomis dienomis yra didelė kritulių tikimybė.

N-Pakeistų rezorcinolinių karboksamidų, skirtų Hsp90 slopinimo tyrimams, sintezė

Ugnius Popovas, Ieva Žutautė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Hsp90 (šiluminio šoko baltymas 90) yra itin svarbus molekulinis šaperonas, atliekantis esminį vaidmenį daugiau nei 300 klientų baltymų brendimo ir reguliacijos procesuose. Daugelis šių klientų baltymų yra susiję su sudėtingomis ligomis, įskaitant vėžį, neurodegeneracinius sutrikimus ir infekcines ligas. Dėl šios priežasties Hsp90 tapo reikšmingu taikiniu kuriant sintetinius slopiklius.

Pagrindinis farmakoforas daugelyje Hsp90 inhibitorių yra rezorcinolio fragmentas, kuris slopina Hsp90 baltymo ATP jungimosi vietą N-galo domene. Todėl rezorcinolį turintys junginiai yra plačiai taikomi kuriant antrosios kartos Hsp90 slopiklius.

Tad šio darbo tikslas – ištirti galimus sintezės būdus naujų Hsp90 slopiklių kūrimui, kurie leistų įvesti amidinę grupę į rezorcinolio žiedo 6-ąją padėtį. Pagrindine pradine struktūra buvo pasirinktas 4-chlorrezorcinolis.

Tiksliniams junginiams gauti buvo išbandyti keli sintetiniai metodai, daugiausia dėmesio skiriant skirtingoms funkcinių grupių apsaugos ir amido formavimo strategijoms. Pradinis sintetinis kelias apėmė 4-chlorrezorcinolio hidroksilo grupių metilinimą, po kurio sekė formilinimas, oksidacija iki atitinkamos karboksirūgšties ir sėkmingas amido suformavimas. Tačiau dėl neselektyvaus metoksi grupių deblokavimo naudojant boro tribromidą, taip pat alternatyvių deblokavimo metodų nesėkmės, šios strategijos buvo atsisakyta.

Vėliau buvo tirtas tiesioginis dihidroksibenzenkarboksirūgščių darinių jungimas su aminais, naudojant HATU ir EDCI aktyvavimo sistemas, tačiau šie metodai neleido gauti pageidaujamų produktų. Todėl buvo įvertinta alternatyvi strategija, naudojant acetilines apsaugines grupes. Šis metodas buvo sėkmingai patvirtintas modelinėje sistemoje be chloro pakaito, įgyvendinant vieno indo (one-pot) amido formavimo reakciją. Vis dėlto šios strategijos pritaikymas 4-chlorrezorcinoliui nebuvo sėkmingas dėl selektyvios chlorinimo ir oksidacijos sunkumų, nepažeidžiant acetilinių apsauginių grupių, kas pabrėžė ryškų chloro pakaito poveikį substrato reaktyvumui.

Autoklavinio akytojo betono atliekų panaudojimas

Edita Prichockienė, Zenonas Valančius

Kauno Technologijos Universiteto Cheminės technologijos fakulteto Silikatų technologijos katedra

Įsigaliojus naujoms Europos Parlamento ir Tarybos direktyvoms, numatančioms, kad atsinaujinančių išteklių energija sudarytų ne mažiau kaip 20 % bendro ES šalyse suvartojamos energijos kiekio, vis didesnę reikšmę, gaminant statybines medžiagas, įgauna analogiškų statybinių atliekų panaudojimas technologiniame procese. Autoklaviniai akytojo betono (AAB) mūro gaminiai yra labai populiarūs statybų rinkoje ir šiuo metu plačiai naudojami. Kadangi šiuo metu yra reikalavimas, kad sienų šiluminės varžos dydis turi būti ne mažesnis kaip $8,3 \text{ m}^2 \cdot \text{K/W}$, tai, naudojant AAB mūro gaminius ir atsižvelgiant į svarbiausias galutinio produkto savybes – gniuždomąjį stiprį ir tankį, ne tik galima pasiekti reikiamą varžos dydį, bet ir užtikrini sienos konstrukcijos fizikines mechanines savybes.

Gaminant AAB mūro gaminius, technologinio proceso metu neišvengiamai gaunam apie 5 % autoklavinės akytos masės atliekų, kurių panaudojimas nėra išspręstas. Tyrimu siekiama ištirti galimybę naudoti AAB atliekas kaip priedą, gaminant naują autoklavinį akytąjį betoną. Toks atliekų panaudojimas išspręstų ekologinę problemą ir padėtų taupyti vietines žaliavas. Visos žaliavos buvo susvertos ir sudozuotos į maišytuvą tokia seka: vanduo, sumaltas smėlio ir atliekų šlamas, portlandcementis, kalkės, gipsas ir aliuminio suspensija. Homogeniška masė buvo supilta į suteptą formą ($10 \times 10 \times 10 \text{ cm}$) ir laikoma joje, kol įgyja reikiamą plastiškąjį stiprį.

Smėlis formavimo mišinyje buvo keičiamas 6,25 %, 12,5 % ir 18,75 % šia atlieka. Bandinių kietinimas vykdytas laboratoriniame 4 l autoklave „Parr instruments“ (Vokietija), kai sočiųjų vandens garų temperatūra – 190°C , slėgis – 12,5 bar, o izoterminio išlaikymo trukmė – 11 h. Po kietinimo bandiniai buvo išimti iš formų ir džiovinti iki pastovios masės $105 \pm 5^\circ \text{C}$ temperatūroje. Sausų bandinių gniuždomasis stipris buvo nustatytas hidrauliniu presu „Controls 50-C7022“. Išsami rentgenodifrakcinė analizė atlikta difraktometru BRUKER AXS D8 ADVANCE (Bruker AXS GmbH, Karlsrūhė, Vokietija).

Akytojo betono kietėjimo esmė yra ta, kad CaO iš kalkių reaguoja su silicio dioksidu ir sudaro 1,13 nm tobermoritą. Žinoma, kad tobermorito grupės mineralai nulemia tokių, labai plačiai statybose naudojamų gaminių, kaip betonas, silikatinės plytos, dujų silikatas, stiprumą ir kitas pagrindines eksploatacines savybes. Todėl, analizuojant rentgenogramas, buvo kreipiamas dėmesys į 1,13 nm tobermoritui būdingų difrakcinių smailių intensyvumo priklausomybę nuo priedo kiekio. Buvo apskaičiuota, kad pakeitus tam tikrą dalį smėlio kietintomis atliekomis, gautame akytajame betone susidaro didesnis 1,13 nm tobermorito kiekis, kas užtikrina didesnę bandinio stiprį. Todėl net 12,5 % autoklavinio akyto betono atliekų priedas visai nepablogina gaminio savybių, o stipris net padidėja iki 10 %.

Atlikto mokslinio tiriamojo darbo rezultatai rodo, kad kietintas AAB atliekas galima naudoti toje pačioje blokelių gamyboje. Jos leidžia sumažinti gamtinio smėlio sunaudojimą ir gamybą padaryti beatliekę.

Kokius technogeninius pėdsakus paliekame ateities kartoms Kuršių nerijos prieškopų nuogulose

**Donatas Pupienis^{1,2}, Pranciškus Brazdžiūnas¹, Harry Jol³, Ilya Buynevich^{1,4},
Darius Jarmalavičius², Gintautas Žilinskas²**

¹Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

²VMTI Gamtos tyrimų centro Geoaplinkos tyrimų laboratorija

³Viskonsino universiteto (JAV) O Klero padalinio Geografijos ir antropologijos katedra

⁴Temple universiteto (JAV) Gamtos ir technologijos mokslų kolegijos Žemės ir aplinkos mokslų katedra

Audrų metu vyksta intensyvus nuogulų perklostymas, todėl tarp nuosekliai besiklostančių eolinių smėlio sluoksnių įsiterpia stambesnio smėlio dalelės arba susidaro sunkiaisiais mineralais praturtinti horizontai. Po audrų prieškopės dažnai atkuriamos naudojant šakų klojinius ir žabtvores. Šios konstrukcijos, palaidotos po vėlesnių audrų ir smėlio akumuliacijos, išlieka kaip aiškiai atpažįstami antropogeninės veiklos pėdsakai. Be šių tiesioginių prieškopų tvirtinimo pėdsakų, prieškopų nuogulose aptinkami ir kitokio pobūdžio technogeniniai pėdsakai, tai vėjo į prieškopes atneštos šiukšlės, kurios laikui bėgant užpustomos ir palaidojamos po smėlio sluoksniais. Antropogeninės kilmės liekanos, aptinkamos natūralioje sedimentacinėje aplinkoje, apibrėžiamos kaip technogeninės fosilijos. Šios fosilijos, kartu su hidrometeorologiniais, prieškopų skersinės niveliacijos matavimų, sunkiųjų mineralų koncentracijos ir smėlio granulimetrinės sudėties duomenimis, gali būti panaudotos ekstremalių įvykių rekonstrukcijai ir paleoaplinkų atkūrimui. Tyrimo tikslas – įvertinti technogeninių fosilijų panaudojimo galimybes eolinių sedimentacinių aplinkų ir ekstremalių hidrometeorologinių įvykių rekonstrukcijai.

Tyrime naudoti 1993–2025 m. laikotarpio Lietuvos hidrometeorologijos tarnybos meteorologiniai (vėjo greičio ir krypties) ir hidrologiniai (Baltijos jūros lygio) kasvalandiniai duomenys iš Klaipėdos automatinės meteorologinės stoties ir Klaipėdos jūrų uosto vandens matavimo stoties. Papildomai analizuoti skersinės niveliacijos prieškopų morfometriniai duomenys surinkti ties Juodkrante, smėlio granulimetrinės analizės statistiniai rodikliai ir sunkiųjų mineralų koncentracija, nustatyta dviejuose sekliuose gręžiniuose.

Rezultatai parodė statistškai patikimą, vidutinio stiprumo teigiamą ryšį tarp vidutinio smėlio dalelių dydžio ir sunkiųjų mineralų koncentracijos ($r = 0,55$; $p < 0,05$), leidžiantį sieti šiuos sluoksnius su audrų poveikiu. Prieškopėje ties Juodkrante, 55 m atstumu nuo jūros kranto, 1,50–1,60 m gylyje (absoliutinis aukštis – 4,20–4,40 m), aptikta technogeninė fosilija – plastikinis kamštelis, remiantis skersinės niveliacijos morfometriniais duomenimis ir hidrometeorologinių sąlygų analize, leidžia daryti prielaidą, kad ši technogeninė fosilija pateko į prieškopes po 2001–2002 m. audrų sezono. Kuršių nerijos prieškopų eolinėse nuogulose technogeninės fosilijos, kartu su audrų suformuotais smėlio sluoksniais, veikia kaip reikšmingi stratigrafiniai indikatoriai, leidžiantys interpretuoti ekstremalių įvykių pasireiškimą ir žmogaus–aplinkos sąveiką laike bei nustatyti viršutinių dengiančių nuogulų minimalaus amžiaus ribas.

Nojus Radzevičius, Jonas Žurauskas, Edvinas Orentas*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

Vėlyvos stadijos organinių molekulių funkcionalizavimas tapo galinga strategija šiuolaikinėje vaistų kūrimo praktikoje, nes leidžia greitai įvairinti sudėtingas, bioaktyvias molekules be poreikio vykdyti *de novo* sintezę. Selektyvus tarpinių junginių ar galutinių bioaktyvių kandidatinių struktūrų modifikavimas pagreitina cheminės erdvės tyrinėjimą ir struktūros–aktyvumo ryšių analizę, taip sudarydamas galimybę tiksliai optimizuoti veiksmingumą, selektyvumą ir farmakokinetines savybes. Šis metodas mažina laiką ir medžiagų sąnaudas, todėl yra ypač vertingas optimizuojant potencialius vaistinius junginius ir kuriant analogų bibliotekas. Dėl to pastaruoju metu sukurta daug vėlyvos stadijos darinių gavimo metodų, ypač remiantis tokiomis strategijomis kaip molekulinis redagavimas (*molecular editing*) ir C–H funkcionalizavimas.

Šiame darbe pristatomas naujas, fotoredokso katalize pagrįstas metodas (hetero)arenų C–H funkcionalizavimui švelniomis sąlygomis, leidžiantis gauti atitinkamas (hetero)benzilpiridinio druskas. Metodas remiasi reagentu, kurį galima paruošti iš lengvai prieinamų, nebrangių laboratorinių cheminių medžiagų, taip pat naudojant organinius arba iridžio pagrindu veikiančius regimos šviesos fotokatalizatorius. Reakcija vykdoma kambario temperatūroje ir sėkmingai pritaikyta įvairiems (hetero)ariliniams junginiams; ji pasižymi dideliu funkcinų grupių tolerantiškumu, todėl gali būti taikoma bioaktyviems ir į vaistus panašiams substratams, produktus gaunant didelėmis išeigomis. Gautiems piridinio tarpiniams junginiams sukurta plati tolimesnio funkcionalizavimo metodų įvairovė, įskaitant oksidaciją iki aldehidų, įvairaus laipsnio redukcijas bei nukleofilinį funkcionalizavimą tiek klasikiais nukleofilais (pvz., aminorai, tioliai ir karboksilatai), tiek paladžio katalizuojamomis Suzuki/Hiyama/Sonogashira tipo reakcijomis.

Tuning Adsorptive Selectivity of MXenes Through Surface Functionalization for Dye Remediation

Aswathi Raveendran¹, Enayat Mohsenzadeh^{1,2}, Germante Paulikaite¹, Agne Sukoviene¹, Oleksiy Gogotsi³, Simonas Ramanavicius¹

¹*Department of Electrochemical Material Science, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology*

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

³*Materials Research Center, Kyiv, Ukraine*

Synthetic organic dyes are broadly applied in consumer products and represent a major source of water contamination due to insufficient wastewater treatment prior to discharge. Their high chemical stability and structural complexity limit the efficiency of conventional removal strategies. Adsorption is regarded as an effective treatment method because it combines simple design, low operational cost, limited chemical consumption, rapid processing, high removal efficiency, and the possibility of adsorbent reuse.

In this study, we aim to determine how ion intercalation influences the adsorption performance of MXenes toward organic dyes. MXenes provide a suitable platform for this purpose due to their high electrical conductivity, mechanical stability, hydrophilicity, large specific surface area, abundant surface-active groups, intercalation capability, and compatibility with other nanomaterials. We intercalated MXenes with Cl^- and SO_4^{2-} and characterized their structure and morphology by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), and Raman spectroscopy. We then quantified their adsorption capacity using methylene blue, azure A, and rhodamine B as model cationic dyes.

Structural analysis verified successful ion intercalation within the MXene structure. Adsorption measurements revealed that Cl^- intercalated MXene achieved a higher adsorption capacity than SO_4^{2-} intercalated MXene. Despite this difference in capacity, both materials exhibited the same selectivity order: azure A > methylene blue > rhodamine B. The adsorption process is primarily governed by electrostatic attraction between the negatively charged MXene surface groups ($-\text{O}$ and $-\text{OH}$) and the cationic dyes. These findings demonstrate that ion intercalation enables us to adjust adsorption capacity while preserving the selectivity pattern, providing a strategy to tailor MXene-based adsorbents for wastewater treatment and dye separation.

Acknowledgement

This project received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-MIP-24-14.

Cr³⁺ and Ce³⁺ Co-doped YLuAG Garnet Synthesis and Insight of Luminescence Properties

Nerija Ričkutė, Greta Inkrataitė, Ramūnas Skaudžius

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

Yttrium lutetium aluminium garnet (YLuAG) is a synthetic material that belongs to the garnet group. Synthetic garnet was first discovered in the 1950s, and since then the electronics industry has seen a rapid development of technologies using synthetic compounds with a garnet structure. YLuAG have good mechanical and optical properties. Cubic crystalline matrix allows incorporation in solid solution of luminescent ions such as transition metals (Cr³⁺) and lanthanides (Ce³⁺). Chromium and cerium co-doped YLuAG are widely used in luminescent systems such as phosphor-converted LEDs and scintillators. However, garnets doped with different amounts of luminescent metals show different results in luminescence properties. The measurements showed that even a small amount of chromium and cerium incorporated in garnets indicate luminescent properties. Ce³⁺ and Cr³⁺ co-doped YLuAG exhibit emission spectrum ranging from 480 nm to 830 nm, which almost covers full range of visible light and a slight shift towards the red light area. Due to that, it is a great candidate for white light LED lighting.

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

PPR imuninis jutiklis *Staphylococcus aureus* toksino panton-valentine leukocidino nustatymui

Aistė Rinkevičiūtė, Agnė Giniūnaitė, Asta Kaušaitė-Minkštimienė

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

Staphylococcus aureus yra vienas reikšmingiausių žmogaus patogenų, galintis sukelti platų infekcijų spektrą – nuo lengvų paviršinių odos ir minkštųjų audinių pažeidimų iki sunkių, gyvybei pavojingų invazinių ligų, tokių kaip sepsis, pneumonija ar nekrotizuojančios infekcijos. Šio patogeno klinikinė svarba siejama ne tik su didėjančiu atsparumu antibiotikams, bet ir su plačiu specifinių virulentiškumo veiksnių, ypač toksinų, gamyba. Toksinų ekspresija yra glaudžiai susijusi su infekcijos sunkumu, audinių pažeidimo mastu ir šeimininko imuninio atsako moduliavimu.

Vienas svarbiausių *S. aureus* išskiriamų toksinų yra Panton–Valentine leukocidinas (PVL), priklausantis poras formuojančių citotoksinų grupei. Šis dviejų komponentų toksinas specifiškai veikia leukocitus, sukeldamas jų membranos pažeidimą ir lizę. F komponentas (LukF-PV) kartu su S komponentu sudaro aktyvų kompleksą, kuris įsiterpia į ląstelės membraną ir formuoja poras, lemiančias ląstelės žūtį. LukF-PV laikomas esminiu struktūriniu ir funkciniu PVL vienetu, todėl jo nustatymas yra svarbus vertinant *S. aureus* padermių patogeniškumą ir galimą infekcijos eigą. Dėl ryšio su sunkesnėmis klinikinėmis formomis LukF-PV gali būti laikomas reikšmingu biožymeniu diagnostinių metodų kūrime.

Paviršiaus plazmonų rezonanso (PPR) imuniniai jutikliai suteikia galimybę tiesiogiai ir realiuoju laiku stebėti biomolekulinę sąveiką be papildomų fluorescencinių ar fermentinių žymių. Taip pat jie pasižymi dideliu jautriu ir atrankumu, o tai leidžia atlikti sudėtingos matricos mėginių analizę be papildomo jų paruošimo. Dėl šių savybių PPR imuniniai jutikliai yra ypač tinkami baltyminių toksinų kiekybiniam įvertinimui.

Šio darbo tikslas buvo sukurti ir ištirti PPR imuninį jutiklį, skirtą LukF-PV kiekybiniam nustatymui, bei įvertinti jo pagrindines analizines charakteristikas. Jutiklio lusto aukso paviršius buvo funkcionalizuotas savitvarkiu 11-merkaptoundekano rūgšties monosluoksniu, sudarant reaktyvias karboksi grupes tolimesniam antikūnų prieš LukF-PV (anti-LukF-PV) kovalentiniam imobilizavimui. Tyrimo metu buvo optimizuotos anti-LukF-PV imobilizavimo, anti-LukF-PV ir LukF-PV sąveikos bei imuninio komplekso regeneravimo sąlygos, siekiant pakartotino jutiklio panaudojamumo ir analizinio patikimumo.

LukF-PV aptikimas atliktas tiesioginiu detekcijos formatu, registruojant anti-LukF-PV ir LukF-PV sąveiką realiuoju laiku. Nustatyta, kad sukurtas jutiklio atsakas buvo tiesiai proporcingas LukF-PV nM koncentracijų diapazone. Jutiklis taip pat pasižymėjo geru analizinio signalo pakartojamumu, priimtiniu atkuriamumu ir patenkinamu stabilumu. Gauti rezultatai patvirtina, kad sukurtas PPR imuninis jutiklis yra tinkamas LukF-PV nustatymui modelinėmis sąlygomis ir gali būti toliau plėtojamas patogeniškumo tyrimams.

VU Geologinių katedrų istorijos kūrėjų jubiliejinės sukaktys (*Be praeities nebūtų ateities*)

Eugenija Rudnickaitė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Ignotas HORODECKIS (1776–1824) – **250 metų nuo gimimo**. Mineralogas, mineralogijos katedros vedėjas (1817 – 1824). 1811 m. tapo profesoriaus Andriaus Sniadeckio asistentu chemijos laboratorijoje. 1814 m. jis tapo chemijos katedros docentu. 1817 m. I. Horodeckiui buvo patikėta skaityti mineralogijos paskaitas. 1822 m. universiteto taryba paskyrė Ignatą Horodeckį etatiniu profesoriumi. Be paskaitų, I. Horodeckis vedė praktinius geologijos užsiėmimus, organizavo daug studentų išvykų į Vilniaus apylinkes. Jis taip pat atliko geologinius tyrimus, analizavo mineralų cheminę sudėtį ir surinko uolienų kolekciją. I. Horodeckis buvo pažangus mokslininkas, gamtoje susiejęs teoriją su praktika. Jis žinojo apie naujausias teorijas (įskaitant ir apie meteoritus) ir dėstė jas savo studentams.

Stasys ŽEIBA. (1916.02.03. - 1999.12.12.) – (palaidotas Rokantiškių kapinėse „Lakūnų kalnelyje“ Vilniuje) - **110 metų nuo gimimo**. Geologas, docentas ir karo lakūnas. 1938 m. baigęs Karo aviacijos mokyklą tarnavo Kauno, 1939–1940 m. – Šiaulių naikintuvų eskadrilėse. Dalyvavo pirmajame skrydyje iš Kauno į Vilnių 1939-aisiais. 1940–1944 m. dirbo Lietuvos geologijos tarnyboje, įstojo ir 1949 m. baigė Vilniaus universiteto Gamtos mokslų fakultetą. 1960 m. apsigynė disertaciją, nuo 1963 m. – docentas. 1960–1963 m. buvo Mineralogijos, 1963–1975 m. – Geologijos ir mineralogijos katedros vedėju. Dėstė universitete iki 1993 m. Surado ir nustatė 16 naujų devono pečiakojų rūšių. Stažavosi Prahos (1971), Greifswaldo (1972, 1974) universitetuose. Lietuvos geologų sąjungos narys (nuo 1994 m. – Garbės narys). Paskelbė daugiau kaip 80 mokslinių straipsnių. S. Žeiba 1981–1985 m. buvo Lietuvos aviacijos sporto federacijos veteranų komiteto pirmininkas, dimisijos leitenantas (1991), 1995–1998 m. – Lietuvos atsargos karininkų sąjungos Vilniaus skyriaus pirmininkas.

Alfredas BINDERIS (1926 Bazelyje – 2005 Züge) - **100 metų nuo gimimo**. VU Geologijos muziejui padovanota jo sukaupta mineralų ir uolienų kolekcija (~600 egz.).

MAŽESNĖS SUKAKTYS:

Žanas Emanuelis ŽILIBERAS (1741 – 1814) **285 metai nuo gimimo**. Gamtos istorijos profesorius, VU dirbo 1781 – 1784 metais.

Stasys JUCAS (1901 – 1963) - **125 metai nuo gimimo**. Nenuilstantis prof. M. Kaveckio pagalbininkas.

Meilutė KABAILIENĖ (1931.10.16 – 2016.08.22) - **95 metai nuo gimimo**. Profesorė VU Geologijos ir mineralogijos katedroje.

Petras VAITIEKŪNAS (1931.04.16. – 1978.06.24) - **95 metai nuo gimimo**. Docentas VU Geologijos ir mineralogijos katedroje.

Petras ŠIMKEVIČIUS (1941.02.10 – 2001.11.03) - **85 metai nuo gimimo**. VU Geologijos ir mineralogijos katedroje dėstė specializuotus kursus.

Kastytis Juozas DUNDULIS (1941.06.15 – 2024.02.26) - **85 metai nuo gimimo**. Profesorius VU Hidrogeologijos ir inžinerinės geologijos katedroje, katedros vedėjas.

A Novel Approach to Oxepane Scaffolds via Enolate Addition to Alkene

Gabija Sergejevaitė, Domantas Naruševičius, Edvinas Orentas

Department of Organic Chemistry, Vilnius University, Lithuania

Oxepane heterocycles are valuable structural motifs in pharmaceutical agents and natural products. Despite their significance, the synthesis of these seven-membered heterocycles remains challenging as currently known methods suffer from significant drawbacks, including harsh reaction conditions, use of expensive transition metals or multi-step procedures. To address these challenges, we present a novel one-step strategy for the efficient formation of oxygen containing seven-membered rings using enolate addition to non-activated double bonds. The procedure utilizes affordable 2-hydroxyacetophenone derivatives appended with styrene functionalities as starting materials. The reactions proceed under very mild conditions using potassium tert-butoxide as a base, yielding the desired oxepane derivatives in moderate to good yields.

Au/CoFeP and Au/CoP Electrocatalysts for High-Efficiency Overall Water Splitting at Industrial Temperatures

Dmytro Shyshkin¹, Huma Amber², Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė², Eugenijus Norkus²

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

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

The current global demand for clean and renewable energy sources has resulted in significant interest in hydrogen as a sustainable energy carrier. Electrochemical water splitting, which involves the hydrogen evolution reaction (HER) and the oxygen evolution reaction (OER), is a potentially effective route for the efficient production of hydrogen. The development of bifunctional electrocatalysts that exhibit high activity, stability, and cost-effectiveness for both HER and OER remains a significant challenge. Transition metal phosphides (TMPs) have been identified as promising candidates due to their high density of active sites, excellent electrical conductivity, and chemical robustness. In particular, bimetallic TMPs have been shown to exhibit synergistic effects that enhance catalytic performance. Surface modification with noble metals, such as gold (Au), has demonstrated significant potential for enhancing activity and stability through the modulation of the electronic structure and the facilitation of charge transfer. The present study reports the deposition of cobalt phosphide (CoP) and cobalt-iron phosphide (CoFeP) onto copper substrates via an electroless metal plating method, followed by the anchoring of Au nanoparticles through galvanic displacement. A comprehensive characterization of the catalysts was conducted, including scanning electron microscopy (SEM), energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), X-ray diffraction (XRD), and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). Utilising these techniques enabled the determination of their morphology, composition, and crystal structure. The bifunctional electrocatalytic performance was evaluated in a two-electrode system in 1 M KOH.

The Au/CoFeP catalyst demonstrated notable bifunctional activity, exhibiting a cell voltage of 1.68 V at 10 mA cm⁻², which is a significant improvement over the Au/CoP catalyst. This improved performance is attributed to the synergistic interaction among Au, Co, Fe, and P, which optimises the electronic structure and accelerates reaction kinetics for both HER and OER. In addition, the electrolyser was evaluated under industrially relevant temperatures ranging from 25 to 75 °C. As the temperature increased, a significant rise in current density was observed. The two-electrode configuration, employing Au/CoP as the cathode and Au/CoFeP as the anode, required only 1.67 V to achieve 10 mA cm⁻² at 75 °C. This finding suggests that the operational stability and effectiveness of the system are enhanced across the temperature range of 25–75 °C, thereby confirming the robustness and industrial viability of the system. In conclusion, the present research offers a scalable strategy for the design of Au-modified transition metal phosphides as efficient bifunctional electrocatalysts for industrial alkaline water electrolysis and sustainable hydrogen production.

Molekuliniu būdu įspausto polimero ant magnetinių dalelių kūrimas

Gabrielė Slaboševičiūtė^{1,2}, Ernestas Brazys^{1,3}, Vilma Ratautaitė¹

¹*Fizinių ir technologijos mokslų centro (FTMC) Nanotechnologijų skyrius*

²*VilniusTech Fundamentinių mokslų fakulteto Chemijos ir bioinžinerijos katedra*

³*Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas*

Molekuliniu būdu įspausti polimerai (MIP) – tai sintetiniai receptoriai, kuriuose yra suformuojamos specifinės tikslinių molekulių atpažinimo vietos. Jie, kaip biologinių receptorių (pvz., antikūnų ir antigenų) funkciniai analogai, yra plačiai taikomi cheminiuose jutikliuose, medžiagų atskyrimo ir gryninimo, katalizėje, vaistų kūrimo ir biomedicinoje. Svarbiausias MIP privalumas yra gana nesudėtingas gamybos procesas.

Tipinę molekulinio įspaudimo procedūrą sudaro keli etapai: 1) funkcinių monomerų, kryžminančių medžiagų ir šabloninių molekulių kompleksų savaiminis susidarymas; 2) cheminė arba elektrocheminė polimerizacija; 3) šabloninių molekulių pašalinimas iš susidariusio polimero, kurio metu polimero struktūroje sukuriama specifinė arba komplementarios šabloninėms molekulėms surišimo vietos. Tradiciškai MIP yra ruošiami cheminės polimerizacijos būdu kaip monolitai. Tačiau šis metodas turi keletą trūkumų, pavyzdžiui, ribotą surišimo vietų kiekį paviršiuje, neprieinamas atpažinimo vietas polimero viduje arba nevienodą morfologiją. Didelės molekulinės masės makromolekulių, tokių kaip peptidai, baltymai ar DNR, įspaudimas tebėra didelis iššūkis dėl šių molekulių dydžio, sudėtingos struktūros, riboto tirpumo ar stabilumo tirpale.

Šiame tyrime kuriamas MIP pagrindu veikiantis cheminis jutiklis, polimero sluoksnį formuojant ant magnetinių nanodalelių paviršiaus. Kobalto ferito (CoFe_2O_4) magnetinės nanodalelės (MND) buvo panaudotos kaip platforma MIP formavimui ir jutiklio kūrimui. Po radikalinės cheminės polimerizacijos šabloninės molekulės buvo pašalintos, taip suformuojant specifines atpažinimo vietas. Toliau MIP padengtos MND taikytos spektrofotometriniuose ir elektrocheminiuose matavimuose, siekiant įvertinti polimero ir šablono sąveiką. Elektrocheminiai matavimai atlikti trijų elektrodų elektrocheminėje celėje, sudarytoje iš magnetinio stikliškosios anglies darbinio elektrodo (GCE), platinos tinklelio pagalbinio elektrodo ir $\text{Ag}/\text{AgCl}_{(3\text{ M KCl})}$ palyginamojo elektrodo. MIP padengtų MND sąveika su šablono molekule buvo tiriama ciklinės voltamperometrijos (CV), elektrocheminės impedanso spektroskopijos (EIS) ir diferencinės impulsinės voltamperometrijos (DPV) metodais.

Aukso nanostruktūrų ir tetratiofulvaleno taikymas gliukozės biologiniame jutiklyje

Gytis Spundzevičius^{1,2}, Natalija German², Asta Kaušaitė-Minkštimienė^{1,2}, Almira Ramanavičienė^{1,2}

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

²*Inovatyvios medicinos centro Imunologijos ir bioelektrochemijos skyrius*

Gliukozės biologiniai jutikliai yra itin svarbūs diagnozuojant cukrinį diabetą ir vykdant reguliarių gliukozės koncentracijos žmogaus kraujyje stebėjimą. Kasmėt didėjant sergančiųjų diabetu skaičiui, reikalingi jautrūs, atrankūs, lengvai naudojami ir greiti gliukozės koncentracijos kraujyje nustatymo metodai. Dėl išskirtinio atrankumo, mažos gliukozės aptikimo ribos ir didelio jautrumo, biologiniai jutikliai sulaukė didelio dėmesio. Dažniausiai šiam tikslui naudojami elektrocheminiai biologiniai jutikliai, kuriuose elektrodas yra modifikuotas fermentu gliukozės oksidaze (GOx). Tokio tipo jutikliai plačiai taikomi klinikinėse laboratorijose ir moksliniuose tyrimuose. Siekiant pagerinti elektrocheminių biologinių jutiklių analizinius parametrus, elektrodas modifikuojamas įvairiomis nanomedžiagomis. Iš jų didelio populiarumo sulaukė aukso nanostruktūros, kurios sėkmingai taikomos antros kartos amperometrinuose biologiniuose jutikliuose.

Šio darbo metu buvo sukonstruotas bereagentis gliukozės biologinis jutiklis, modifikuojant elektrodą aukso nanostruktūromis (AuNS) ir elektronų pernašos tarpininku tetratiofulvalenu (TTF). Grafito strypelio elektrodo paviršius buvo elektrochemiškai modifikuojamas AuNS, ant kurių adsorbuojamas TTF ir imobilizuojamas fermentas GOx. Optimizuotas TTF ir GOx kiekis ant elektrodo, nustatytas tinkamas analizei potencialas. Elektrodas modifikuotas AuNS ir TTF charakterizuotas skenuojančiu elektroniniu mikroskopu. Įvertintas sukonstruoto bereagenčio amperometrinio gliukozės biologinio jutiklio veikimas, tirpale esant skirtingoms gliukozės koncentracijoms.

Ant grafito elektrodo paviršiaus pavyko elektrochemiškai suformuoti šakotas AuNS ir jas modifikuoti TTF. Ant modifikuoto elektrodo adsorbuotos GOx papildomas sujungimas glutaro aldehido garais, užtikrino stabilaus fermento sluoksnio susidarymą. Maksimalus srovės stipris buvo užregistruotas elektrodo modifikavimui naudojant 70 mmol/l TTF ir 25 mg/ml GOx tirpalus. Sukurtas biologinis jutiklis pasižymėjo analizei tinkamu tiesiškumo intervalu nuo 0.5 iki 10 mmol/l ir maža 0,56 mmol/l aptikimo riba. AuNS padidino elektrodo paviršiaus plotą, pagerino GOx imobilizavimą bei elektronų pernašą fermentinės gliukozės oksidacijos metu, kai elektrodas modifikuotas TTF. Tokio tipo gliukozės biologinius jutiklius paprasta naudoti bei galima greitai sužinoti tikslią gliukozės koncentraciją. AuNS taikymas atveria galimybes kurti geresnėmis savybėmis pasižyminčius elektrocheminius gliukozės biologinius jutiklius, tinkamus biomedicininėms ir klinikinėms reikmėms.

Padėka

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

Kovalentiškai imobilizuoti MXenų sluoksniai kaip naujoviška biojutiklio platforma

Miglė Stančiauskaitė¹, Simonas Ramanavičius², Almira Ramanavičienė¹, Viktoriia Korniienko³, Oleksiy Gogotsi⁴, Ieva Plikusienė¹

¹Nanotechnas, Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

²Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lietuva

³Latvijos Universiteto Atominės Fizikos ir Spektroskopijos institutas, Latvija

⁴Medžiagų tyrimų centras, Kyjivas, Ukraina

MXenai - perspektyvios 2D nanomedžiagos, kurių didelis paviršiaus plotas, elektrinės ir optinės savybės, bei reguliuojamos paviršiaus funkcinės grupės gali pasitarnauti tobulinant biojutiklius. Vis dėlto, jų panaudojimą ant optinių padėklų dažnai riboja prastas MXenų dangų stabilumas skystose terpėse, ypač veikiant srautui ir kintant pH. Kadangi tokiais atvejais elektrostatinė sąveika tarp substrato ir MXenų sluoksnio yra nepakankama, šiame darbe siūlomos praktiškos kovalentinio MXenų dalelių imobilizavimo ant aukso ir BK7 stiklo strategijos. Tai leidžia suformuoti mechanškai patvarias dangas, tinkamas naudoti kaip platformas biojutikliuose tiriant baltymų sąveikas. Šių eksperimentų metu buvo išbandomi du padėklai – BK7 stiklas ir kvarco kristalo mikrogravimetrijai su disipacija (QCM-D) naudojamas lustas, kurio paviršius padengtas auksu. Prieš sluoksnių formavimą MXenai buvo funkcionalizuoti 3-aminopropiltrietoksisilano (APTES), kuriam jungiantis prie MXenų paviršiuje esančių -OH grupių susidarė -NH₂ grupės. Buvo atlikti bandymai tiriant acto rūgšties įtaką MXenų funkcionalizavimo metu susidarančių amino grupių kiekiui ir sluoksnių išvaizdai. MXenų SEM nuotraukos, kartu su XPS rezultatais, atskleidė, kad APTES funkcionalizuoti MXenų sluoksniai geriau išlaiko savo 2D formą, kuomet aminogrupių susidaro mažiau. Gryno MXenų mėginio N 1s smailė parodė 0.67 at% azoto, o APTES funkcionalizavimu, nenaudojant acto rūgšties, šį kiekį padidino net iki 4.72 at%. Funkcionalizavimo metu naudojant acto rūgštį pokytis buvo mažesnis – azoto gauta 1.62%. BK7 stiklui padengti MXenais naudota strategija, kurios metu ir BK7 stiklas buvo funkcionalizuotas aminogrupėmis pasitelkiant APTES, taip sukuriant galimybę BK7 ir MXenų paviršiuje esančias aminogrupes sujungti naudojant glutaraldehidą. Dengiant QCM-D lustus APTES funkcionalizuotais MXenais pasitelkta EDC/NHS chemija. Ant aukso paviršiaus suformuoto 11-merkaptoundekano rūgšties savitvarkio monosluoksnio -COOH grupės aktyvavus EDC/NHS, ant MXenų esančios -NH₂ grupės prisijungia kovalentiškai. Norint tolygiai MXenais padengti QCM-D lustą ir BK7 stiklą, buvo išbandyti sukamasis dengimas bei plėvelių formavimas vakuumu, iš kurių pastarasis pasiteisino labiau. Pasitelkiant vakuuminio filtravimo plėvelių formavimo metodą gali būti kontroliuojamas MXenų plėvelių storis ir vientisumas. Išbandant dengimą sukančiant buvo pastebėta, kad išsekvojama didelė dalis MXenų tirpalo, o pats dengimas gautas netolygus dėl nepakankamo ir sunkiai kontroliuojamo BK7 paviršiaus drėkinimo.

Šis darbas parodė, kad MXenų funkcinės grupės galima reguliuoti ir po sintezės, o silanizavimas, jį tinkamai kontroliuojant, nepakeičia MXenų 2D struktūros. Kovalentinis nanodalelių imobilizavimas yra svarbi dalis jų realiam panaudojimui, užtikrinanti dangos stabilumą įvairiomis sąlygomis.

Spatial Distribution and Concentration Mapping of Airborne Microplastics in Lithuanian Educational Institutions

Tomas Stonkus, Ieva Uogintė, Steigvilė Byčenkienė

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Environmental Research

Plastic has become one of the most commonly used materials since its first synthesis as a phenol–formaldehyde resin. Although it was initially developed to enhance everyday life, plastic has gradually become a serious concern for the environment and human health. In recent decades, the extensive use of synthetic polymers across numerous industries has contributed to the growing presence of airborne microplastics. Investigating microplastics in indoor air is particularly important, as people spend nearly 90% of their time indoors. Moreover, the concentration of microplastic particles in indoor environments is approximately 1.8 times higher than in outdoor air.

The aim of this study is to investigate the distribution of airborne microplastics within Lithuanian schools. The research focuses on how microplastic levels vary within school buildings, particularly between different floors and between schools located in urban and regional areas. The study also seeks to identify possible patterns of accumulation inside indoor spaces.

To achieve this, the number of microplastic particles collected per unit area will be measured and compared across different sampling locations. Differences between floors and between schools in different geographical areas will be statistically analyzed to determine whether they are significant. Based on the results, a concentration map will be created to visually present the distribution of airborne microplastics inside the buildings. The findings will help improve the understanding of indoor exposure to microplastics and may support efforts to improve environmental quality in schools.

Cinko heksacianoferato(II,III) sintezė ir elektrocheminių savybių tyrimas vandeninėse cinko jonų baterijose

Dovilė Škarnulytė^{1,2}, Linas Vilčiauskas^{1,2} ir Jurgis Pilipavičius^{1,2}

¹Chemijos institutas, Vilniaus Universitetas

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Vilnius

Energijos kaupimo sistemų, pavyzdžiui, baterijų, vystymas tampa vis svarbesnis, didėjant energijos, gaunamos iš atsinaujinančių šaltinių, paklausai. Viena iš dėmesį pritraukusių technologijų yra vandeninės cinko jonų baterijos, kadangi jų naudojimas yra saugesnis, nei šiuo metu labiausiai paplitusių ličio jonų baterijų. Vienu iš perspektyvių katodų šiose baterijų sistemose laikomas Berlyno mėlynojo analogas – cinko heksacianoferatas(II,III) (ZnHCF), pasižymintis atviro karkaso struktūra, galinčia talpinti įvairius metalų jonus, įskaitant K^+ , Na^+ ir Zn^{2+} . Vis dėlto, šių medžiagų pritaikymas vis dar yra ribotas dėl nepakankamų žinių apie sintezės sąlygų įtaką besiformuojančiai struktūrai bei ne iki galo ištyrinėto Zn^{2+} įterpimo/ištraukimo mechanizmo.

Šiame darbe siekta išsiaiškinti, kokios sintezės sąlygos yra palankios romboedrinės ir kubinės ZnHCF kristalinių fazių formavimuisi, taip pat išanalizuoti medžiagoje krovimo/iškrovimo metu vykstančius procesus. Tyrimo metu nustatyta, kad džiovinimo temperatūra ir slėgis yra pagrindiniai parametrai nuo kurių priklauso fazės formavimasis. Naudojant *operando* Rentgeno spindulių difrakcijos metodą pastebėta, kad krovimo/iškrovimo metu vyksta sudėtingesni faziniai pokyčiai, nei anksčiau buvo manyta. Šie rezultatai leidžia geriau suprasti skirtingų šios medžiagos struktūrų susidarymo ypatumus ir elektrochemines savybes, bei suteikia vertingos informacijos, reikalingos optimizuoti šios medžiagos, kaip katodo, savybes kuriant saugesnes vandenines cinko jonų baterijas.

10*H*-Fenotiazino 5,5-dioksido pagrindu sukurtų junginių stabilumo ir energetinių savybių teorinis tyrimas

Jelena Tamulienė¹, Jonas Šarlauskas²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas

²Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Biochemijos institutas, Ksenobiotikų biochemijos skyrius

Atlikome fenotiazino 5,5-dioksido pagrindu sukurtų junginių cheminio ir terminio stabilumo bei detonacinių savybių priklausomybės nuo $-NH_2$, $-(3-NH-1,2,4-triazolo)$ ir pikrilo ($2,4,6-(NO_2)_3C_6H_5-$) pakaitų tyrimus tam, kad nustatytume ar tokio tipo dariniai atitiks saugumo ir detonacinių savybių reikalavimus, keliamus aukštos energijos medžiagoms. Tyrimai atlikti DFT B3LYP/cc-pVTZ metodu. Nustatytos HOMO–LUMO tarpo, energijos tenkančios atomui, cheminio kietumo ir elektronegatyvumo, medžiagų tankio, detonacijos slėgio vertės.

Rezultatai parodė, kad tiriamų junginių cheminis ir terminis stabilumas priklauso nuo pakaitų skaičiaus junginyje ir jų tipo. Pažymėtina, kad didėjant $-NH_2$ pakaitų skaičiui nuo dviejų iki keturių, junginių stabilumas didėja, o didėjant $-(3-NH-1,2,4-triazolo)$ pakaitų skaičiui – mažėja. Nustatyta, kad junginio su pikrilo fragmentu stabilumas yra mažiausias. Taip pat nustatyta, kad šio junginio elektronegatyvumas yra didžiausias. Remiantis gautais rezultatais, numatyta, kad junginys su pikrilo pakaitu nėra tinkamas dėl santykinai mažo stabilumo.

Pažymėtina, kad tirtų medžiagų tankis yra 1,6-2,1 g/cm³ intervale. Nustatyta, kad dėl $-NH_2$ pakaitų skaičiaus didėjimo, medžiagos tankis mažėja, o dėl $-(3-NH-1,2,4-triazolo)$ – didėja. Junginiai, kurių tankis didelis (artimas 2 g/cm³), yra siejami su dideliu detonacijos greičiu ir slėgiu. Pažymėtina, kad visų tirtų junginių detonacijos slėgis yra didesnis nei standartinio TNT.

Atlikta jautrumo smūgiui analizė parodė, kad tik junginiai su $-NH_2$ pakaitais gali būti priskiriami prie nejautrių smūgiui medžiagų, nors ir kiti atitinka vidutinio jautrumo energetinių medžiagų klasės kriterijus. Itin dideliu jautrumu smūgiui pasižymi junginiai su pikrilo fragmentu.

Apibendrinus rezultatus, padaryta išvada, kad fenotiazino 5,5-dioksido pagrindu sukurti junginiai su tinkamais pakaitais gali būti naudojami karyboje ir pramonėje kaip stabilios ir mažo jautrumo kriterijus atitinkančios aukštos energijos medžiagos.

Electrocatalytic activity of Ni(OH)₂-supported Pd electrocatalysts towards the oxidation of methanol in alkaline solution

Muhammad Adeel Tariq, Hafiz Muhammad Naeem, Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė, Eugenijus Norkus, Ramūnas Levinas

Department of Catalysis, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Vilnius, Lithuania

Direct methanol fuel cells (DMFCs) have acquired considerable attention owing to high energy density, structural simplicity, fast operation and low pollution. However, their industrial application remains limited by some of their drawbacks, such as low fuel efficiency conversion, slow methanol oxidation and poisoning of catalytic active sites by carbonaceous intermediates. To address these challenges, in this study Ni(OH)₂ was hydrothermally synthesized and composited with metallic Pd nanoparticles, obtained by chemical reduction, to synthesize Pd/Ni(OH)₂ composite with different Pd : Ni ratio. Various physiochemical techniques such as X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy with energy dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDS) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) were used to evaluate the structural, morphological and chemical properties of Pd/Ni(OH)₂ catalyst. XRD analysis confirmed that Pd/Ni(OH)₂ composite showed the characteristic peaks of nickel hydroxide and metallic Pd. While SEM-EDS results displayed the presence of agglomerated and irregular Ni(OH)₂ flakes along Pd nanoparticles and uniform distribution of all constituent's elements in Pd/Ni(OH)₂ samples. XPS patterns further confirmed the existence of metallic Pd, with Pd 3d 5/2 and 3/2 peaks observed at 335.00 eV and 340.22 eV.

Cyclic voltammetry (CV), chronoamperometry (CA), and electrochemical impedance spectroscopy (EIS) were used to investigate the electrocatalytic behavior of Pd/Ni(OH)₂ material for methanol oxidation in alkaline solution. The Pd/Ni(OH)₂ exhibits significant catalytic activity towards MOR relatively to Ni(OH)₂ due to synergistic effects of both the Pd active sites and Ni(OH)₂ support. Among the investigated composites, Pd : Ni (1:0.5) catalyst showed highest forward peak current density (31.10 mA cm⁻²) and normalized mass activity (450 mA mg⁻¹_{Pd}) compared to other similarly synthesized catalysts. However, Ni-rich composites Pd/Ni(OH)₂ (1:1) and (1:3) showed larger I_f/I_b ratio (~1.4), lower Tafel slope (134 mV dec⁻¹) and T_{LF} values, attributed towards less deactivation of active sites responsible for fresh methanol oxidation in alkaline media. Increasing the Ni content led to a decrease in catalytic activity for MOR due to larger resistance and reduced electronic conductivity. To overcome this, the Ni-rich composite (1:3) was mixed with 20 wt% carbon black, showing significant decreased in T_{LF} values confirmed by EIS and 35% increase in direct methanol oxidation current. Overall, the obtained Pd/Ni(OH)₂ material presents a cost effective, promising, durable anode catalyst.

Ternary Mn-, Ru-, and Mo-Modified PtCo/graphene nanocatalysts for the methanol oxidation reaction

Julija Usavičiūtė, Virginija Kepenienė, Raminta Stagniūnaitė, Loreta Tamašauskaitė-Tamačiūnaitė

Fizinių ir technologijos mokslų centro Katalizės skyrius

The growing demand for sustainable and clean energy technologies has accelerated the development of efficient electrocatalysts for renewable energy conversion systems. Among various alternatives, direct methanol fuel cells (DMFCs) have attracted significant attention due to their high energy density, easy fuel handling, and suitability for portable and low-temperature applications. However, the development of highly active and durable catalysts for the methanol oxidation reaction (MOR) remains a critical challenge.

In this study, graphene (GR)-supported ternary PtCoM (M = Mn, Ru, Mo) electrocatalysts were successfully synthesized via a one-pot microwave-assisted method, providing a rapid and energy-efficient fabrication route. The catalysts were prepared with different metal molar ratios: Pt:Co:Mn (1:3:1), Pt:Co:Ru (1:2:2), and Pt:Co:Mo (7:2:1). The microwave-assisted synthesis enabled uniform metal dispersion and controlled nanoparticle formation on the graphene surface.

The structural and morphological characteristics of the prepared catalysts were examined using Transmission Electron Microscopy (TEM). The electrocatalytic performance toward the methanol oxidation reaction (MOR) in an alkaline medium was evaluated by cyclic voltammetry and chronoamperometric measurements.

Among the investigated materials, the PtCoMn/GR catalyst exhibited the highest electrocatalytic activity, achieving a current density of 144.5 mA cm^{-2} , which was up to 4.8 times higher than that of PtCoRu(1:2:2)/GR, PtCoMo(7:2:1)/GR, and bare Pt/GR catalysts. The enhanced performance is attributed to the synergistic effect between Pt, Co, and Mn as well as the improved dispersion achieved via microwave-assisted synthesis.

Debesuotumo kaitos tendencijų Rytų Baltijos regione nustatymas 1979–2024 m. remiantis palydoviniais duomenimis

Kristina Vaičiūnaitė, Justinas Kilpys

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Debesys yra svarbi Žemės klimato sistemos dalis, lemianti energijos balansą, kritulių formavimąsi, drėgmės pernašą. Nors debesuotumo kaitos procesai, priežastys ir pasekmės globaliu mastu tyrinėjami jau ne vieną dešimtmetį, debesuotumo poveikis išlieka viena didžiausių neapibrėžčių klimato modeliuose. Regioniniai debesuotumo dinamikos tyrimai būtini norint tiksliau įvertinti šiuos procesus klimato kaitos kontekste.

Šio darbo tikslas – nustatyti erdvinį debesuotumo pasiskirstymą ir kaitą laike Rytų Baltijos regione 1979–2024 m. laikotarpiu pasitelkiant CLARA-A3 palydovinių duomenų rinkinį. Buvo apskaičiuotos vidutinės metų, sezonų ir mėnesių debesuotumo reikšmės, nustatyti jų erdvinio pasiskirstymo dėsningumai, atlikta vidutinių debesuotumo reikšmių kaitos analizė ir nustatytas pokyčių statistinis patikimumas. Erdviniam pasiskirstymui įvertinti buvo sugeneruoti žemėlapiai, o laiko eilutės trendams nustatyti taikytas Mann–Kendall testas ir Theil–Sen nuolydžio metodas.

Nustatyta, kad 1979–2024 m. laikotarpiu vidutinis debesuotumas Rytų Baltijos regione sumažėjo nuo 74 % iki 66 %, pokyčių greitis siekė 1,8 % per 10 metų. Žiemą debesuotumas sumažėjo 0,8 %, rudenį – 1,8 %, pavasarį ir vasarą – po 2,3 % per 10 metų. Metų ir visų sezonų vidutinio debesuotumo mažėjimo trendai yra statistiškai reikšmingi ($p < 0,05$). Neigiamas debesuotumo reikšmių pokytis nustatytas visais 12 mėnesių, tačiau statistiškai reikšmingi trendai apskaičiuoti tik balandį, birželį, rugpjūtį ir rugsėjį.

Aukščiausios vidutinės metų debesuotumo reikšmės (70–79 %) fiksuojamos Baltijos jūros priekrantėje, ypač Suomijos ir Rygos įlankose bei Kuršių Nerijoje. Sausumoje didesnės reikšmės fiksuojamos rytuose (68–73 %), ties orografinėmis kliūtimis ir Peipaus ežeru (Estija), mažesnės – vakaruose ir jūros pakrantėje (65–68 %).

Žiemą ir rudenį jūroje debesuotumas 8–15 % didesnis nei sausumoje, o vasarą – 3 % mažesnis atviroje jūroje ir 9–12 % didesnis arčiau kranto. Sausumoje debesuotumas didžiausias rytuose, mažiausias – ties jūros pakrante (5–6 % skirtumas). Pavasarį atviroje jūroje ir rytinėje sausumos dalyje debesuotumo reikšmės panašios (64–65 %). Skirtumai sausumoje tarp aukštumų ir žemumų bei pakrantės yra 3–4 %, o skirtumai tarp atviros jūros ir įlankų siekia 5–10 %.

Žaliavų sudėties ir apdorojimo būdo įtaka gipso kristalų struktūrai

Zenonas Valančius, Edita Prichockienė

Kauno Technologijos Universiteto Cheminės technologijos fakulteto Silikatų technologijos katedra

Kristalinių medžiagų fizikines ir chemines savybes nulemia ne tik jų cheminė sudėtis, bet ir tai kokiais ryšiais yra sujungtos sandaros dalelės, kokie yra medžiagą sudarančių kristalėlių dydžiai ir jų tarpusavio išsidėstymas. Gipsinių rišamųjų medžiagų kristalų struktūrą lemia žaliavos, iš kurios ji gaunama, sudėtis ir jos apdorojimo būdas. Yra žinomi du pushidračio gipso gavimo būdai, priklausomai nuo jų, gaunama skirtingos kristalinės sudėties ir savybių rišamoji medžiaga. Darbo tikslas – skirtingais apdorojimo būdais gauti pushidratį gipsą ir atlikti gautų produktų mikroskopinę analizę.

Tyrime buvo naudojamas reagentinis dihidratis gipsas $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, kurio grynumas 99,97 %, reagentinis pushidratis gipsas $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, kurio grynumas 99,98 %, dihidratis fosfogipsas, susidaręs AB „Lifosa“, gaminant fosforo rūgštį iš apatitų.

Gipso dehidratacija buvo vykdoma buitinėje mikrobangų krosnelėje SAMSUNG, autoklave „Parr Instruments“, mikrobangų reaktoriuje CEM Discovery Synthesis Unit (CEM Corp., Matthews, NC). Skenuojanti elektroninė mikroskopinė analizė (SEM) atlikta mikroskopu FEI QUANTA 200 FEG.

Kad įvertintume žaliavos prigimtį ir apdorojimo būdo įtaką gipsinės rišamosios medžiagos kristalų struktūrai, iš reagentinio dvivandenio gipso ir iš fosfogipso kalnuose atsirinkto dvivandenio fosfogipso, skirtingais apdorojimo būdais buvo pasigaminti rišamosios medžiagos pavyzdžiai, kuriems atlikta mikroskopinė analizė. Gautas nuotraukos rodo, kad kristalų struktūra skiriasi priklausomai nuo žaliavos apdorojimo sočiųjų vandens garų ar oro aplinkoje.

Sočiųjų vandens garų aplinkoje gauti kristalai savo struktūra skiriasi nuo žaliavos kristalų struktūros. Šiuo būdu gaminant gipsinę rišamąją medžiagą α -pushidratį gipsą, jo kristalų dydis ir forma priklauso nuo kristalizacijos centrų susidarymo ir jų augimo greičių santykio. Iš reagentinio gipso gauto pushidračio gipso pailgi kristalai/adatėlės suaugusios į aglomeratus. Iš rūgštaus fosfogipso gauti pushidračio kristalai yra žymiai stambesni, daugiau pavieniai, nors nėra griežtai išreikštos formos. Tačiau smulkesnės, bet taisyklingos priзмės gaunamos iš apdoroto/disperguoto fosfogipso. Kristalų dydį galima keisti, keičiant žaliavos technologinio apdorojimo temperatūrinį režimą.

Dehidratuojant žaliavą, aplinkos oro sąlygomis, gauto pushidračio kristalų forma yra panaši į žaliavos kristalų. Tai patvirtina teiginį, kad šio terminio proceso metu vandens molekulės atskykla priklausomai nuo apdorojimo režimo: žemesnėje temperatūroje tai vyksta ramiai ir kristalai mažai suyra, o aukštesnėse temperatūrose dehidratacija vyksta sparčiau, dėl ko pastebimas kristalų smulkėjimo procesas.

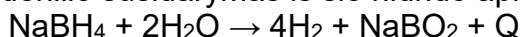
Efektyvūs nikelio pagrindo katalizatoriai vandenilio generavimui

Gitana Valeckytė¹, Zita Sukackienė¹, Jūratė Vaičiūnienė¹, Loreta Tamašauskaitė-Tamašiūnaitė¹ ir Jolanta Stupakova²

¹Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Fizinių ir technologijos mokslų centras, Katalizės skyrius

²Vilniaus Gedimino technikos universitetas

Viena iš svarbiausių vandenilio kaupimo medžiagų savybių yra didelė jų gravimetrinė vandenilio talpa. Gravimetrinė vandenilio talpa – tai rodiklis, parodantis, kiek vandenilio galima sukaupti medžiagoje, palyginti su pačios medžiagos mase. Dažniausiai ji išreiškiama masės procentais. Kaip tokių medžiagų pavyzdys gali būti skystas amoniakas, įvairūs organiniai junginiai arba kietos medžiagos, tokios kaip metalų hidridai, kompleksiniai hidridai, organiniai hidridai, anglies turinčios medžiagos, ceolitai ir metalo-organiniai karkasai. Dėl didelės vandenilio talpos (pavyzdžiui, NH_3 (17,7 masės %), NaBH_4 (10,7 masės %) ir $\text{N}_2\text{H}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (8 masės %)) šios medžiagos laikomos perspektyviomis vandenilio saugojimui ir naudojimui nešiojamuose kuro elementuose. Tačiau natrio borhidridas laikomas viena tinkamiausių medžiagų vandeniliui saugoti. Vandenilio susidarymas iš šio hidrido aprašomas šia reakcija:



Šio darbo tikslas buvo suformuoti $\text{Ni}_{85}\text{Mo}_{15}/\text{Cu}$, $\text{Ni}_{80}\text{Co}_{20}/\text{Cu}$, $\text{Ni}_{85}\text{W}_{15}/\text{Cu}$ ir $\text{Ni}_{88}\text{Mo}_{11}\text{W}_{11}/\text{Cu}$ katalizatorius, juos charakterizuoti ir įvertinti jų katalizines savybes natrio borhidrido hidrolizės reakcijai. Tiriamos dangos buvo nusodintos ant Cu pagrindo paprastu cheminiu nusodinimo metodu, naudojant morfolino boraną kaip reduktorių. Buvo gauti nikelio pagrindo katalizatoriai, kuriuose Ni procentinis kiekis svyruoja nuo 80 iki 88 masės procentų, o likusią procentinę dalį sudaro Mo, Co, W arba Mo ir W kartu. Katalizatorių paviršiaus morfologija, struktūra ir cheminė sudėtis buvo ištirta naudojant skenuojančią elektronų mikroskopiją (SEM), Rentgeno spindulių energijos dispersinę analizę (EDS) ir indukciškai susietos plazmos optinės emisijos spektroskopiją (ICP-OES). Natrio borhidrido hidrolizės reakcijos katalizinis aktyvumas buvo įvertintas išmatuojant vandenilio kiekį, išsiskiriantį iš katalizuojamos natrio borhidrido hidrolizės reakcijos.

Darbo metu buvo suformuoti visi minėti katalizatoriai. Buvo ištirta jų morfologija ir struktūra. Nustatyta, kad paruoštos dangos sudarytos iš įvairaus dydžio dalelių, kurios susijungia į ovalo formos aglomeratus. Ištirta, kad dviejų komponentų $\text{Ni}_{80}\text{Co}_{20}$ danga pasižymėjo didžiausiu kataliziniu aktyvumu. Nustatyta, kad šio katalizatoriaus H_2 išsiskyrimo greitis 70°C temperatūroje yra 8,30 ml/min, o apskaičiuota aktyvacijos energija yra lygi 57,82 kJ/mol.

***N*-Pakeistų 2-((4-(benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)fenil)(Boc)amino)acetamidų, skirtų amiloidų agregacijos moduliatorių paieškai, sintezė**

Tadas Vasiliauskas, Ieva Žutautė

Vilniaus Universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

α -Sinukleinas yra nedidelės molekulinės masės baltymas randamas centrinės ir periferinės nervų sistemos neuronuose. Parkinsono ligos atveju, α -sinukleinas įgyja β klosčių konformaciją, kuri, kartu su kitais monomerais, sudaro oligomeras ir amiloidų fibriles. Tokių amiloidų agregatų sankaupa yra susijusi su neuronų funkcijos sutrikimu. α -Sinukleino agregaciją inhibuojančių junginių paieška yra vienas iš būdų ieškant ligos gydymo būdų. Tokie junginiai gali būti mažos molekulinės masės medžiagos ar sudėtingi vaistiniai mišiniai. Neseniai atlikti tyrimai parodė, kad naujos struktūros imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino dariniai veikia α -sinukleino agregaciją ir gali būti tiriami kaip potencialūs amiloidų modulatoriai.

Šio tyrimo tikslas yra susintetinti skirtingai modifikuotus imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinus. Pradinis junginys, 4-jodanilinas, veikiamas di-tretbutildikarbonatu. Gautas karbamatas alkilinamas etilbromacetatu. Vietoj jodo *Sonogashira* metodu prijungiamas propargilo alkoholis, kurį paskui brominant pakeičiama hidroksigrupė. Nukleofilinio pakeitimo metu bromas keičiamas 2-tiobenzimidazolu. Sekančioje stadijoje ciklizacijos metu suformuojamas imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinas. Šio darbo metu gauta junginio esterio grupė modifikuojama į amidus.

Šio tyrimo metu buvo susintetinta eilė *N*-pakeistų 2-((4-(benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)fenil)(Boc)amino)acetamidų. Junginiai bus toliau tiriami, siekiant nustatyti jų veiksmingumą moduliuojant amiloidų agregaciją.

Liuminescencinių YAG: Yb³⁺, Er³⁺ 3D mikrostruktūrų gamyba taikant lazerinę litografiją ir kalcinaciją

**Robertas Virkėtis¹, Artūr Harnik², Mangirdas Malinauskas², Greta Merkininkaitė¹,
Simas Šakirzanovas¹**

¹Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

²Lazerinių tyrimų centras, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas

Pastaraisiais dešimtmečiais adityviosios gamybos technologija sulaukė didelio susidomėjo pramonėje ir moksle dėl galimybės greitai fabrikuoti sudėtingos formos 3D objektus. Dvifotonės polimerizacijos metodu galima gaminti polimerinius mikrodarinius, kurių elementų matmenys siekia šimtų nanometrų dydžius. 3D polimerizacijai naudojant metaloorganines dervas po to gautus hibridinius mikroobjektus termiškai apdorojant pagaminamos keraminės 3D mikrostruktūros. Šio tyrimo tikslas yra taikant dvifotonės polimerizacijos metodą ir atspausdintų hibridinių polimerinių objektų kalcinaciją pagaminti YAG: Yb³⁺, Er³⁺ 3D mikrostruktūras, pasižyminčias aukštyne liuminescencija.

Zolių-gelių metodu buvo susintetintas dvifotonei polimerizacijai tinkamas metaloorganinis YAG: Yb³⁺, Er³⁺ pirmtakas. Polimerinės 3D mikrostruktūros buvo pagamintos naudojant „NanoFactory“ (UAB „Femtika“) femtosekundinio lazerio litografinę sistemą. Spausdinimui naudotas 144 fs impulsų lazeris, 517 nm bangos ilgis (antroji harmonika), 76 MHz pasikartojimo dažnis ir Mitutoyo M Plan Apo HR 50x / 0,75 objektyvas. Siekiant nustatyti optimalius spausdinimo parametrus, buvo spausdinami „narvų“ masyvai, keičiant skenavimo greitį ir lazerio spinduliuotės galią. Po spausdinimo pagaminti 3D objektai buvo ryškinami etanolyje, pašalinant nesupolimerizuotą dervą, ir po to kalcinuojami ore 1500 °C temperatūroje 1 valandą (temperatūros kėlimo greitis: 1 °C/min iki 800 °C ir 2 °C/min iki 1500 °C).

Skenuojančiosios elektroninės mikroskopijos tyrimai patvirtino polimerinių 3D mikrodarinių formavimąsi ir parodė, kad po kalcinacijos 3D mikroobjektai išlaiko savo formą, o kraštinės susitraukimas siekia ≈22 %. Rentgeno spindulių energijos dispersijos analizė parodė, kad metalo jonai yra tolygiai pasiskirstę keraminiuose 3D mikrodariniuose. Atlikta miltelių rentgeno spindulių difrakcinė analizė patvirtino Y₃Al₅O₁₂ (COD 96-431-2143) kristalinės fazės susidarymą.

Terminių anomalijų Pietryčių Baltijos regione sąsajos su atmosferos cirkuliacija

Vaiga Vyšniauskienė¹, Gintautas Stankūnavičius²

¹Valstybinis mokslinių tyrimų institutas Gamtos tyrimų centras

²Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Geomokslų institutas

Šiame tyrime atlikome oro masių savybių ir jų kaitos analizę terminių anomalijų metu Pietryčių Baltijos regione. Jos buvo susietos su atmosferos cirkuliacija naudojant Hess-Brezovsky (toliau – HB) klasifikaciją. Tiriamasis laikotarpis apėmė 70 metų, nuo 1951 m. iki 2020 m. Darbe naudojami duomenys iš ERA5 pakartotinės analizės archyvo. Terminės anomalijos nustatytos naudojant visos teritorijos (regiono koord. 53.75°– 56.5° š. pl. ir 21° – 26.75° r. ilg.) vidutinę paros oro temperatūrą 2 metrų aukštyje. Buvo tiriamos tik kalendorinės vasaros ir žiemos sezonų anomalijos, kurių ribinės vertės išskirtos pagal 10 ir 90 procentiles. Klimato kaitos vertinimui, buvo atliktas pirmojo (1951-1985 m.) ir antrojo (1986-2020 m.) periodo atmosferos parametrų palyginimas.

Atmosferos cirkuliacijos tipų (CT) dažnio analizė parodė vyraujančius tipus, kurie duotajame regione pirmo periodo metu lėmė ne mažiau 70% anomaliai šiltų arba šaltų atvejų tiriamais sezonais. Tokių CT vasaros šilumos anomalijų metu nustatyta 12, o anomaliai vėsioomis dienomis – 11. Žiemos šilumos anomalijų metų vyraavo 6 CT, o šalčio – 13. Antrame periode tų pačių CT lemtų terminių anomalijų dalis padidėjo 4% -14%. Dažniausiai vasarą šilumos anomalijas lėmė BM (Vidurio Europos balnagūbris) ir TRW (Vakarų Europos slėnis) tipai, anomaliai vėsioomis dienomis dažniau vyraudavo WZ (Vakarinis cikloninis) ir NWZ (Šiaurės vakarų cikloninis) tipai. Žiemą šilumos anomalijas daugiausiai lėmė WZ tipas, o šalčio - HFA (Fenoskandijos anticikloninis) ir BM tipai.

Antruoju klimatiniu periodu (lyginant su pirmuoju) anomaliai šiltomis dienomis vasarą regiono vidutinė oro temperatūra padidėjo 1.1 °C, o anomaliai vėsioomis - 0.7 °C. Žiemą anomaliai šiltomis dienomis oro temperatūra padidėjo 2 °C, o anomaliai šaltomis - 1.6°C.

Atmosferos sluoksnio storio (tarp 500 hPa ir 1000 hPa) ir nulinės izotermos aukščio vertės antrajame periode išaugo visų terminių anomalijų metu, išskyrus žiemos šalčio (pokyčiai nepasiekė $p < 0.05$ statistinio lygio). Didžiausi geopotencialaus aukščio (gpa) nuokrypio ir specifinio drėgnio pokyčiai buvo nustatyti žiemos terminių anomalijų metu. Antrajame periode anomaliai šiltomis dienomis žiemą vidutinis teigiamas gpa nuokrypis padidėjo nuo 22 gpm iki 54 gpm. Anomaliai šaltomis dienomis vidutinis neigiamas gpa nuokrypis antrajame periode sumažėjo 62 % (nuo -73 gpm iki -28 gpm). Vidutinis specifinis drėgnis padidėjo anomaliai šaltomis ir šiltomis dienomis atitinkamai 7 % ir 10 %. Vasaromis terminių anomalijų metu fiksuotas 5-6% vidutinio specifinio drėgnio padidėjimas. Pateikti kiekybiniai atmosferos parametrų pokyčiai atitinka 95% statistinį reikšmingumą, kuris buvo įvertintas naudojant Welch'o t-test metodą.

Nauji aukštos entropijos retųjų žemių aliuminio granatai

Diana Vištorskaja, Artūras Katelnikovas, Aivaras Kareiva

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Aukštos entropijos oksidai (AEO) ar daugiakomponentiniai oksidai sulaukė reikšmingo mokslininkų susidomėjimo po pirmos publikacijos apie šiuos junginius 2015 metais. Aukštos entropijos stabilizavimo principas yra to paties kiekio keturių ar daugiau elementų įvedimas į vienodas kristalinės gardelės pozicijas, tokiu būdu didinant konfigūracinę maišymosi entropiją ir slopinant entalpijos sukeltą fazių atskyrimą kietajame tirpale. Tokios daugiakomponentinės sistemos pasižymi stabilia vienfaze struktūra bei unikaliomis katijonų tarpusavio sąveikomis, kurios nulemia naujas funkcinės savybės ir plačias taikymo galimybes energijos kaupimo, katalizės, optikos bei kitose pažangiose technologijų srityse. Junginių cheminė sudėtis bei sintezės metodas turi įtakos aukštos entropijos oksidų funkcinėms savybėms.

Itrio aliuminio granatas ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, YAG) išsiskiria plačiu optinio skaidrumo spektro intervalu, puikiu terminiu ir cheminiu stabilumu, todėl yra plačiai naudojamas kaip liuminoforų kristalinė matrica. Bendroji granatų formulė yra $\text{A}_3\text{B}_2\text{C}_3\text{O}_{12}$, kur A, B, C žymi katijonus, užimančius tris skirtingas padėtis, O – deguonies anijonas. A pozicijoje esantys itrio(III) jonai gali būti keičiami įvairiais retųjų žemių elementais, o B ir C pozicijose esantys aliuminio(III) jonai – pereinamųjų metalų jonais. Toks struktūrinis lankstumas leidžia įterpti didelius kiekius lantanoidų jonų be koncentracijos gesinimo, todėl YAG pagrindo medžiagos yra ypač perspektyvios daugiaspalvių fosforų, kietojo kūno lazerių ir scintiliatorių kūrimui.

Šiame darbe naujos cheminės sudėties aukštos entropijos retųjų žemių aliuminio granatai buvo susintetinti zolių-gelių metodu 1000 °C temperatūroje. Šis metodas pasirinktas dėl galimybės žemose temperatūrose gauti homogeniškas, didelio fazinio grynumo daugiakomponentines sistemas. Be to, ši sintezė iki šiol nebuvo taikyta YAG pagrindu sukurtų aukštos entropijos oksidų gavimui. Gautų mėginių struktūra buvo ištirta Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) ir Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopijos (FTIR) metodais, morfologija analizuota naudojant skenuojančią elektroninę mikroskopiją (SEM), o optinės savybės įvertintos užrašant emisijos ir sužadinimo spektrus.

Poras formuojančių toksinų pažaidos masto fosfolipidiniams dvisluoksniams įvertinimas naudojant pradinį efektyvų defektų tankį

Gerda Žižiūnaitė, Aušra Valiūnienė

Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas

Ant kietų substratų per molekulinis inkarus imobilizuojami fosfolipidiniai dvisluoksniai (angl. tethered bilayer lipid membranes, tBLM) naudojami kaip platformos, skirtos ląstelių membranų savybėms tirti bei sąveikoms su aplinka, pvz., transmembraniais baltymais, įvertinti. Kaip molekuliniai inkarai dažnai naudojami silanų savitvarkiai monosluoksniai, suteikiantys lipidiniam dvisluoksniui fluidiškumą. tBLM ypač aktualūs kuriant biologinius jutiklius poras ląstelės membranoje formuojančiams toksinams. Tokių toksinų, pvz. α -hemolizino, veikimo principas remiasi atisradusiu nekontroliuojamu jonų judėjimu per toksino sukurtas membranų pažaidas, dėl to vyksta ląstelės lizė. tBLM savybių pokyčiai, pvz. dvisluoksnių defektiškumas, storis, dvigubo elektrinio sluoksnio talpa, į fosfolipidinį dvisluoksnį įsiterpiančiam toksinui ir yra tokio jutiklio analitinis atsakas. Tokie pokyčiai gali būti stebimi įvairiais metodais, pvz. elektrocheminio impedanso spektroskopija (EIS). EIS patogi, nes yra greitas metodas ir nereikalauja griežtų eksperimentinių sąlygų, pvz. vakuumo ar aukštos temperatūros, netinkamų sistemos stabilumui išlaikyti. Galimybė greitai fiksuoti spektrus ypač aktuali tiriant porų formavimosi kinetiką. Didelė problema tBLM tyrimuose yra prastos sistemos savybių atsikartojamumas. Pagrindinės to priežastys – dėl substrato šiurkštumo bei stochastiškos savitvarkio monosluoksnio ir fosfolipidinio dvisluoksnio formavimosi prigimties atsirandantis tBLM heterogeniškumas. Šio darbo pagrindinis tikslas – rasti koreliaciją tarp pradinių toksino nepaveiktų tBLM savybių bei toksino pažaidos greičio. Tada, net esant prastam tBLM savybių atsikartojamumui galėtų būti formuojamas jutiklis, kadangi žinant tBLM pradines savybes toksino pažaidos mastą būtų galima nuspėti.

Tyrime buvo suformuota sistema, sudaryta iš fluoru legiruotu alavo oksidu (FTO) dengtos stiklo plokštelės, silanų monosluoksnio, sudaryto iš aliltrichorosilano (ATS) bei trichloro(3-(oktadeciltio)propil)silano (TOPS), ir fosfolipidinio dvisluoksnio, suformuoto iš vezikulių, kurias sudaro 40 % cholesterolio ir 60 % 1,2-dioleoil-sn-glicerio-3-fosfocholino. Greitosios Furjė transformacijos elektrocheminio impedanso matavimai, leidžiantys spektrus gauti per kelias sekundes, buvo naudojami alfa-hemolizino įsiterpimui į membraną stebėti. Duomenys apdoroti naudojantis matematiniu algoritmu, leidžiančiu impedanso duomenis paversti defektų tankio tikimybės funkcija $P(N_{def})$. Kadangi norint apskaičiuoti $P(N_{def})$ reikia nurodyti pomembraninio vandens rezervuaro, susidarančio dėl molekulinų inkarų, varžą (ρ_{sub}), o iš EIS ji negali būti nustatyta, darbe įvestas įvestas „efektyvus defektų tankio“ terminas, gautas integravus $P(N_{def})$ funkciją apskaičiuotą priimant prielaidą, kad visiems tBLM mėginiams ρ_{sub} lygi $31,600 \Omega \cdot \text{cm}$ – tokia vertė nurodoma literatūroje tBLM, suformuoto ant aukso substrato ir buvo nustatyta atominės jėgos mikroskopija. Darbo metu nustatytos tiesinės priklausomybės tarp pradinio toksinu nepaveiktos tBLM ir 100 nm alfa-hemolizino paveiktos tBLM efektyvaus defektų tankio esant skirtingiems inkubacijos toksinu laikams (5, 10, 30 ir 60 min.).

Photoredox manifold for dehydrogenative coupling using protons as oxidants

Jonas Žurauskas¹, Paulius Vaickūnas¹, Gustautas Snarskis², Barbara Chatinowska¹, Nojus Radzevičius¹, Gediminas Kreiza³, Steponas Raišys³, Mantas Šimėnas⁴, Vidmantas Kalendra⁴, Kęstutis Zakarauskas⁵, Karolis Kazlauskas³, Edvinas Orentas¹

¹Department of Organic Chemistry, Vilnius University

²Biomatter, Vilnius, Lithuania

³Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University

³Institute of Photonics and Nanotechnology, Vilnius University

⁴Laboratory of Combustion Processes, Lithuanian Energy Institute

The direct coupling of two unfunctionalized molecules under mild conditions embodies an ideal in synthetic chemistry. In this study, we report a metal-free photocatalytic process for arene C-H functionalization that employs an acridinium-type catalyst and produces dihydrogen as the only by-product. Throughout the catalytic cycle, the catalyst acts as an oxidizing agent, a hydrogen atom transfer agent, and a proton-reducing agent, enabling a cross-dehydrogenative transformation without the need for external oxidants. The reaction is conveniently performed using visible light, and the high oxidation potential of the catalyst allows it to engage even electron-deficient arene substrates. The catalytic mechanism disclosed herein can become a general logic for developing various cross-dehydrogenative reactions adaptable for pharmaceutical and material sciences (Žurauskas et al., 2023)

Reference

Žurauskas, J., Boháčová, S., Wu, S., Butera, V., Schmid, S., Domański, M., Slanina, T., & Barham, J. P. (2023). Electron-poor acridones and acridiniums as super photooxidants in molecular photoelectrochemistry by unusual mechanisms. *Angewandte Chemie International Edition*, 62, e202307550.



eISSN: 3030-0312
© Vilniaus universitetas