



CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY 2025

Student Scientific Conference



May 9, 2025
NFTMC, Saulėtekio al. 3,
Vilnius



Klaipėdos
universitetas



CENTER
FOR PHYSICAL SCIENCES
AND TECHNOLOGY



Chemistry and Chemical Technology 2025

Student Scientific Conference

Scientific committee

Doc. dr. Lina Mikoliūnaitė | VU (chairwoman)

Prof. dr. Aldona Beganskienė | VU

Doc. dr. Živilė Stankevičiūtė | VU

Doc. dr. Inga Grigoravičiūtė | VU

Doc. dr. Vaida Kitrytė-Syrpa | KTU

Prof. dr. Vytautas Getautis | KTU

Prof. dr. Saulius Grigalevičius | KTU

Doc. dr. Vilija Kederienė | KTU

Dr. Tadas Prasauskas | KTU

Dr. Žilvinas Kryževičius | KU

Prof. dr. Audronė Žukauskaitė | KU

Organizing committee

Dr. Lina Mikoliūnaitė | VU (chairwoman)

Dr. Greta Inkrataitė (secretary) | VU

Dr. Živilė Stankevičiūtė | VU

Dr. Inga Grigoravičiūtė | VU

Dr. Julija Grigorjevaitė | VU

Dr. Indrė Misiūnaitė-Vaškevičienė | VU

Dr. Anton Popov | VU

Dr. Agnė Kizalaitė | VU

PhD stud. Eglė Ežerskytė | VU

PhD stud. Gytautė Sirgėdaitė | VU

PhD stud. Justinas Januškevičius | VU

Copyright © 2025 Justinas Januškevičius, Lina Mikoliūnaitė, Živilė Stankevičiūtė. Published by Vilnius University Press.

This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Licence, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

ISSN 2538-7332 (digital), DOI <https://doi.org/10.15388/CCT.2025>





Chemistry and Chemical Technology 2025

Student Scientific Conference

Sponsors



Organizers



Vilnius
University





Chemistry and Chemical Technology 2025

Student Scientific Conference

CONFERENCE PROGRAMME

May 9th

Venue: National Center for Physical Sciences and Technology, Saulėtekio Ave. 3, Vilnius.

Time	Speaker	Title of the Presentation
10:00–10:50	Registration	
11:00–11:05 (A101)	Welcoming Speech by Prof. (HP) Dr. Aldona Beganskienė, Director of the Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University	
11:05–11:10 (A101)	Welcoming Speech by Dr. Karolis Stašys, Head of the Innovation and Technology Division, Centre for Physical Sciences and Technology	
11:10–11:30 (A101)	Prof. Habil. Dr. Gediminas Niaura Institute of Chemical Physics, Vilnius University	Recent Progress in Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS)
11:30–11:50 (A101)	Dr. Maab Elsheikh Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University	Effects of Interconnected Pores in Carbonate Apatite Blocks on Bone Regeneration
11:50–12:10 (A101)	Dr. Dovydas Karoblis Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University	Sol-Gel Synthesis: from Basics to Practical Application
12:10–12:50	Lunch Break	
12:50–13:00	Distribution to Seminars Rooms	
13:00–15:40	Presentations in Sections	
15:40–16:00 (A101)	Awards for the Best Presentations and Closing of the Conference	

Analytical and Environmental Chemistry, Geochemistry Physical Chemistry

Seminar Room: E143

dr. Inga Gabriūnaitė, dr. Agnė Kizalaitė

13:00–13:10	Madiha Ashraf	SYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES USING BY BIOSYTHESIS METHOD IN HYPERICUM PERFORATUM L
13:10–13:20	Paulina Bučinskaitė	NUOTEKŲ, UŽTERŠTŲ Ni, Zn IR Fe METALAIŠ, HOMOGENINĖ KRISTALIZACIJA TAIKANT VERDANČIO SLUOKSNIO TECHNOLOGIJĄ
13:20–13:30	Shovkat Gojaeva	THE ANALYSIS OF AIR FILTER MATERIAL SUSTAINABILITY USING LIFE CYCLE ASSESSMENT MODELING
13:30–13:40	Leonora Kirklytė	VARIO IR CINKO ŠALINIMO IŠ PRAMONINIŲ NUOTEKŲ TAIKANT CHEMINĮ METALŲ NUSODINIMĄ EFEKTYVUMO VERTINIMAS
13:40–13:50	Beatričė Kulikauskaitė	DEVELOPMENT OF A MICROBIAL BIOFUEL CELL USING BIOCOMPATIBLE NANOCOMPOSITES
13:50–14:00	Aistis Melnikas	BISMUTH SULFIDE THIN FILM SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION USING L-CYSTEINE AS A NOVEL SULFUR SOURCE
14:00–14:10	Gabrielius Mockus	CONSTRUCTION AND IMPLEMENTATION OF MACHINE LEARNING INTERATOMIC POTENTIALS FOR H ₃ PO ₄ SYSTEMS
14:10–14:20	Emilija Mockutė	KETVIRTINIO NUOTEKŲ VALYMO EFEKTYVUMO VERTINIMO REALIU LAIKU GALIMYBIŲ TYRIMAI
14:20–14:30	Mindaugas Oksas	NANOSTRUCTURIZATION OF BARE GOLD ELECTRODES FOR BIOFUEL CELL APPLICATIONS: DROP-CASTED NANOPARTICLES VS ELECTROCHEMICALLY FORMED SURFACES
14:30–14:40	Rugilė Raudžiūtė	FERMENTACIJOS TAIKYMAS AUGALŲ POŽEMINĖS DALIES BIOLOGIŠKAI VEIKLIŲ MEDŽIAGŲ IŠGAVOS PADIDINIMUI
14:40–14:50	Vasaris Statkevičius	MANGANESE COATINGS: TEMPERATURE INFLUENCE ON ELECTROCHEMICAL DEPOSITION
14:50–15:00	Henry Johnson Chiemeziem Omekara	OPTIMISATION OF STEAM METHANE REFORMING FOR ECONOMIC AND ENVIRONMENTAL PERFORMANCE
15:00–15:10	Aistis Melnikas	GREEN SEMICONDUCTORS: SYNTHESIS AND ANALYSIS OF INDIUM SULFIDE THIN FILMS

**Biochemistry and Biotechnology
Pharmaceutical Chemistry and Cosmetic Chemistry
Food Technology, Agrochemistry**

Seminar Room: A101

dr. Greta Merkininkaitė, Justinas Januškevičius

13:00–13:10	Gabija Aleksaitytė	SKYSTŲ RIŠIKLIŲ ĮTAKA KIETŲJŲ ORGANINIŲ TRAŠŲ GRANULIAVIMUI IR SAVYBĖMS
13:10–13:20	Silvija Ambrazevičiūtė	ELEKTROCHEMOTERAPIJOS IR GENŲ TERAPIJOS KONCEPTO VYSTYMAS IN VITRO, PANAUDOJANT LAŠTELIŲ ELEKTRINIO ĮJAUTRINIMO FENOMENĄ
13:20–13:30	Rugilė Bašinskaitė	DVISLUOKSNĖS POLIMERINĖS MEMBRANOS FUNKCINEI KOSMETIKAI
13:30–13:40	Vanesa Čereškaitė Eglė Maslauskaitė	TRAŠŲ TIRPUMUI REGULIUOTI SKIRTŲ DANGŲ GAVIMAS IR SAVYBĖS
13:40–13:50	Eidvyklė Gasiulytė	POLIMERINIS KARKASAS SKIRTAS AUGLIO ANT LUSTO PLATFORMOS TYRIMAMS
13:50–14:00	Daniil Kaminskyi	CHEMICAL SYNTHESIS AND CATABOLISM OF N,O-METHYLATED PURINES
14:00–14:10	Samuel Kosoko	ELECTRICALLY CONDUCTING POLYMER HYDROGEL FOR SMART DICLOFENAC-SODIUM DELIVERY: FORMULATION, CHARACTERIZATION, AND RELEASE KINETICS
14:10–14:20	Ugnė Mamonaitė	FERMENTINĖS HIDROLIZĖS PROCESO PARAMETRŲ OPTIMIZAVIMAS, SIEKiant PADIDINTI BIOLOGIŠKAI AKTYVIŲ JUNGINIŲ EKSTRAKCIJOS EFEKTYVUMĄ IŠ JUODŲJŲ SERBENTŲ IŠSPAUDŲ
14:20–14:30	Vaida Mankutė	OBUOLIŲ MILTELIŲ IR KSANTANO DERVOS ĮTAKA KEKSIUKŲ BE GLITIMO KOKYBEI
14:30–14:40	Tabita Maryam	EVALUATION AND COMPARISON OF ANTIOXIDANT AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY IN LAVENDER AND SAGE CALLUS CULTURES IN VITRO
14:40–14:50	Anusiya Panneerselvam	CELL FATE DETERMINATION POST-ELECTROPORATION: UNVEILING THE IMPACT OF INTRACELLULAR MOLECULE LEAKAGE
14:50–15:00	Hamidreza Sahaleh	ORGAN-ON-A-CHIP: REVOLUTIONIZING DRUG DISCOVERY AND CANCER RESEARCH
15:00–15:10	Johnson Emmanuel Sharpe	OPTIMIZING PLATING TECHNIQUE FOR DIFFERENT BACTERIAL STRAINS

Inorganic Chemistry and Technology

Seminar Room: D401

dr. Inga Grigoravičiūtė, dr. Greta Inkrataitė

13:00–13:10	Paula Baltaševičiūtė	KRŪVININKŲ DINAMIKA 2D/3D PEROVSKITUOSE
13:10–13:20	Laura Gliaudytė	ANTIBAKTERINIŲ TINKŲ SU SLUOKSNIUOTAIŠ DVIGUBAIS HIDROKSIDAIŠ KŪRIMAS IR APIBŪDINIMAS
13:20–13:30	Ričardas Kleinauskas	AMORFINIO TiO ₂ PRIEDO ĮTAKA SINTETINIO GIROLITO STRUKTŪROS STABILUMUI HIDROTERMINĖMIS SĄLYGOMIS
13:30–13:40	Evaldas Kvietkauskas	ELEKTROCHROMINIO ELEMENTO BE ITO SAVYBIŲ TYRIMAS
13:40–13:50	Pranga Prava Mandal	PREPARATION OF Sm ³⁺ IONS DOPED MgAl ₂ O ₄ BY SOL-GEL POLYACRYLAMIDE SYNTHESIS
13:50–14:00	Mindaugas Matijūnas	BIOLOGICAL HEAVY METAL FILTER UTILIZING THE PROTOZOAN TETRAHYMENA THERMOPHILA BIOACCUMULATION PROPERTIES
14:00–14:10	Neringa Matutytė	KAVOS TIRŠČIŲ IR VANDENS KIEKIO ĮTAKA B-PUSHIDRAČIO GIPSO STIPRIUI GNIUŽDANT
14:10–14:20	Nerija Ričkutė	YAG IR LuAG GRANATŲ, LEGIRUOTŲ CHROMU, LIUMINESCENCINĖS SAVYBĖS: Cr ³⁺ KONCENTRACIJOS ĮTAKA
14:20–14:30	Gustė Rudaitytė	VARIO RAŠALŲ IR DAŽŲ STABILIZAVIMAS 2,5-HEKSANDIOLIU
14:30–14:40	Evaldas Sutkus	STRUKTŪRINĖS TEKSTILĖS PAVIRŠIAUS ĖSDINIMO PARAMETRŲ OPTIMIZAVIMAS IR PANAUDOJIMO GALIMYBIŲ TYRIMAS
14:40–14:50	Viktorija Vrubliauskaitė	OPTIMIZING OPTICAL AND MAGNETIC PROPERTIES AT THE NANOSCALE: A STRATEGY FOR BIMODAL NANOPROBES
14:50–15:00	Simona Bendžiūtė	RADIOCHROMINIO BARIO CHLORAPATITO SINTEZĖ LYDYTŲ DRUSKŲ METODU

Organic Chemistry		
Seminar Room: E302		
dr. Rita Bukšnaitienė, dr. Jelena Dodonova-Vaitkūnienė, dr. Vilija Kederienė		
13:00–13:10	Aistė Drūtytė	OKSADIAZOLO DARINIŲ, TURINČIŲ PIRIDINO PAGRINDĄ, SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAI
13:10–13:20	Paulina Družaitė	DEGRADATION REACTIVE BLACK 5 DYE IN WATER VIA PERSULFATE-ACTIVATED Ni-Cu CATALYSTS
13:20–13:30	Gabija Griškonytė	REZORCINOLIŲ JUNGIMO PER SIEROS ATOMĄ SU AZAHETEROCIKLAIS SINTEZĖS KELIŲ TYRIMAS
13:30–13:40	Fausta Kairytė	ETILO 2-(2-(2H-BENZIMIDAZO[2,1-B][1,3]TIAZIN-4-IL)FENOKSI)ACETATO IR ETILO 2-(2-(7H-IMIDAZO[2,1-B][1,3]TIAZIN-5-IL)FENOKSI)ACETATO SINTEZĖ IR MODIFIKAVIMAS
13:40–13:50	Guostė Kaleininkaitė	2,1,3-BENZOTIADIAZOLO PAGRINDO SAVITVARKIUS MONOSLUOKSNIUS FORMUOJANČIŲ JUNGINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS
13:50–14:00	Kamilė Klimašauskaitė	NAUJŲ 2-PIRAZOLILBENZIMIDAZOLO DARINIŲ SINTEZĖ
14:00–14:10	Arnas Kovševič	CIKLINIŲ INDOLO DARINIŲ SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAI
14:10–14:20	Augustas Kučinskas	SYNTHESIS OF 1,3,4-THIADIAZOLE AMIDE DERIVATIVES
14:20–14:30	Martyna Paulauskaitė	2-ALKENILTIOIMIDAZOLŲ ELEKTROFILINĖS CIKLIZACIJOS REAKCIJOS, SKIRTOS IMIDAZO[2,1-B][1,3]TIAZINŲ SINTEZEI
14:30–14:40	Guoda Pranaitytė	3-[(2,4-DIFLUORFENIL)AMINO]PROPANO RŪGŠTIES DARINIŲ SINTEZĖ IR CHEMINĖS SAVYBĖS
14:40–14:50	Simona Talačkaitė	5-CHLORPIRIDIN-2-IL FRAGMENTŲ TURINČIŲ N-PAKEISTŲ KARBOHIDRAZIDŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIO AKTYVUMO VERTINIMAS
14:50–15:00	Agnė Užupytė	IMODAZOPIRAZOLOOKSAZEPINAI: POTENCIALIAI BIOLOGIŠKAI AKTYVIŲ MOLEKULIŲ SINTEZĖ
15:00–15:10	Tadas Vasiliauskas	3-ARILPROPARGILALKOHOLIŲ SINTEZĖ AMILOIDŲ AGREGACIJOS MODULIATORIŲ KŪRIMUI

Organic Chemistry, Polymer Chemistry, Petroleum Chemistry Physical Chemistry		
Seminar Room: E301		
dr. Ieva Žutautė, Eglė Ežerskytė		
13:00–13:10	Reda Bernotavičiūtė	PIROLIZĖS TEMPERATŪROS ĮTAKA MIKROPLASTIKŲ, ESANČIŲ MIESTO NUOTEKŲ DUMBLE, IDENTIFIKAVIMO TIKSLUMUI NAUDOJANT Py-GC-MS
13:10–13:20	Sofija Dervinytė, Beatričė	TERMOJAUTRIŲ B-CIKLODEKSTRINO IR POLI(N-IZOPROPILAKRILAMIDO) KOPOLIMERŲ SINTEZĖ
13:20–13:30	Aurimas Marapolskis	9,10-DIHDROAKRIDANILFRAGMENTUS TURINČIŲ ELEKTROAKTYVIŲ ORGANINIŲ SPINDUOLIŲ SINTEZĖ IR SAVYBĖS
13:30–13:40	Justina Mikučiūnaitė	IZOTIURONIO DRUSKŲ, TURINČIŲ FOSFONRŪGŠTIES ARBA KARBOKSIRŪGŠTIES INKARINĘ GRUPĘ, SINTEZĖ IR TAIKYMAS PEROVSKITINIJOSE SAULĖS ELEMENTUOSE
13:40–13:50	Kajus Momgaudis	SILICIO PAVIRŠIUJE SUFORMUOTŲ FOSFOLIPIDINIŲ MEMBRANŲ ELEKTROCHEMINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS
13:50–14:00	Emilija Morkvėnaitė	TERMOJAUTRŲS DEKSTRINO DARINIAI: SINTEZĖ, SAVYBĖS IR TAIKYMO GALIMYBĖS
14:00–14:10	Rashad Naghizade	DERIVATIVES OF 2,7-DIBROMO-9,9-DIMETHYL-9H-FLUORENE and 2,7-DIBROMO-9,9-SPIROBIFLUORENE AS ELECTROACTIVE MATERIALS
14:10–14:20	Ugnius Popovas	PENKTOJE PADĖTYJE CIKLINIAIS AMINAIŠ IR AMIDAIŠ MODIFIKUOTŲ 1-CHLORO-2,4-DIMETOKSIBENZENO SINTEZĖ
14:20–14:30	Viltė Šereikaitė	VITRIMERŲ, GAUTŲ IŠ AUGALINIO ALIEJAUS IR GLICEROLIO DARINIŲ, SAVYBIŲ TYRIMAI
14:30–14:40	Povilas Viltrakis	KONDENSUOTŲ OKSAZINO IR OKSAZOCINO DARINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAI
14:40–14:50	Jonas Vinciūnas	A MACHINE LEARNING MODEL FOR OPTIMIZATION OF PYRROLE ELECTROPOLYMERIZATION
14:50–15:00	Sampson Akwasi Kennie Wayoe	EVALUATION OF THE EFFECTIVENESS OF USING BUCKLE ARRESTORS TO PREVENT PROPAGATION BUCKLING OF SUBSEA PIPELINES IN WEST AFRICA OIL AND GAS FIELDS

Invited speaker abstracts

EFFECTS OF INTERCONNECTED PORES IN CARBONATE APATITE BLOCKS ON BONE REGENERATION

Maab Elsheikh^{*}, Ryo Kishida, Koichiro Hayashi, Akira Tsuchiya, Masaya Shimabukuro, Kunio Ishikawa

Department of Biomaterials, Faculty of Dental Science, Kyushu University, 3-1-1 Maidashi Higashi-Ku, Fukuoka 812-8582, Japan

Bone substitutes with a porous architecture, particularly those featuring interconnected pores, significantly influence the outcome of bone regeneration [1-3]. Carbonate apatite [CO₃Ap: Ca_{10-a}(PO₄)_{6-b}(CO₃)_c] is a promising bone substitute due to its high osteoconductivity and bioresorbability [4]. Therefore, in this study, we fabricated interconnected porous CO₃Ap blocks using the setting reaction of calcium sulfate hemihydrate [CSH: CaSO₄•0.5H₂O] granules, followed by a heating treatment and a multi-step dissolution-precipitation reaction.

The crystal growth of CSH granules was initiated when the granules were mixed with water, resulting in the formation and precipitation of calcium sulfate dihydrate [CSD: CaSO₄•2H₂O] crystals on the surface of the granules. CSD crystals interlocked, bridging the granules to one another, thus forming an interconnected porous block. However, the uncontrolled growth of CSD crystals significantly clogged the pore network, negatively affecting the formation of a highly interconnected porous structure. The water content was managed using filter paper or centrifugation, resulting in the fabrication of highly interconnected porous CSD blocks.

Although CSD blocks were transformed into CaCO₃ via a dissolution-precipitation reaction, their mechanical strength remained low. To overcome this issue, the mechanical strength improved when calcium sulfate anhydrous [CSA: CaSO₄] blocks were formed by applying heat treatment to the CSD blocks. Subsequently, CaCO₃ blocks were converted into CO₃Ap through a dissolution-precipitation reaction.

The effect of the pores interconnectivity of CO₃Ap blocks on bone regeneration was evaluated by reconstructing the rabbit distal femur defect using CO₃Ap with 30% and CO₃Ap with 15% of interconnected pores. They were designated as CO₃Ap-30 and CO₃Ap-15, respectively. After 4 weeks post-implantation, new bone formed throughout CO₃Ap-30, whereas little bone was formed in the central areas of CO₃Ap-15. After 12 weeks of implantation, CO₃Ap-30 was replaced with cancellous-structured bone. In comparison, even after 12 weeks, CO₃Ap-15 remained in the defect. In conclusion, introducing highly interconnected pores can significantly promote rapid bone regeneration by allowing early bone ingrowth and material replacement with new bone.

Funding. This research was supported, in part, by the Japan Agency for Medical Research and Development under Grant Number JP20im0502004, Grant-in-Aid for Research Activity start-up (18H06295), and Grant-in-Aid for Early-Career Scientists (20K18576) from the Japan Society for the Promotion of Science.

References

1. Bobbert FSL, Zadpoor AA. Effects of bone substitute architecture and surface properties on cell response, angiogenesis, and structure of new bone. 2017, J Mater Chem B 5:6175-92.
2. Karageorgiou V, Kaplan D. Porosity of 3D biomaterial scaffolds and osteogenesis. 2005, Biomaterials 26:5474-91.
3. Hannink G, Arts JJC. Bioresorbability, porosity and mechanical strength of bone substitutes: what is optimal for bone regeneration? 2011, Injury 42: S22-5.
4. Ishikawa K. Carbonate apatite bone replacement: learn from the bone. 2019, J Ceram Soc Japan 127:595-601.

SOL-GEL SYNTHESIS: FROM BASICS TO PRACTICAL APPLICATION

Dovydas Karoblis^{1*}, Evaldas Lugauskas¹, Pranga Prava Mandal¹, Aigul Dastankyzy¹, Aivaras Kareiva¹

¹Institute of Chemistry, Vilnius University, Naugarduko 24, LT-03225, Lithuania

Many inorganic materials, such as oxides, carbides or nitrides, can be prepared by simply mixing starting materials and heating the mixture at elevated temperatures. While this method is relatively straightforward and feasible due to the availability of high temperature furnaces, it suffers from several drawbacks: it requires multiple heating and grinding steps and makes it difficult to achieve a homogeneous distribution of the starting materials due to limited mass transport. One of the synthesis methods that can overcome these difficulties is sol-gel synthesis [1]. This technique allows for atomic-level mixing of starting materials, which ensures possible formation of ternary, quaternary or even more complex structures containing more than four elements.

Sol-gel chemistry involves the creation of ceramics or inorganic polymers from solution by gradually converting liquid precursors into a sol and then into a network structure – gel. There are two types of precursors that can be used in this synthesis, namely metal alkoxides as well as hydrated metal species with small molecules, like citric acid. Many metal alkoxides are unstable in water and tend to form precipitates, which limits their practical application. For that reason, sol-gel synthesis is often conducted in aqueous solutions, using various chelating agents. Moreover, this synthesis is highly versatile, and different modifications, like sol-gel combustion or sol-gel synthesis using different monomers, can also be used.

This work focuses on the preparation of various classes of inorganic materials, including perovskites and spinel structure compounds. Three different sol-gel modifications were used to prepare these materials, namely sol-gel combustion [2], Pechini sol-gel [3, 4] and the sol-gel polyacrylamide-route. Structural, morphological and magnetic properties were characterized for all samples.

References

1. A. E. Danks, The evolution of 'sol-gel' chemistry as technique for materials synthesis, 2016, **3(2)**, 91, 91-112.
2. D. Karoblis, Novel synthetic approach to preparation of single-phase $\text{Bi}_x\text{La}_{1-x}\text{MnO}_{3+\delta}$ solid solutions, 2020, **93**, 650-656.
3. D. Karoblis, Sol-gel synthesis, structural, morphological and magnetic properties of $\text{BaTiO}_3\text{-BiMnO}_3$ solid solutions, 2020, **46.10**, 16459-16464.
4. D. Karoblis, Study of gadolinium substitution effects in hexagonal yttrium manganite YMnO_3 , 2021, **11(1)**, 2875.

RECENT PROGRESS IN SURFACE-ENHANCED RAMAN SPECTROSCOPY (SERS)

Gediminas Niaura

Department of Organic Chemistry, Center for Physical Sciences and Technology (FTMC), Saulėtekio Ave.3, Vilnius, Lithuania

Raman spectroscopy (RS) is able to provide detailed molecular level information on structure, bonding, and interactions of molecules. However, application of RS is restricted by the low sensitivity. Fortunately, several scattering intensity enhancement effects were discovered including resonance Raman scattering (RRS) and surface-enhanced Raman scattering (SERS) phenomena. In SERS, signal intensity enhancement by factors up to 10^8 (or even larger) can be achieved for molecules adsorbed or being nearby the plasmonic nanostructured metal surfaces [1]. Two main mechanisms, electromagnetic (EM) and chemical (CHEM or charge-transfer, CT) contribute to enhancement. The EM mechanism is related with amplification of electromagnetic field by excitation of localized surface plasmons in metal nanostructures, while CHEM enhancement is associated with changes in structure of molecule due to chemisorption, RRS effect or charge transfer between the molecule and the substrate [2]. Contribution from CHEM mechanism usually is lower (enhancement factor up to 10^3). SERS is able to identify molecules with rich structural information at extremely low concentrations (down to single molecule level) in various fields including (bio)sensing, catalysis, electrochemistry, biochemistry, and others. However, implementation of technique in real-world applications including biomedicine is restricted by poor reproducibility, uniformity of the substrate, stability, and reliability.

Recent progress in SERS is related with construction of novel substrates including development of 2D materials, hybrid 2D and plasmonic substrates, and nanostructures suitable for ultraviolet surface-enhanced Raman spectroscopy (UV-SERS) [3–5]. Versatility of novel 2D materials such as graphene, transition metal dichalcogenides (TMDC), black phosphorus (BP), hexagonal boron nitride (h-BN), and 2D titanium carbide or nitride (MXenes) was demonstrated [3]. These substrates demonstrated lower enhancement factor (mainly CHEM mechanism) but higher reproducibility and uniformity. Because many important biomolecules (DNA bases, aromatic amino acids, and others) absorb in UV spectral region, UV-SERS technique offers combined RRS and SERS enhancements for reliable and sensitive probing of biomolecules. Cobalt and copper nanostructures were found to be promising substrates for UV-SERS.

Acknowledgements. This work received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT). The project agreement number is S-MIP-23-30 “Magneto-plasmonic nanoparticles for UV-SERRS detection of low-molecular - weight biomarkers (MAG-UV-SERRS)”.

References

1. J. Langer, D.J. de Aberasturi, J. Aizpurua, R.A. Alvarez-Puebla, et al. // ACS Nano, 2020, **14**, 28–117.
2. A.I. Perez-Jimenez, D. Lyu, Z. Lu, G. Liu // Chem. Sci., 2020, **11**, 4563–4577.
3. O. Guselnikova, H. Lim, H.-J. Kim, A. Gorbunova, M. Eguchi, P. Postnikov, T. Nakanishi, T. Asahi, J. Na, Y. Yamauchi // Small, 2022, **18**, 2107182.
4. A. Remeikienė, I. Matulaitienė, A. Selskis, M. Talaikis, G. Niaura // Spectrochim. Acta A, 2025, **330**, 125733.
5. S. Yadav, M. Talaikis, Y.V. Ryabchikov, M. Ziegler, G. Niaura, T. Deckert-Gaudig, V. Sivakov // Adv. Optical Mater., 2025, 2500078.

Student abstracts

SKYSTŲ RIŠIKLIŲ ĮTAKA KIETŲJŲ ORGANINIŲ TRĄŠŲ GRANULIAVIMUI IR SAVYBĖMS

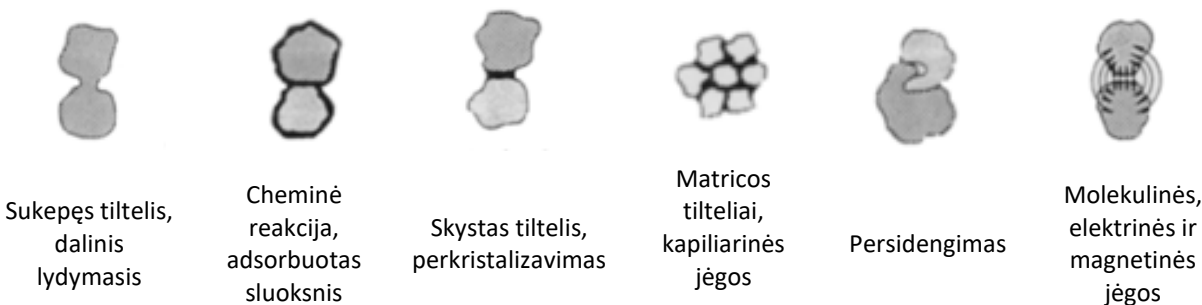
Gabija Aleksaitytė, Rasa Šlinkšienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

*el. paštas gabija.aleksaityte@ktu.edu

Sėkmingam drėgno granuliavimo procesui įvykdyti būtina naudoti skystą rišiklį, kuris užtikrintų sausų medžiagų paviršiaus drėkinimą ir aglomeraciją. Dažniausiai, netirpiose sistemose, granuliu savybės gali būti tiesiogiai siejamos su naudojamu rišikliu ir specifinėmis jo savybėmis [1, 2].

Rišiklis yra medžiaga, naudojama kitoms medžiagoms sulipinti arba sumaišyti, o skirtingi rišikliai turi skirtingus veikimo mechanizmus (1 pav.), dėl kurių birias medžiagas galima sugrąnuluoti [3].



1 pav. Skysto rišiklio sąveikos su sausų medžiagų dalelėmis mechanizmai

Šiame darbe buvo tiriama trijų rūšių skysto rišiklio – polivinilacetato emulsijos (PVAE), melasos tirpalo (MT) ir kiaušinio plakinio (KP) – įtaka organinių trąšų, gaminamų iš grikių lukštų pelenų ir neapdorotos grikių biomasės, granuliavimo procesui ir gautų granuliu savybėms: granuliu formai, granuliuometrinei sudėčiai, statiniam stipriui, pH, produkto drėgmei, ir piltiniam tankiui.

Buvo nustatyta, kad tokioms savybėms, kaip pH ar produkto drėgmė, naudoto rišiklio prigimtis arba sunaudotas jo kiekis didelės įtakos neturi. Tačiau rišiklio prigimtis ir jo kiekis daro didelę įtaką granuliuometrinei sudėčiai, granuliu stipriui, granuliu formai ir pačiam granuliavimo procesui [4].

Literatūros sąrašas

1. O. Haeusler, N. Descamps // Binder selection for continuous wet granulation: case of insoluble system. Roquette, <https://www.roquette.com/innovation-hub/pharma/technical-illustration/continuous-wet-granulation-binder-insoluble-system>.
2. A M Bouwman 1, M J Henstra, D Westerman, J T Chung, Z Zhang, A Ingram, J P K Seville, H W Frijlink // The effect of the amount of binder liquid on the granulation mechanisms and structure of microcrystalline cellulose granules prepared by high shear granulation, 2005, International Journal of Pharmaceutics. **290(1-2)**, 129 -136.
3. An Introduction to Binders in Compaction & Wet Granulation, <https://www.bepex.com/post/an-introduction-to-binders-in-compaction-wet-granulation>
4. O. Pocienė, R. Šlinkšienė // Properties and Production Assumptions of Organic Biofertilisers Based on Solid and Liquid Waste from the Food Industry, 2024, Applied Sciences, **14(21)**, 9784.

ELEKTROCHEMOTERAPIJOS IR GENŲ TERAPIJOS KONCEPTO VYSTYMAS *IN VITRO*, PANAUDOJANT LĄSTELIŲ ELEKTRINIO ĮJAUTRINIMO FENOMENĄ

Silvija Ambrazevičiūtė^{1*}, Neringa Barauskaitė-Šarkinienė¹, Paulius Ruzgys¹, Saulius Šatkauskas¹

¹ Biofizikos tyrimų grupė, Gamtos mokslų fakultetas, Vytauto Didžiojo universitetas, Universiteto g. 10, Akademija, Kauno raj., Lietuva

*a_silvija@outlook.com

Gydant organuose susidariusius navikus, didžioji kliūtis yra vaistų pernešimas į ląsteles [1]. Elektrochemoterapija tampa perspektyviu metodu pagerinti vaistų įsiskverbimą ir jų citotoksinį poveikį [2]. Tačiau elektrochemoterapija nesukelia pakankamo imuninės sistemos atsako prieš metastazes. Siekiant patobulinti šį metodą, buvo atlikti tyrimai, skirti optimizuoti elektroporacijos protokolus. Vienas atradimų – ląstelių įjautrinimas elektriniais laukais, kai po pradinio impulso ląstelės tampa jautresnės sekantiems, o tai leidžia sukurti didesnes poras ląstelių membranose ir pagerinti vaistų pernašą [3]. Be to, kartu atliekama genų transfekcija galėtų padėti sužadinti imuninį atsaką prieš navikus. Taigi šio tyrimo tikslas buvo ištirti, kokie elektroporacijos parametrai galėtų padidinti mažų molekulių ir genų pernašą į ląsteles naudojant elektrinius impulsus. Poveikis buvo vertinamas analizuojant CHO ir 4T1 ląstelių gyvybingumą, membranos pralaidumo pokyčius ir bleomicino, kalcio bei plazmidinės DNR pernašą CHO ląstelių linijoje.

Elektroporacijos eksperimentai buvo atlikti naudojant savarankiškai pagamintą elektroporacijos terpę (0,1 S/m, 270 mOsmol) ir nerūdijančio plieno elektrodus sudarius 2 mm pločio tarpą. Elektroporacijos parametrai apėmė vieną arba aštuonis didelės įtampos impulsus (100 μs trukmės) bei tiekiant papildomą impulsą po 1, 5, 10 ar 15 minučių. Impulso intensyvumas – 1,4 kV/cm. Tyrimo metu ląstelių gyvybingumas įvertintas pritaikius klonogeninį metodą, o ląstelių permeabilizacija – pagal elektropernašos metu patekusio propidžio jodido kiekį. Bleomicino ir kalcio citotoksinis poveikis vertintas atsižvelgiant į išgyvenusių ląstelių kiekį, jų gebėjimą formuoti kolonijas ir metabolinį aktyvumą. Genų transfekcijos eksperimentai atlikti su plazmide, turinčia žaliai fluorescuojantį baltymą koduojantį geną. Tokiu būdu plazmidės pasisavinimas įvertintas atsižvelgiant į susintetinto baltymo fluorescenciją.

Atlikus elektroporacijos eksperimentus, nustatyta, kad abi ląstelių linijos išlaiko pakankamą gyvybingumą, tačiau 4T1 ląstelės parodė geresnį atsparumą elektriniams laukams (88–122 %) nei CHO ląstelės (86–105 %). CHO ląstelės buvo jautresnės pradinių impulsų kiekiui, nes jų gyvybingumas statistiškai reikšmingai sumažėjo naudojant 8 pradinius impulsus ir pakartotinus po 5, 10 ir 15 min. Optimalūs elektroporacijos parametrai abiem linijoms buvo 8 pradiniai impulsai ir papildomas impulsas po 1 min., kai 4T1 ląstelės pasiekė 99,2 % membranos pralaidumą, o CHO ląstelės – 92 %. Po bleomicino elektropernašos CHO ląstelėms geriausias citotoksinis poveikis buvo pasiektas su 1 pradiniu impulsu ir papildomu po 15 min., tačiau išliko apie 20 % metabolinis aktyvumas. Kalcio jonų elektropernašos metu didžiausias citotoksinis poveikis buvo pasiektas su 8 pradiniais impulsais ir papildomu po 1 min. (98-99 % žuvusių ląstelių, metabolinis aktyvumas – 15,6 %), tačiau ląstelių metabolinis aktyvumas buvo labiau slopinamas.

Nustatyta, jog efektyviai plazmidės transfekcijai reikia didesnio kiekio pradinių impulsų. Bleomicino ir plazmidės kombinuotos pernašos metu citotoksinis poveikis buvo panašus, tačiau

efektyviausia transfekcija pasiekta su 8 pradiniais impulsais ir papildomu po 10 min. Tuo tarpu kalcio ir plazmidės pernašos metu pasireiškė efektyvus citotoksinis poveikis, bet plazmidės pernaša suprastėjo. Geriausias rezultatas pasiektas su 8 pradiniais HV ir 1 papildomu po 5 min.

Ląstelių gyvybingumo ir permeabilizacijos eksperimentai parodė, kad CHO ir 4T1 ląstelių linijos reikalauja skirtingų elektroporacijos sąlygų, siekiant pasiekti optimalų ląstelių jautrinimą ir didesnę išorinių molekulių pasisavinimą, nepadarant reikšmingos įtakos ląstelių gyvybingumui. Atliekant plazmidės ir bleomicino arba kalcio pernašą CHO ląstelėse, nustatyta, kad plazmidės ir bleomicino elektropernaša yra sėkmingesnė nei kombinuojant su kalciumu. Bendrai, elektroporacijos sąlygos pagerina citotoksinį poveikį ir efektyviau perneša abi molekules, tačiau verta atkreipti dėmesį, kad bleomicinas ne visada pakankamai sumažina CHO ląstelių metabolinį aktyvumą ir jų gebėjimą formuoti kolonijas. Šie rezultatai rodo, kad norint pasiekti geresnį efektyvumą, būtina toliau optimizuoti sąlygas, kad būtų užtikrintas efektyvus plazmidės ir vaisto pernešimas bei papildomai slopinamos likusių ląstelių gyvybinės funkcijos.

Literatūros sąrašas

- [1] I. A. Khawar ir kt. „Improving drug delivery to solid tumors: Priming the tumor microenvironment“, 2015 m. kovo 10 d., *Elsevier*. doi: 10.1016/j.jconrel.2014.12.018.
- [2] L. G. Campana ir kt., „Electrochemotherapy of superficial tumors – Current status:: Basic principles, operating procedures, shared indications, and emerging applications“, 2019 m. balandžio 1 d., *W.B. Saunders*. doi: 10.1053/j.seminoncol.2019.04.002.
- [3] J. Dermol ir kt., „Cell electrosensitization exists only in certain electroporation buffers“, *PLoS One*, t. 11, nr. 7, liep. 2016, doi: 10.1371/journal.pone.0159434.

GREEN SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SILVER NANOPARTICLES USING *HYPERICUM PERFORATUM* L. EXTRACTS

Madiha Ashraf^{1*}, Ilona Jonuškienė², Rima Stankevičienė², Neringa Petrašauskienė¹

¹ Department of Physical and Inorganic Chemistry, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

² Department of Organic Chemistry, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

*madiha.ashraf@ktu.edu

In the present study, the biosynthesis method was used to synthesize silver nanoparticles using extracts of *Hypericum Perforatum* L. plant in vivo and callus cultures in vitro. In this research, biologically active compounds in the extract functioned as reducing agents, while a silver nitrate solution served as the source of silver. *Characterization of the synthesized nanoparticles was carried out using Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) TO identify functional in the reduction and stabilization process, Scanning Electron Microscope (SEM) to determine nanoparticles morphology and size distribution, and X-ray Diffraction (XRD) analysis to confirm the crystalline nature of the AgNPs.*

In addition, to successful synthesis, the antioxidants activities including DPPH radical scavenging and ferric Reducing Antioxidant power FRAP methods, as well as antibacterial activity assessments against both Gram positive and Gram negative bacterial strains of the AgNPs

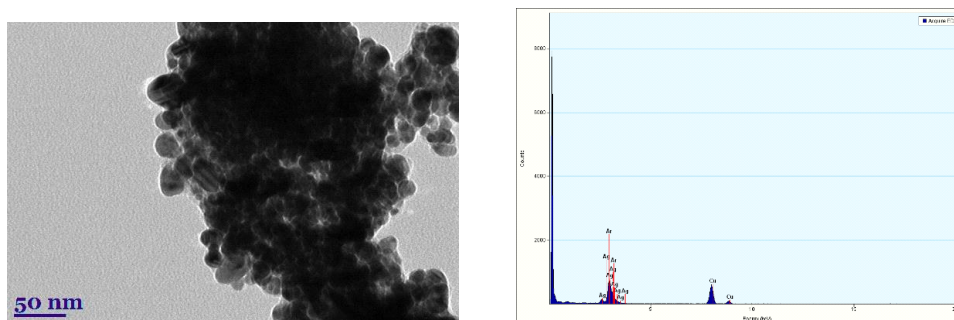


Fig. 1. Characterization of AgNPs . a) Micrograph of AgNPs by TEM microscopy. B) EDX spectra showing the presence of Ag

References.

1. Ahmed, S., Ahmad, M., Swami, B. L., & Ikram, S. (2016). A review on plants extract mediated synthesis of silver nanoparticles for antimicrobial applications: A green expertise. *Journal of Advanced Research*, 7(1), 17–28.
2. Iravani, S. (2011). Green synthesis of metal nanoparticles using plants. *Green Chemistry*, 13(10), 2638–2650.
3. Mittal, A. K., Chisti, Y., & Banerjee, U. C. (2013). Synthesis of metallic nanoparticles using plant extracts. *Biotechnology Advances*, 31(2), 346–356.

KRŪVININKŲ DINAMIKA 2D/3D PEROVSKITUOSE

Paula Baltaševičiūtė^{1,3*}, Vidmantas Jašinskas¹, Vidas Pakštas², Vidmantas Gulbinas¹, Marius Franckevičius¹

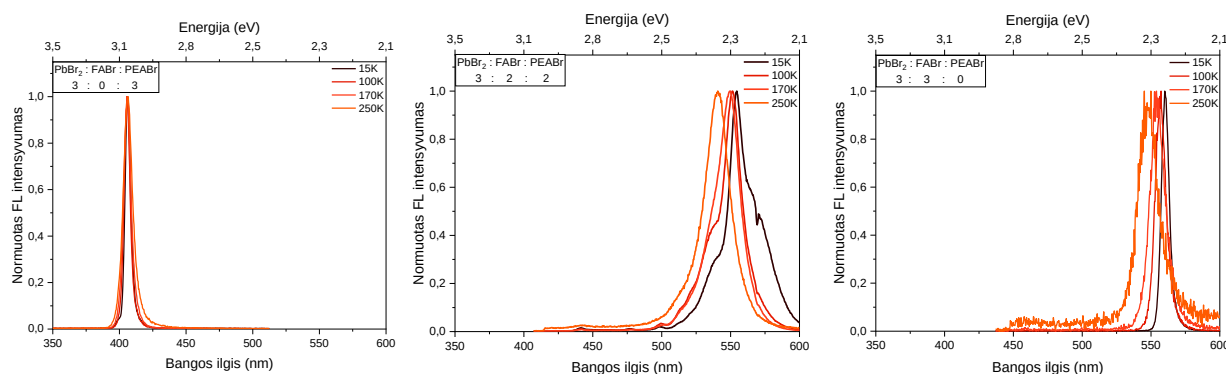
¹ Molekuliųjų darinių fizikos skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lietuva

² Struktūrinės analizės skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Lietuva

³ Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Vilniaus universitetas, Lietuva

[*paula.baltaseviciute@ftmc.lt](mailto:paula.baltaseviciute@ftmc.lt)

Per pastaruosius penkiolika metų perovskitai tapo labai populiarūs dėl savo patrauklių optoelektrinių savybių ir jų galimo pritaikymo saulės elementų, šviesos diodų bei fotodetektorių gamyboje. Šios medžiagos yra unikaliai tuo, kad keičiant jų cheminę sudėtį galima koreguoti jų savybes ir taip padaryti tinkamesnes skirtingiems taikymams [1-2]. Taip pat perovskitai gali formuotis įvairiomis struktūrinėmis formomis, įskaitant 3D, 2D ir kvazi-2D struktūras. Kiekviena jų pasižymi savita krūvio pernašos dinamika, kuri yra esminė prietaisų veikimui. Tarp dažniausiai stebimų procesų perovskituose ir kitose optoelektroninėse medžiagose galima išskirti krūvininkų migraciją ir sužadintos energijos migraciją (angl. *charge carrier migration and excitation energy migration*) [3]. Suprasti, kuris iš šių procesų dominuoja medžiagoje yra svarbu tiek fundamentaliam medžiagos supratimui, tiek prietaisų projektavimui bei optimizavimui [2]. Šiame tyrime buvo nagrinėjama, kaip keičiasi krūvininkų pernaša keičiant perovskito konfigūraciją nuo pilnai 3D iki kvazi-2D ir 2D.



1 pav. Perovskito, turinčių skirtingą A katijonų santykį, plonų plėvelių fotoluminescencijos spektrai skirtingose temperatūrose

Keičiant mažų ir didelių organinių katijonų santykį (PEA^+ ir FA^+) perovskito gardelėje, buvo susintetinti perovskitai su skirtingu katijonų santykiu. Siekiant nustatyti dominuojantį krūvininkų pernašos mechanizmą, buvo atlikti fotoluminescencijos matavimai skirtingose temperatūrose bei žadinimo-zondavimo spektroskopijos tyrimai. Grynuose 2D perovskituose (žema Ruddlesden–Popper fazė n) net ir kambario temperatūroje susiformuoja stabilūs eksitonai. Papildomų smailių ar spektrinių pokyčių nebuvimas rodo, kad sužadinti eksitonai rekombinuoja lokaliai, nes žemesnės energijos sritys 2D perovskituose nesusiformuoja. Kvazi-2D perovskituose sudarytuose iš skirtingų sluoksnių skaičių (n) turinčių fazių mišinio, emisijoje dominuoja domenai su mažiausiu draustinių energijos juostų tarpu (didžiausio n), kurie stebimi kaip labiausiai į raudoną spektro pusę pasislinkusi FL juosta. Aušinimas slopina eksitonų nukreipimo procesą

(angl. *funneling process*), todėl eksitonai / krūvininkai „įstringa“ didesnio draustinio juostos tarpo srityse ir ten rekombinuoja radiaciniu būdu, užuot migravę į žemesnės energijos sritis. Tai pasireiškia kaip atskiros FL smailės, atitinkančios fazes su skirtingu $n = 1, 2, 3$ ir t.t. Lyginant 2D, kvazi-2D ir 3D atvejus stebimas pernašos elgsenos tęstinumas: nuo stipriai surištų eksitonų, kurie lieka lokalizuoti (2D), iki hibridinių sistemų, kuriose krūvininkai pernešami į žemesnės energijos sritis, kur jiems rekombinuoti yra palankiau (kvazi-2D), iki 3D laisvo krūvininkų judėjimo gardelėje, kur eksitonams susiformuoti maža tikimybė.

Apibendrinant galima teigti, kad krūvininkų pernašos mechanizmas yra dominuojantis kvazi-2D ir 3D perovskituose, o 2D perovskituose stebima lokali eksitonų rekombinacija. Priešingai nei 3D ar 2D perovskituose, kvazi-2D struktūros efektyviai nukreipia krūvininkus ir leidžia pasiekti didesnius spindulinės rekombinacijos efektyvumus, kas yra labai svarbu šviesos diodų ir kitų optoelektroninių prietaisų taikymuose.

Literatūros sąrašas

1. A. Fakharuddin, M.K. Gangishetty, M. Abdi-Jalebi ir kiti // Nature Electronics, 2022, **5**, DOI: [10.1038/s41928-022-00745-7](https://doi.org/10.1038/s41928-022-00745-7), 203–216.
2. G. Grancini, M.K. Nazeeruddin // Nature Reviews Materials, 2019, **3**, DOI: [10.1038/s41578-018-0065-0](https://doi.org/10.1038/s41578-018-0065-0), 4–22.
3. A. Fakharuddin, M. Franckevičius, A. Devižis, A. Gelžinis, J. Chmeliov, P. Heremans, V. Gulbinas // Advanced Functional Materials, 2021, **31**, 2010076.

DVISLUOKSNĖS POLIMERINĖS MEMBRANOS FUNKCINEI KOSMETIKAI

Rugilė Bašinskaitė*, Odeta Baniukaitienė, Goda Jašinskaitė, Aistė Pupiūtė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

*rugile.basinskaite@ktu.edu

Polimerinės veido kaukės (membranos) yra vienos iš labiausiai naudojamų veido odos priežiūros priemonių įvairialypėms odos problemoms spręsti [1]. Pastaruoju metu didelis dėmesys yra skiriamas pluoštinės struktūros membranų gavimui, siekiant padidinti jų efektyvumą. Vienas iš perspektyviausių metodų pluoštinės struktūros gavimui - verpimas. Taikant šią technologiją gaunami polimeriniai mikropluoštai, kurie pasižymi dideliu savituoju paviršiaus plotu ir akytumu, yra tinkamų mechaninių savybių. Tai užtikrina funkcinių serumų absorbciją, membranų prisitaikymą prie odos nelygumų ir bioaktyvių junginių pailgintą atpalaidavimą [2].



1 pav. Funkcinių polimerinių membranų gavimo schema

Taikant elektrinio verpimo technologiją, iš skirtingų koncentracijų (10-20 %) celiuliozės acetato (CA) tirpalų bei polikaprolaktono (PCL) suformuoti dvisluoksniai polimeriniai pluoštai - membranos. Nustatyta, kad tinkamiausios morfologijos pluoštams gauti, CA tirpalo koncentracija turi būti 18 %. Regeneruotos celiuliozės ir PCL pluoštas gautas vykdant CA deacetilinimo reakciją. Dvisluoksniai pluoštai funkcionalizuoti serumais, kurių paskirtis - drėkinti, apsaugoti nuo laisvųjų radikalų ir mažinti raukšles. Nustatyta, kad visi funkciniai serumai po 3 parų naudojimo padidina odos drėgmę 66-85 % ir pasižymi antioksidacinėmis savybėmis.

Literatūros sąrašas

1. Pratchaya, Tipduangta ir kt. // Electrospun Cellulose Acetate/Polyvinylpyrrolidone Fiber Mats as Potential Cosmetic Under-Eye Masks for Caffeine Delivery, 2023, 86, p. 104732.
2. Xu, Wensh ir kt. // Research Progress of Advanced Polymer Composite Antibacterial Materials Based on Electrospinning, 2025, 222, p. 113623.

RADIOCHROMINIO BARIO CHLORAPATITO SINTEZĖ LYDYTŲ DRUSKŲ METODU

Simona Bendžiūtė^{1*}, Aleksej Žarkov¹

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

**simona.bendziute@chgf.stud.vu.lt*

Per pastaruosius kelis dešimtmečius daug mokslinių tyrimų atlikta optinių medžiagų srityje, kuri iki pat šiol išlieka aktuali tema. Tam tikrose neorganinėse medžiagose buvo pastebėtas grįžtamasis spalvos pokytis, kuris atsiranda dėl medžiagoje susidariusių defektų, lemiančių skirtingus absorbcijos spektrus. Šis reiškinys vadinamas radiochrominiu/fotochrominiu efektu. Defektų formavimasis lemia ultravioletinė spinduliuotė arba Rentgeno spinduliai. Apatito tipo junginiai yra plačiai nagrinėjami moksliniuose tyrimuose dėl palankios kristalinės struktūros. Vienas tokių junginių - bario chlorapatitas ($\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$), kurio miltelius arba keramiką paveikus Rentgeno spinduliuote, matomas aiškus spalvos pokytis, išliekantis tam tikrą laiko tarpą. Tokie susintetinti junginiai itin perspektyvūs informacinių technologijų plėtroje, dozimetruose bei apsaugos pigmentuose.

Šiame darbe tiriama $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ sintezės sąlygų įtaka radiochrominio efekto intensyvumui bei stabilumui. Pirmąją tyrimų dalį sudaro $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ miltelių sintezės sąlygų optimizavimas, atsižvelgiant į sintezės temperatūrą, pirmtako ir druskos santykį. Kitame tyrimų etape stebimi $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ keramikos spalvos pokyčiai laiko atžvilgiu priklausomai nuo keramikos gamybos temperatūros. Sintezės produktų fazinis grynumas bei kristalinė struktūra analizuota pasitelkiant Rentgeno spindulių difrakciją (XRD) bei Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR). Morfologinės savybės stebėtos naudojant skenuojantį elektronų mikroskopą (SEM).

PIROLIZĖS TEMPERATŪROS ĮTAKA MIKROPLASTIKŲ, ESANČIŲ MIESTO NUOTEKŲ DUMBLE, IDENTIFIKAVIMO TIKSLUMUI NAUDOJANT PY-GC-MS

Reda Bernotavičiūtė^{1*}, Irena Vaškevičienė², Vida Malinauskienė¹

¹ Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

² Šiluminių įrengimų tyrimo ir bandymų laboratorija, Lietuvos energetikos institutas, Lietuva

*reda.bernotaviciute@ktu.lt

Dėl savo savybių plastikas plačiai naudojamas vietoje medienos, popieriaus, stiklo ir metalo: su juo lengva dirbti, jis yra pigus, lengvas, nepralaidus vandeniui, pasižymi mažu šilumos laidumu ir yra elektros izoliatorius [1]. Terminas „mikroplastikas“ pradėtas naudoti nuo 2004 metų. Terminas apima mažesnes nei 5 mm dydžio plastiko daleles, kurios gali būti įvairių formų: rutuliukai, pluoštai, granulės, dribsniai. Mikroplastiko dalelės naudojamas tikslingai gaminiuose arba susidaro skylančioms didesniems plastiko gaminiams, pavyzdžiui, buteliams ar maišeliams [2], [3]. Mikroplastikai yra linkę kauptis, migruoti ir skliti aplinkoje dėl didelio hidrofobiškumo, mažo dalelių dydžio ir stabilių cheminių savybių [4]. Nuotekose net ir po valymo 1% mikroplastikų išlieka ir patenka į gamtinę aplinką. Dumblo ir komposto produktai yra dažnai naudojami dirvožemiui tręšti ir tai yra vienas iš pagrindinių būdų mikroplastikui patekti į dirvožemį, nes naudojamuose produktuose yra daug mikroplastikų [4]. Šalinamo plastiko kiekis yra rimta aplinkosaugos problema, o jo tvarus tvarkymas įtrauktas į 12-ąją darnaus vystymosi tikslą (Sustainable Development Goal) [1].

Atsižvelgiant į problemos aktualumą, išsikeltas darbo tikslas – remiantis mokslinė literatūra parinkti ir pritaikyti tinkamiausią mikroplastikų išskyrimo iš nuotekų dumblo metodą, pašalinti nuo mikroplastikų paviršiaus organinius teršalus, galinčius trukdyti tolimesnei analizei, ir įvertinti pirolizės temperatūros įtaką monomerų susidarymui.

Apžvelgus mokslinės literatūros straipsnius, eksperimentams buvo pasirinkta mėginių paruošimui naudoti Fentono reagentą, kuris skirtas organinėms medžiagoms pašalinti. O mikroplastikų atskyrimui pasirinkta naudoti skirtingo tankio druskas (NaCl ($1,2 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$), NaI ($1,6\text{--}1,8 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$), ZnCl_2 ($1,5\text{--}1,7 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$). Po vakuuminio filtravimo, naudojant šviesinį mikroskopą atrinktos dalelės labiausiai primenančios plastiką bei analizuojamas jų paviršius, naudojant Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR). Identifikuotoms plastiko dalelėms taikomas pirolizės procesas, kurio metu veikiant mėginį aukšta temperatūra inertinėje aplinkoje skaidomos polimerų grandinės ir susidaro mažesnės molekulinės masės organiniai junginiai. Vertinant pirolizės metu susidariusius produktus dujų chromatografijos ir masių spektrometrijos (GC-MS) metodu, analizuojama pirolizės temperatūros įtaka monomerų ir kitų skilimo produktų sudėčiai. Tokiu būdu siekiama nustatyti optimalius pirolizės proceso parametrus, leidžiančius tiksliai identifikuoti mikroplastikų kilmę ir cheminę struktūrą.

Literatūros sąrašas

1. L. Borriello, M. Scivico, N. A. Cacciola, F. Esposito, L. Severino, T. Cirillo // Microplastics, a Global Issue: Human Exposure through Environmental and Dietary Sources, 2023, Foods, 12, 18, 3396.
2. M. Matsueda, M. Mattonai, I. Iwai, A. Watanabe, N. Teramae, W. Robberson, H. Ohtani, Y. Kim, C. Watanabe // Preparation and test of a reference mixture of eleven polymers with deactivated inorganic diluent for microplastics analysis by pyrolysis-GC-MS, 2021, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 154, 104993.

3. K.T.T. Amesho, C. Chinglenthoba, M.S.A.B. Samsudin, M.N. Lani, A. Pandey, M.N.M. Desa, V. Suresh // Microplastics in the environment: An urgent need for coordinated waste management policies and strategies, 2023, Journal of Environmental Management, 344, 118713, 1–12.
4. H. Yu, Y. Zhang, W. Tan, Z. Zhang // Microplastics as an Emerging Environmental Pollutant in Agricultural Soils: Effects on Ecosystems and Human Health, 2022, Frontiers in Environmental Science, 10, 855292, 1–18.

NUOTEKŲ, UŽTERŠTŲ Ni, Zn IR Fe METALAIS, HOMOGENINĖ KRISTALIZACIJA TAIKANT VERDANČIO SLUOKSNIO TECHNOLOGIJĄ

Paulina Bučinskaitė, Inga Urniežaitė

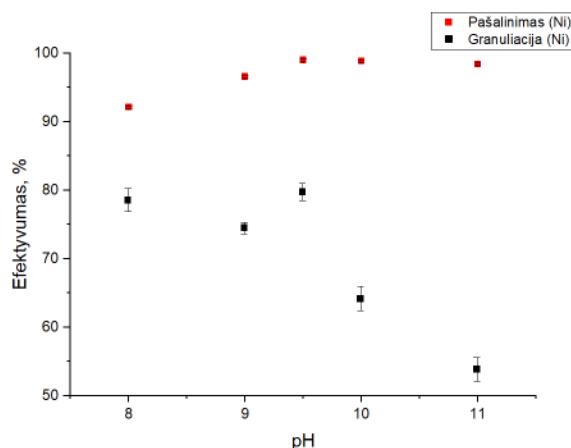
Kauno technologijos universitetas, Aplinkosaugos technologijos katedra, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, LT-50254,
Lietuva
paulina.bucinskaite@ktu.edu

Tarša sunkiaisiais metalais kelia rimtą grėsmę žmonių sveikatai ir aplinkai, todėl būtina tobulinti jų atgavimo ir šalinimo iš nuotekų technologijas, tausojant gamtos išteklius ir išvengiant taršos [1]. Nikelis – vienas iš svarbių išteklių, plačiai naudojamas akumuliatorių gamyboje, galvanizavime ir metalurgijoje. Jo atgavimas iš pramoninių nuotekų gali padėti sumažinti pirminių pramonei reikalingų žaliavų kiekį [2]. Šio darbo tikslas – įvertinti nikelio granuliacijos homogeninės kristalizacijos verdančiame sluoksnyje efektyvumą.

Homogeninės kristalizacijos verdančiame sluoksnyje procesas leidžia efektyviai sukonzentruoti ir pašalinti iš nuotekų sunkiuosius metalus be šalutinių atliekų susidarymo. Šio tyrimo metu buvo siekiama nustatyti optimalias sąlygas nikelio fosfato granuliacijai nuotekose. Keičiant išsodinimo agento pH buvo keičiama pH vertė reaktoriuose, kuri viso proceso kito nuo 8,0 iki 11,0.



2 pav. Homogeninės kristalizacijos verdančio sluoksnių reaktoriai



3 pav. Nikelio pašalinimo ir granuliacijos efektyvumas esant skirtingam pH

Didžiausias nikelio granuliacijos efektyvumas buvo pasiektas, reaktoriuje palaikant 9,5 pH vertę.

Literatūros sąrašas

1. Mitra, S., Chakraborty, A. J., Tareq, A. M., Emran, T. B., Nainu, F., Khusro, A., Idris, A. M., Khandaker, M. U., Osman, H., Alhumaydhi, F. A., & Simal-Gandara, J. (2022). Impact of heavy metals on the environment and human health: Novel therapeutic insights to counter the toxicity. *Journal of King Saud University. Science*, 34(3), 101865. <https://doi.org/10.1016/j.jksus.2022.101865>.
2. Wesselkämper, J., Dahrendorf, L., Mauler, L., Lux, S., & von Delft, S. (2024). A battery value chain independent of primary raw materials: Towards circularity in China, Europe and the US. *Resources, Conservation, and Recycling*, 201(107218), 107218. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2023.107218>.

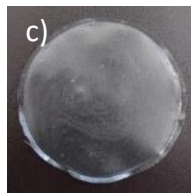
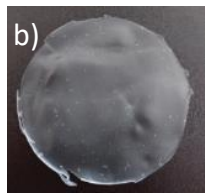
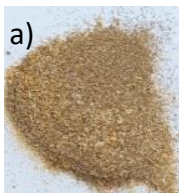
TRAŠŲ TIRPUMUI REGULIUOTI SKIRTŲ DANGŲ GAVIMAS IR SAVYBĖS

Eglė Maslauskaitė, Vanesa Čereškaitė, Rasa Paleckienė

Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva
egle.maslauskaite@ktu.edu, vanesa.cereskaite@ktu.edu, rasa.paleckiene@ktu.lt

Plėtojantis moderniai žemdirbystei bei didėjant trąšų poreikiui, vis daugiau dėmesio skiriama tvariams sprendimams. Trąšos – tai medžiagos, kurių pagrindinė paskirtis yra aprūpinti augalus bei dirvožemį maistinėmis medžiagomis, pagerinti derlingumą [1]. Trąšų naudojimo ir gamybos srityje pastaraisiais metais susiduriama su dideliais iššūkiais. Siekiant užtikrinti maisto medžiagų naudojimo efektyvumą ir sumažinti maisto medžiagų nuostolius ieškoma inovatyvių sprendimų: tiriamos, kuriamos, o taip pat ir gaminamos lėto arba reguliuojamo veikimo trąšos. Be to, ieškoma technologinių sprendimų, kaip trąšų gamybai panaudoti atsinaujinančias žaliavas arba kitų gamybos procesų ar žemės ūkio produkcijos atliekas [2]. Pereinant prie tvariosios gamybos, svarbu integruoti ekologinius reikalavimus produkcijai, nes trąšų dengimui naudojami sintetiniai polimerai žemėje išlieka ilgą laiką. Bioskaidi alternatyva – iš bulvių, kviečių arba kukurūzų krakmolo gautos dangos, kurios aplinkoje yra skaidomos įvairių mikroorganizmų [3]. Trąšų dangų tyrimai ir kompozicijos parinkimas atliekamas vykdant tyrimus KTU mokslo grupėje „Daugiakomponentės heterogeninės sistemos ir jų taikymo technologijos“. Ankstesniuose tyrimuose [4] bioskaidios krakmolo plėvelės buvo ruošiamos kaip užpildą naudojant sieros rūgšties gamyboje (AB „Lifosa“) susidarantį sieros šlamą. Tokia danga padengtos tradicinės trąšos yra praturtinamos siera, kuri yra svarbus antrinis augalų maisto elementas, taip pat sulėtinamas trąšų tirpumas, taip pagerinant jų įsisavinimo efektyvumą.

Mūsų tyrimų tikslas – sukurti dirvožemyje suyrančias polimerines plėveles, lėtinančias maistinių medžiagų atpalaidavimą dirvožemyje. Trąšų dangos (plėvelės) gavimui naudojamos įvairios žaliavos: bulvių arba kukurūzų krakmolas, vanduo, glicerolis, polivinilo alkoholis, druskos rūgštis, natrio arba kalio šarmas [4]. Dangų kompozicijai papildyti naudojamas Frass, t.y. Didžiojo milčiaus (*Tenebrio molitor*) auginimo atliekos (UAB „Divaks“). Frass sudėtyje yra daug augalams reikalingų medžiagų [5]. Cheminė žaliavų ir produktų analizė atliekama žinomais trąšų srities metodais, dangų gavimas – remiantis anksčiau atliktais tyrimais [4]. Darbe siekiama nustatyti optimalias trąšų dangų gavimo sąlygas bei ištirti jų savybes ir įvertinti efektyvumą.



Pav. Tyrimo objektai: a) *Tenebrio molitor* frass; b) polimerinė kukurūzų krakmolo plėvelė; c) polimerinė bulvių krakmolo plėvelė su frass priedu

Literatūros sąrašas

1. R. Paleckienė, R. Šlinkšienė // Trąšos. Gavimas ir analizė. Kaunas, 2018.
2. K. Chojnacka, K. Moustakas, A. Witek-Krowiak // Bioresource Technology, Volume 295, 2020, 122223.
3. F. Puoci ir kt. // American Journal of Agricultural and Biological Sciences. 2008, vol. 3, p. 299-314.
4. J. Mikuckytė; R. Paleckienė // Chemistry and chemical technology: proceedings of international scientific conference, Kaunas, 2022. p. 98.
5. A. Nyanzira ir kt. // Entomology and Applied Science Letters. 2023, vol. 10, p. 29-37.

TERMOJAUTRIŲ B-CIKLODEKSTRINO IR POLI(N-IZOPROPILAKRILAMIDO) KOPOLIMERŲ SINTEZĖ

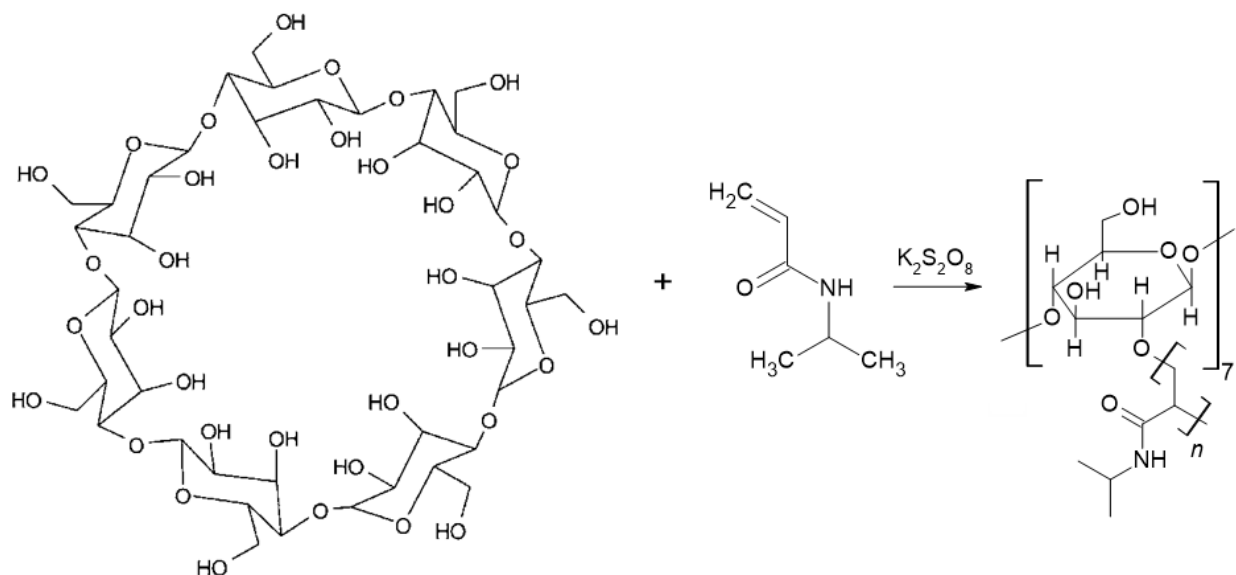
Sofija Beatričė Dervinytė^{*}, Ramunė Rutkaitė, Miglė Savickė

Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

^{*}sofija.dervinyte@ktu.edu

Poli(N-izopropilakrilamidas) (PNIPAAm) yra vienas labiausiai žinomų termojautrių sintetinių polimerų, pasižyminčių staigiais tirpumo pokyčiais vandenyje esant tam tikrai temperatūrai, kuri gerai žinoma kaip žemutinė kritinė tirpumo temperatūra (LCST) [1]. Vieni iš perspektyvių biopolimerų, prie kurių grandinių būtų galima suformuoti termojautrias šonines grandines, yra ciklodekstrinai (CD). Tai cikliniai oligosacharidai, kurie yra linkę sudaryti kompleksus su hidrofobiniais junginiais, ir dėl šios priežasties plačiai naudojami maisto, farmacijos, vaistų tiekimo ir chemijos pramonėje, taip pat žemės ūkyje ir aplinkos inžinerijos technologijose [2].

Šiame darbe radikalinės polimerizacijos būdu buvo susintetinti termojautrūs β-ciklodekstrino (β-CD) ir N-izopropilakrilamido (NIPAAm) skiepytieji kopolimerai (1 schema), reakcijas atliekant vandeninėje terpėje, kaip iniciatorių naudojant kalio persulfatą. Keičiant β-CD:NIPAAm molinį santykį nuo 1:0,25 iki 1:10, buvo gauti skirtingą PNIPAAm šoninių grandinių kiekį turintys kopolimerai.



1 schema. β-Ciklodekstrino ir N-izopropilakrilamido kopolimerizacijos reakcijos schema

Susintetinti kopolimerai buvo charakterizuoti, naudojant spektroskopinius ir termogravimetrijos metodus. Šildant susintetintų skiepytųjų kopolimerų vandeninius tirpalus ir atlikus jų drumstumo ir diferencinės skenuojamosios kalorimetrijos tyrimus, nustatyta, kad pasiekus 31–33 °C temperatūrą, vyko fazių atsiskyrimas ir jiems buvo būdinga žemutinė kritinė tirpumo temperatūra.

Literatūros sąrašas

1. L. Tang, L. Wang L, X. Yang, Y. Feng, Y. Li, W. Feng // Progress in Materials Science: Poly(*N*-isopropylacrylamide)-based smart hydrogels: Design, properties and applications, 2021, volume 115, 100702.
2. A. Hedges // Starch (Third Edition): Chemistry and Technology, Chapter 22 - Cyclodextrins: Properties and Applications, San Diego: Academic Press, 2009, 833–851.

DEGRADATION REACTIVE BLACK 5 DYE IN WATER VIA PERSULFATE-ACTIVATED Ni-Cu CATALYSTS

Paulina Družaitė^{1*}, Dainius Martuzevičius¹, Ming-Chun Lu ²

¹ Faculty of Chemical Technology, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

² Department of Environmental Engineering, National Chung Hsing University, Taichung, Taiwan

**paulina.druzaite@ktu.lt*

The widespread use of synthetic dyes across various industries has raised significant environmental concerns. Azo dyes make up 60–70% of all organic dyes and are frequently utilized because of their affordable price, structural adaptability, high molar extinction coefficients, and acceptable color durability[1]. However, their chemical stability also makes them persistent and resistant in natural environments [2]. One such azo dye is Reactive Black 5 (RB5), a complex compound with a molecular formula $C_{26}H_{21}N_5Na_4O_{19}S_6$ and a molar mass of 991.82 g/mol. Due to its two azo bonds and chemical structure, RB5 is particularly resistant to conventional wastewater treatment methods [3].

In this study, an advanced oxidation process (AOP) based on a heterogeneous Fenton-like mechanism was employed to degrade RB5 in aqueous solution. This approach relies on the generation of reactive oxygen species (ROS), which effectively mineralize organic pollutants into carbon dioxide and water. Two types of Ni-Cu bimetallic catalysts were synthesized: one via a conventional co-precipitation method and the other using an advanced Fluidized Bed Homogeneous Crystallization (FBHC) technique. The catalysts were characterized using SEM, EDS, XRD, FTIR, and XPS to evaluate their morphology, structure, and surface properties.

Selection of a suitable oxidant was a key parameter in optimizing the catalytic performance. Hydrogen peroxide (H_2O_2), although commonly used in Fenton-based reactions, exhibited low reactivity with the Ni-Cu catalyst. In contrast, sodium persulfate ($Na_2S_2O_8$) was found to be highly effective across different pH ranges, including pH 6.5, which makes it more suitable for practical and economically feasible wastewater treatment applications. Under optimized conditions, the catalyst prepared via the conventional method achieved 90% decolorization of RB5 within 60 minutes. Remarkably, the FBHC-synthesized catalyst demonstrated superior performance, achieving over 90% decolorization within just 10 minutes. Additionally, Total Organic Carbon (TOC) analysis confirmed a 70% reduction, indicating substantial mineralization of organic compounds.

Literatūros sąrašas

1. UDDIN, Faheem. Environmental hazard in textile dyeing wastewater from local textile industry. *Cellulose*, 2021, 28.17: 10715-10739.
2. BENKHAYA, Said; M'RABET, Souad; EL HARFI, Ahmed. A review on classifications, recent synthesis and applications of textile dyes. *Inorganic Chemistry Communications*, 2020, 115: 107891.
3. CAVALCANTE, Luan C., et al. Kinetic, isothermal and thermodynamic studies of Reactive Black 5 removal using rice husk ashes and powdered activated carbon. *Desalination and Water Treatment*, 2024, 320: 100606.

OKSADIAZOLO DARINIŲ, TURINČIŲ PIRIDINO PAGRINDĄ, SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAI

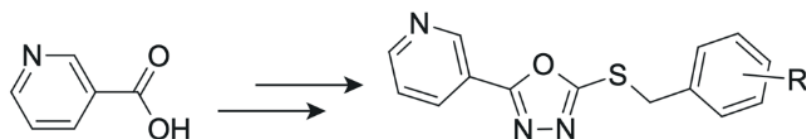
Aistė Drūtytė^{1*}, Vida Malinauskienė¹, Vilija Kederienė¹

¹ Organinės chemijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

*aiste.drutyte@ktu.edu

Azotą turintys heterocikliniai junginiai yra esminiai statybiniai blokai, naudojami junginių, turinčių biologinę ar medicininę svarbą, kūrimui. Iš daugelio gamtoje aptinkamų heterociklinių darinių, būtent azotą turintys junginiai yra labiausiai paplitę, lyginant su sierą ar deguonį turinčiais analogais. Azotą turintys dariniai dalyvauja beveik visuose augalų bei gyvūnų fiziologiniuose procesuose, taip pat atlieka svarbų vaidmenį nukleorūgščių sintezės procesuose ir ne tik [1]. Piridinas ir šio heterociklo organiniai dariniai labai svarbūs medicininėje chemijoje, nes pasižymi įvairiomis ir naudingomis biologinėmis savybėmis. Jie demonstruoja antimikrobinį, antivirusinį, antioksidacinį, antidiabetinį, antimalarinį, priešūždegiminį ir psichofarmakologinį aktyvumą [2]. Tuo tarpu oksadiazolo dariniai taip pat yra plačiai naudojami medicininėje chemijoje bei farmacijoje kaip aktyvūs agentai, pvz., priešūždegiminių, analgetinių, antimikrobinių, antivirusinių, priešgrybelinių, ir kitų biologiškai aktyvių junginių gamyboje [3].

Darbo tikslas – susintetinti pakeistus oksadiazolo darinius, turinčius piridino fragmentą, ir ištirti jų savybes.



1 schema. Principinė sintezės schema

Pirmojoje tyrimo dalyje, tarpinių reakcijų metu, susintetintas tikslinių junginių pirmtakas oksadiazoltiolis, pagal žinomą sintezės metodiką [4]. Tuomet atliktas geriausių alkilimo reakcijos sąlygų parinkimas. Trečioje tyrimo dalyje oksadiazoltiolis veiktas benzilhalogenidais bazinėmis reakcijos sąlygomis ir gauti tiksliniai alkilinti oksadiazolo dariniai geromis reakcijos produkto išeigomis. Dėka detalių spektroskopinių tyrimų, patvirtintos tikslinių junginių struktūros. Įvertintas susintetintų naujų oksazolo junginių antioksidacinis ir antimikrobinis aktyvumas.

Literatūros sąrašas:

1. M. A. Khan, M. A. Khan, M. I. Khan, M. A. Khan, A. U. Rehman, N. U. Rehman, A. Badshah // International Journal of Molecular Sciences, 2022, **23**, 15, 8117.
2. K. M. Khar, S.S. Gillani, F. Saleem // Recent Developments in the Synthesis and Applications of Pyridines, Netherlands, 2022.
3. M. Luczynski, A. Kudelko // Synthesis and Biological Activity of 1,3,4-Oxadiazoles Used in Medicine and Agriculture, 2022, **12**, 8, 3756.
4. S. G. Nayak, B. Poojary // A Review on the Preparation of 1,3,4-Oxadiazoles from the Dehydration of Hydrazines and Study of Their Biological Roles, Chemistry Africa, 2019, **2**, 551-571.

POLIMERINIS KARKASAS SKIRTAS AUGLIO ANT LUSTO PLATFORMOS TYRIMAMS

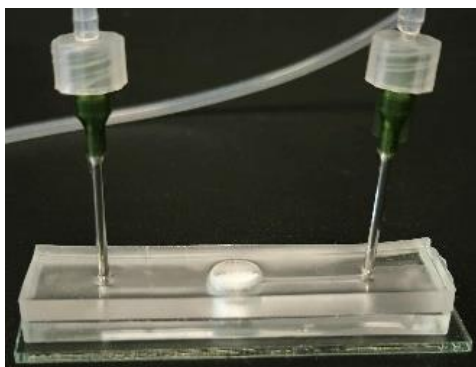
Eidvylė Gasiulytė^{1*}, Edvinas Krugly¹

¹ Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

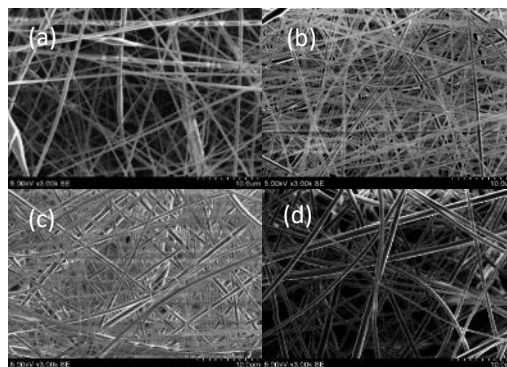
*eidvyle.gasiulyte@ktu.edu

Kiekvienais metais daugėja vėžiu sergančių žmonių – iki 2050 m. jų gali būti virš 35 mln. [1]. Norint efektyviau tirti vėžio eigą ir gydymo metodus, svarbu kurti pažangius modelius, tiksliai atkartojančius realią navikų mikroaplinką. Tradiciniai 2D modeliai negali tiksliai imituoti kompleksinės 3D naviko struktūros, tačiau „auglys ant lusto“ technologija leidžia sukurti fiziologiškai artimus 3D modelius, mažina gyvūnų naudojimą ir gali pakeisti ilgus bei brangius *in vivo* tyrimus [2–3].

Šio darbo tikslas – sukurti pluoštinės polimerinės membranos pagrindo „auglys ant lusto“ modelinę sistemą ir įvertinti jos savybes.



1 pav. Auglys ant lusto modelinė sistema



2 pav. Pluoštinių membranų morfologija: CA 15 % (a); CA 17 % (b); CA 18 % (c); CA 20 % (d). Didinimas 3000 kartų

Elektrinio verpimo metodais buvo pagamintos CA nanopluoštinės, CH-PVA nanopluoštinės membranos bei PCL mikromembranos. Taip pat buvo sukurta kompozitinė PCL-CA membrana. Elektroninės mikroskopijos analizė parodė, kad polimero koncentracija turi įtakos pluošto dydžiui ir vientisumui. Paviršiaus modifikavimas natrio hidroksidu, glutaraldehidu ir netermine plazma pagerino pluoštų hidrofiliškumą bei biosuderinamumą. PDMS pagrindo lustas buvo pagamintas 3D stereolitografijos metodu ir papildomai modifikuotas plazma. Tyrimas patvirtino, kad pluoštinės membranos lustuose yra efektyvus būdas pažangiems ir etiškesniems vėžio tyrimams.

Literatūros sąrašas

1. American Cancer Society. Latest Global Cancer Statistics. 2024.
2. J. F. Gil, C. S. Moura, V. Silverio, G. Goncalves, H. A. Santos, Cancer Models on Chip: Paving the Way to Large-Scale Trial Applications. *Adv. Mater.* 2023, **35**, 35, 2300692.
3. X. Liu, Q. Su, X. Zhang et. al. Recent Advances of Organ-on-a-Chip in Cancer Modeling Research. *Biosensors*. 2022, **12**, 11, 1045.

ANTIBAKTERINIŲ TINKŲ SU SLUOKSNIUOTAIŠ DVIGUBAIS HIDROKSIDAIŠ KŪRIMAS IR APIBŪDINIMAS

Laura Gliaudytė^{1*}

¹ Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Lietuva

**laura.gliaudyte@ktu.edu*

Kultūros paveldo objektai ir istoriniai pastatai visame pasaulyje palaipsniui nyksta dėl žalingų aplinkos bei gamtos veiksnių. Ilgainiui statinių būklė prastėja dėl drėgmės, oro užterštumo, temperatūros svyravimų bei mikroorganizmų kolonizacijos. Šie procesai lemia pastatų eroziją, nuosėdų kaupimąsi, silpnina medžiagų struktūrą ir keičia jų fizikines savybes [1-2]. Šio tyrimo tikslas – ištirti galimą sluoksniuotų dvigubų hidroksidų (SDH) panaudojimą mikroorganizmų kolonizacijos kontrolei istoriniuose pastatuose. Sluoksniuoti dvigubi hidroksidai yra sluoksniuotos struktūros sudarytos iš trivalenčių ir divalenčių metalų, kurie kartu sudaro teigiamai įkrautus sluoksnius [3]. Kadangi SDH sluoksniuose esantys metalai yra keičiami, juos galima pakeisti į antibakterinėmis savybėmis pasižyminčius pereinamųjų metalų jonus tokius kaip varis ar cinkas [4]. Tyrimo metu bendro nusodinimo, hidroterminės ir mikrobangų sintezės metodais susintetinti sluoksniuoti dvigubi hidroksidai, ištirtas SDH fazinis grynumas ir sintezės metodų efektyvumas. Taip pat ištirtos tinkų su SDH antibakterinės ir antigrybelinės savybės. Tyrimo rezultatai rodo, kad SDH gali būti efektyvi priemonė mikrobiologinės kolonizacijos prevencijai ant istorinių pastatų paviršių, prisidedant prie jų ilgaamžiškumo išsaugojimo.

Literatūros sąrašas

- [1] J. Becerra, A. P. Zaderenko, R. Ortiz, I. Karapanagiotis, P. Ortiz // *Applied Clay Science*, 2020, t. 195, p. 105732.
- [2] A. Campostrini, S. Manente, E. Ghedini, A. Di Michele, F. Menegazzo // *Next Materials*, 2025, t. 7, p. 100384.
- [3] S. Daniel, S. Thomas // *Layered Double Hydroxide Polymer Nanocomposites*, Woodhead Publishing, 2020, p. 1–76.
- [4] M. Li, L. Li, S. Lin // *Chinese Chemical Letters*, 2020, t. 31, nr. 6, p. 1511–1515.

THE ANALYSIS OF AIR FILTER MATERIAL SUSTAINABILITY USING LIFE CYCLE ASSESSMENT MODELING

Shovkat Gojaeva^{1*}, Tadas Prasauskas¹, Goda Masionė¹

¹ Department of Environmental Technology, Kaunas University of Technology, Lithuania

**shovkat.gojaeva@ktu.edu*

With growing global concerns about both air pollution and plastic waste, the demand for sustainable alternatives to conventional filtration materials continues to increase [1]. Conducting a Life Cycle Assessment (LCA) enables the environmental evaluation of bio-based air filter materials, specifically those made from polylactic acid (PLA) and polybutylene succinate (PBS), in comparison with fossil-based polypropylene (PP) [2].

SimaPro software, in accordance with ISO 14040/44 standards, was used in this study to model the complete life cycle of each material, from raw material extraction to manufacturing and end-of-life stages. Inventory data on biogenic carbon content, energy and resource use, emissions, and waste is evaluated to determine the relative sustainability of these materials [3].

Although full results may still be in development at the time of presentation, this study highlights the promising potential of bio-derived polymer structures to serve as both sustainable and effective media in air filtration applications. The results will provide insights on the environmental trade-offs and opportunities associated with the transition to sustainable air filtration technologies.

List of references

1. Doyle A, Stephens J // A review of cinnamaldehyde and its derivatives as antibacterial agents – Journal of Fitoterapia, 2019, volume 139.
2. Walker S, Rothman R // Life cycle assessment of bio-based and fossil-based plastic: A review - Journal of Cleaner Production, 2020, volume 261.
3. British Standard BS EN ISO 14040:2006 // Environmental management - Life cycle assessment - Principles and framework, 2006, London.

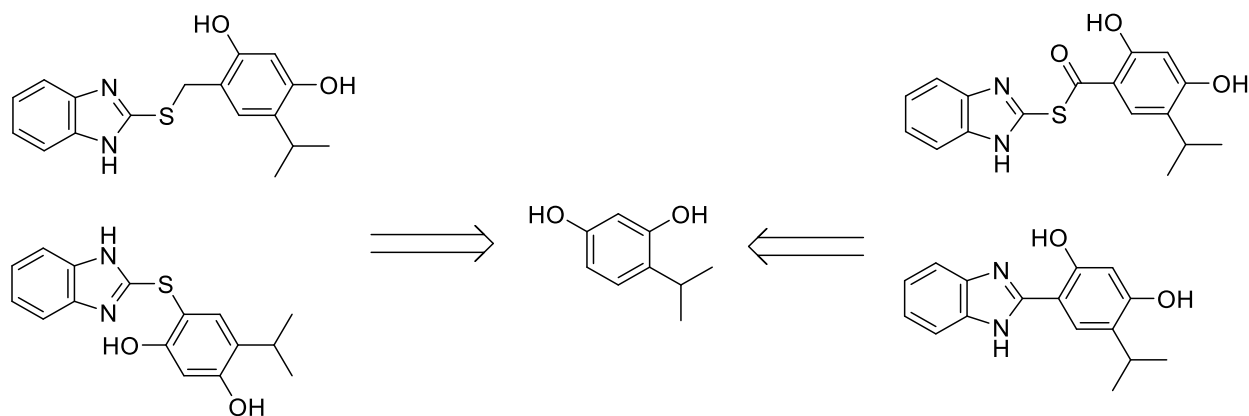
REZORCINOLIŲ JUNGIMO PER SIEROS ATOMĄ SU AZAHETEROCIKLAIS SINTEZĖS KELIŲ TYRIMAS

Gabija Griškonytė^{*}, Ieva Žutautė, Rita Bukšnaitienė, Algirdas Brukštus

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Lietuva

^{*} *gabija.griskonyte@chgf.stud.vu.lt*

Daugiau nei 400-ų klientinių baltymų brendimas, aktyvavimas ir stabilizavimas priklauso nuo šiluminio šoko baltymo Hsp90 [1]. Taip pat Hsp90 kliento baltymai atlieka svarbų vaidmenį reguliuojant įvairias žmogaus ląstelių atliekamas funkcijas tokias kaip signalo perdavimas, baltymų pernaša ir ląstelės proliferacija [2]. Šio baltymo slopinimas trikdo ląstelių veiklą. Tyrimų metu pastebėti skirtumai tarp normaliose ir navikinėse ląstelėse esančio Hsp90 leidžia ieškoti selektyvesnių vaistinių preparatų [3]. Yra nustatyta, kad rezorcinolio fragmentas sąveikauja su N-galo domene esančia ATP kišene ir taip stabdo baltymo veiklą. Tad šio darbo tikslas susintetinti 4-((2- benzimidazolil)tio)rezorcinolius, kurie galėtų turėti potencialo Hsp90 slopiklių paieškose ir prisidėtų kovoje prieš vėžį.



1 pav. Tikslinių junginių retrosintezės schema

Norint ištirti benzimidazolo įtaką rezorcinolio slopinimo efektyvumui, iš pradžių buvo nuspręsta šiuos fragmentus sujungti tiesiogiai, per sierą bei tiometileninį tiltelį. 2,4-dihidroksibenzaldehidą buvo pasirinktas kaip pradinis junginys. Siekiant išvengti šalutinių reakcijų, rezorcinolio hirdoksigrupės buvo apsaugotos įvedant metoksipakaitus. Tiesioginiam sujungimui gauti aldehidas kondensuotas su diaminobenzenu. Tuo tarpu tiometileninio tiltelio sintezėje, benzaldehidas buvo redukuotas iki alkoholio, kuris vėliau paverčiama į gerai nueinančią grupę. Tiesioginis fragmentų sujungimas per sierą buvo atliekamas pasitelkus Ulmanno tipo reakciją, iš atitinkamo jodbenzeno ir tiobenzimidazolo. Reakcijų sąlygos iš pradžių buvo optimizuotos su analogiškais lengvai prieinamais rezorcinoliniais dariniais.

Literatūros sąrašas

1. X. Liang, R. Chen, C. Wang, Y. Wang, J. Zhang // J. Med. Chem., 2024, **67**, 17, 15968–15995.
2. G. Garg, A.Khandelwal, B. S. J. Blagg, // Adv Cancer Res., 2016, **129**, 51–88.
3. Y. Li, J. Dong, J. J. Qin // Eur. J. Med. Chem., 2024, **275**, 116562.

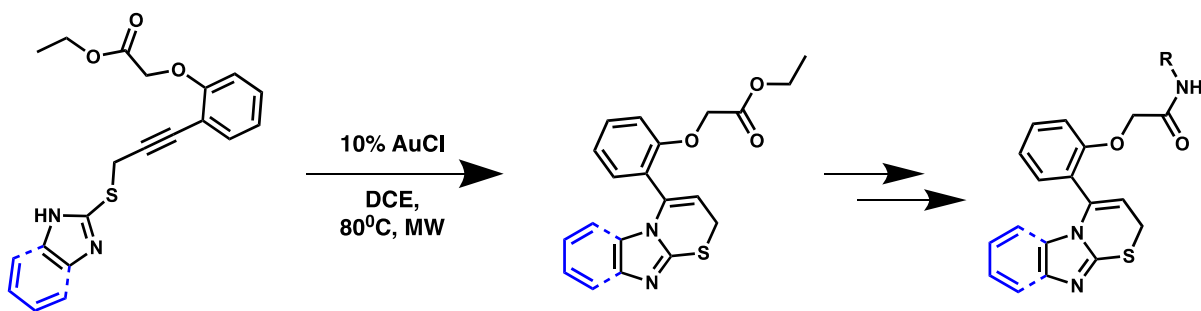
ETILO 2-(2-(2H-BENZIMIDAZO[2,1-B][1,3]TIAZIN-4-IL)FENOKSI)ACETATO IR ETILO 2-(2-(7H-IMIDAZO[2,1-B][1,3]TIAZIN-5-IL)FENOKSI)ACETATO SINTEZĖ IR MODIFIKAVIMAS

Fausta Kairytė^{1*}, Ieva Žutautė²

¹ Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas, Lietuva
fausta.kairyte@chgf.stud.vu.lt

Šiuolaikinėje medicinoje ypatingas dėmesys yra skiriamas neurodegeneracinėms ligoms, kurios siejamos su fibrilinių agregatų – amiloidų – susidarymu ir kaupimusi organizme. Šios struktūros organizmo audiniuose kaupiasi netirpių struktūrų pavidalu ir lemia įvairių ligų atsiradimą, susijusių su nervinių audinių silpnėjimu, plačiau žinomos ligos – Parkinsono, Alzheimerio ligos. Siekiant atrasti amiloidinių struktūrų formavimąsi slopinančius junginius vis daugiau tyrimų yra atliekama su įvairiais mažamolekuliniiais heterociklais. Vieni iš perspektyvių junginių yra turintys imidazolo žiedą, o naujausi tyrimai rodo, jog junginiai, kurių struktūroje yra imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentas, pasižymi gebėjimu moduluoti amiloidinių struktūrų agregaciją[1].

Norint ištirti 5-arilimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino pakaitų poveikį alfa-sinukleino agregacijai, buvo tikslingai pasirinkta sintetinti etilo 2-(2-(7H-imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-5-il)fenoksi)acetatą iš atitinkamo 2-alkinilimidazolu. Siekiant praplėsti tiriamųjų junginių imtį, buvo pasirinkta susintetinti etilo 2-(2-(2H-benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)fenoksi)acetatą, panaudojant tą pačią alkinilimidazo ciklizacijos reakcijos metodiką. Gautųjų junginių esterio funkcinės grupės toliau modifikuojamos iki pasirinktų aminorų tolimesniems tyrimams.



1 pav. Alkinilimidazo ciklizacijos reakcijos schema.

Literatūros sąrašas

1. I. Misiūnaitė, K. Mikaluskaitė, M. Paulauskaitė, R. Sniečkutė, V. Smirnovas, A. Brukštus, M. Žiaunys, I. Žutautė // *ACS Chemical Neuroscience*, 2024, **15**, 24, 4337-4591.

2,1,3-BENZOTIADIAZOLO PAGRINDO SAVITVARKIUS MONOSLUOKSNIUS FORMUOJANČIŲ JUNGINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS

Guostė Kaleininkaitė^{1*}, Ranush Durgaryan², Marytė Daškevičienė¹, Vytautas Getautis¹, Bowen Yang², Artiom Magomedov¹

¹ Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

² Chemijos katedra – Ångström laboratorija, Uppsalos universitetas, Švedija

*guoste.kaleininkaite@ktu.lt

Atsinaujinančios energetikos paklausai augant, fotovoltinės technologijos tampa vis svarbesnės. Remiantis AB „Litgrid“ duomenimis, 2024 m. metais Lietuvoje saulės energijos elektrinės buvo atsakingos už 16,4% nuo visos elektros energijos pagaminimo šalyje. Vis dėlto, tradiciniai silicio pagrindo saulės elementai negali visiškai pakeisti iškastinio kuro dėl daug išteklių reikalaujančios gamybos. Ieškant efektyvių, ekonomiškų alternatyvų, perovskitiniai saulės elementai (PSE) iškilo kaip rimti konkurentai. Nors PSE efektyvumas ženkliai išaugo, išryškėjo ir kliūtys, kurios stabdo tolimesnį jų plėtojimą.

Viena iš jų – ribota elektronų transportui skirtų medžiagų (ETM) įvairovė. Šiuo metu dažniausiai naudojami fullereno (C₆₀) dariniai arba neorganiniai oksidai (TiO₂, SnO₂), tačiau jos turi savų trūkumų kaip sudėtinga sintezė ar sluoksnio formavimo būdas. Pastaruoju metu dėmesys krypta į paprastesnės struktūros, savitvarkius monosluoksnius (SAM) formuojančius organinius junginius, kurie iki šiol plačiau tirti kaip skylėms selektyvios medžiagos [1]. Tačiau ši junginių klasė dar nėra plačiai ištyrinėta ETM srityje. Vienas iš perspektyvių chromoforų ETM-SAM struktūroms yra 2,1,3-benzotiadiazolas, pasižymintis geru tirpumu bei mažu redokso potencialiu, kas leidžia tikėtis efektyvaus selektyvumo elektronams [2].

Šiame darbe buvo susintetintos dvi 2,1,3-benzotiadiazolo pagrindo fosfonines rūgštys, besiskiriančios anglies jungiamosios grandinės ilgiu. Sintezė atlikta naudojant tris žingsnius: 2,1,3-benzotiadiazolo alkilimas, Arbuzovo reakcija ir fosfono rūgšties esterių hidrolizė. Ištyrus junginių optines, elektrochemines, termines savybes, jie buvo pritaikyti PSE suformuojant elektronams selektyvų sluoksnį. Preliminarūs rezultatai rodo, kad 2,1,3-benzotiadiazolo SAM gali veikti kaip ETM, bet buvo pastebėta, kad ilgėjant alifatinei grandinei mažėja PSE efektyvumas. Gauti PSE parametrai rodo, optimizavus ETM-SAM struktūrą, galima tikėtis aukštesnių efektyvumų.

Literatūros sąrašas

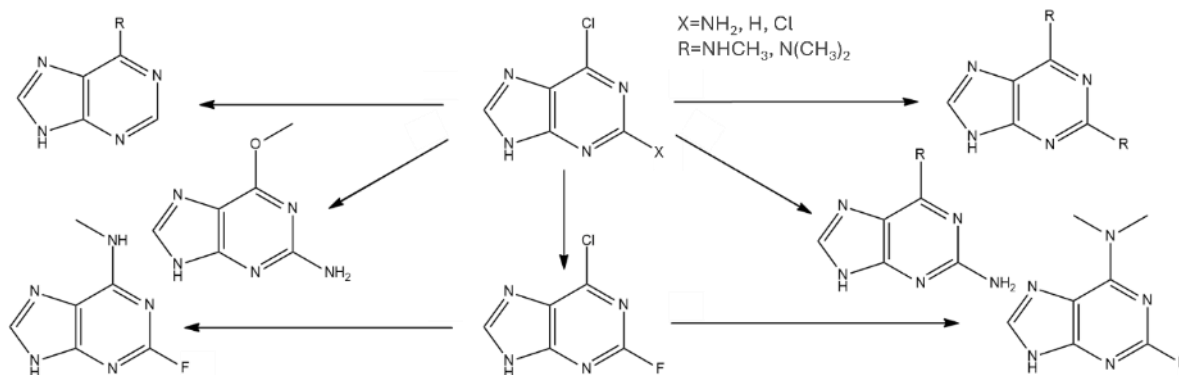
1. S. Huang et al. // Application of PACz-Based Self-Assembled Monolayer Materials in Efficient Perovskite Solar Cells, 2024, **16**, 47, 64424-64446;
2. W. Duan et al. // “Wine-Dark Sea” in an Organic Flow Battery: Storing Negative Charge in 2,1,3-Benzothiadiazole Radicals Leads to Improved Cyclability, 2017, **2**, 5, 1156-1161.

CHEMICAL SYNTHESIS AND CATABOLISM OF *N,O*-METHYLATED PURINES

Daniil Kaminskyi¹, Daiva Tauraitė¹

¹Department of Chemistry and Bioengineering, Vilnius Gediminas Technical University, Lithuania
daniil.kaminskyi@stud.vilniustech.lt

Transfer RNA is one of the most modified RNA species, with more than 170 different nucleotide modifications. These chemical modifications affect the stability, structural integrity and interaction of tRNA with cellular components. Research in this field aims to understand the biochemical pathways involved in the synthesis, transformation and degradation of these modified nucleotides and their role in various diseases such as mitochondrial disorders, neurological conditions, obesity, diabetes and cancer [1]. The metabolic fate of these modified nucleotides and their heterocyclic bases is still poorly understood. Understanding these processes could be significant for drug development. The aim of this study was to synthesize natural modified purines such as *N*⁶-methyladenine, *O*⁶-methylguanine and *N*²,*N*⁶-dimethylpurine from commercially available modified purines. All synthesized purines were purified by flash column chromatography. The purity and structure of synthesized compounds were determined by UV/Vis, NMR spectroscopy, TLC and HPLC-MS analysis.



1 scheme. Synthesis of modified purines

Further all modified purines were used as substrates to select enzymes involved in the catabolism of the modified heterocyclic bases. For this purpose, purine auxotrophy-based selection systems were used, which are similar to the previously described one [2]. These systems allow the selection of enzymes that convert modified purines into respective unmodified ones. *Escherichia coli* strains with *purH*, *purA*, *guaA* or *guaB* mutations were used to evaluate the enzymatic conversion of modified purines. It was found that certain tested modified purines, such as *N*⁶-methylguanine, *O*⁶-methylguanine, 6-chloroguanine supported the growth of purine auxotrophs, whereas other tested modified derivatives did not support the growth of *E. coli*. These phenomena are currently under investigation.

References:

- [1] Smail, C., & Montgomery, S. B. (2024). Annual Review of Genomics and Human Genetics, 25(1), 353–367.
- [2] Urbonavičius, J., Čekytė, A., & Tauraitė, D. (2025). International Journal of Molecular Sciences, 26(5), 1812.

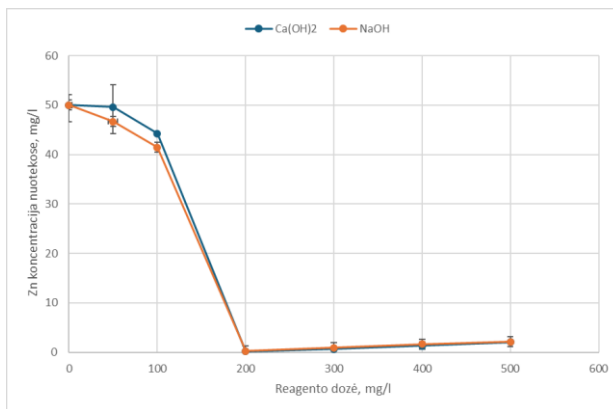
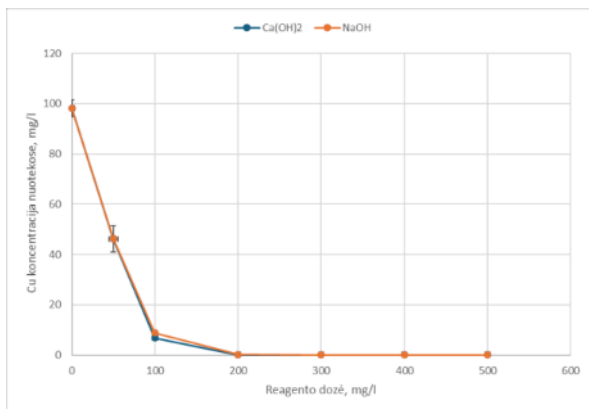
SUNKIŲJŲ METALŲ ŠALINIMO IŠ PRAMONINIŲ NUOTEKŲ TYRIMAS

Leonora Kirklytė^{1*}, Dalia Jankūnaitė¹, Martynas Tichonovas¹

¹ Aplinkosaugos technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva
leonora.kirklyte@ktu.edu

Į pramonines nuotekas sunkieji metalai dažniausiai patenka per tokius gamybos procesus kaip metalų apdirbimas, kasyba, baterijų ir elektronikos gamyba. Dėl savo didelio toksiškumo bei gebėjimo kauptis, jie kelia rimtą grėsmę aplinkai ir visuomenės sveikatai. Todėl metalų šalinimas iš nuotekų yra būtinas siekiant sumažinti šių pavojingų medžiagų poveikį, taip pat užtikrinti galimybę pakartotinai naudoti vandenį gamybos procesuose [1].

Pramoninių nuotekų valymas kelia nemažai iššūkių dėl įvairių trukdančių veiksnių, tokių kaip pH svyravimai, konkurencija tarp jonų, cheminių medžiagų sąveikos ir kt. [2]. Šiame darbe buvo tiriama Cu ir Zn pašalinimas iš modelinių ir realių pramoninių plovimo proceso nuotekų taikant cheminio nusodinimo metodą. Siekiant įvertinti optimalias nusodinimo sąlygas (pH, dozės) bei skirtingų reagentų (NaOH, $\text{Ca}(\text{OH})_2$) efektyvumą, buvo taikomas Jar test metodas, leidžiantis laboratorinėmis sąlygomis imituoti nuotekų valymo procesą ir nustatyti tinkamiausius parametrus metalų šalinimui [3].



1 pav. Cu ir Zn koncentracijos pokytis modelinėse nuotekose.

Atlikus tyrimus su modelinėmis nuotekos, kuriose pradinė Cu koncentracija buvo 100 mg/l, o Zn – 50 mg/l nustatyta, kad NaOH geriau kontroliuoja tirpalo pH ir sumažina ne tik metalų koncentraciją, bet ir išvalytų nuotekų drumstumą bei susidarančio dumblo kiekį, o $\text{Ca}(\text{OH})_2$ atveju susidarė daugiau dumblo, be to išvalytų nuotekų drumstumas buvo didesnis. Optimalus išvalymo efektyvumas pasiektas esant pH lygiams tarp 10 ir 11, o reagentų dozei - 200 mg/l (1 paveikslas).

Literatūros sąrašas

1. W. Jadaa, H. Mohammed // Heavy Metals Definition, Natural and Anthropogenic Sources of Releasing into Ecosystems, Toxicity, and Removal Methods – An Overview Study. Journal of Ecological Engineering, 2023, 24, 249–271.
2. A. Azimi, A. Azari, M. Rezakazemi, M. Ansarpour // Removal of Heavy Metals from Industrial Wastewaters: A Review. ChemBioEng Reviews, 4, 2017, 37–59.
3. M. Pivokonský, K. Novotná, L. Čermáková, R. Petříček // Jar Tests for Water Treatment Optimisation: How to Perform Jar Tests, London: IWA Publishing, 2022.

AMORFINIO TiO₂ PRIEDO ĮTAKA SINTETINIO GIROLITO STRUKTŪROS STABILUMUI HIDROTERMINĖMIS SĄLYGOMIS

Ričardas Kleinauskas^{1*}, Anatolijus Eisinas²

^{1,2} Silikatų technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas

*ricardas.kleinauskas@ktu.lt

Kalcio hidrosilikatas – girolitas pasižymi labai geromis adsorbcinėmis savybėmis sunkiųjų metalų jonams vandeniniuose tirpaluose bei gali būti naudojamas kaip priedas cementui siekiant keisti jo hidratacijos kinetiką [1]. Dėl didelio tarpplokštuminio atstumo tarp jo grandinės sudarančių [SiO₄]⁴⁻ tetraedrų, į girolito kristalų struktūrą gali įsiterpti daugelio cheminių elementų jonai. Ši savybė leidžia modifikuoti jo savybės ir praplėsti pritaikymo galimybes [2].

Prieš tai atlikti tyrimai parodė, kad amorfinio TiO₂ priedas turi įtakos tarpinių junginių egzistavimo trukmei ir persikristalizavimui į galutinį sintezės produktą girolitą [3]. Taip pat ištirta, kad minėtas priedas jau sintezės pradžioje įsiterpia į C-S-H(I) ir/arba į Z-fazę, kurie vėliau persikristalيزuoja į girolitą. Todėl vis dar lieka neaišku, ar šis priedas gali tiesiogiai įsiterpti į sintetinio girolito struktūrą. Siekiant tai įvertinti buvo iškeltas šio darbo tikslas – nustatyti amorfinio TiO₂ priedo įtaką sintetinio girolito struktūros stabilumui hidroterminėmis sąlygomis.

Girolito stechiometriją atitinkantis (C/S=0,66), CaO ir SiO₂ mišinys sumaišytas su vandeniu santykiu V/K = 10 ir hidrotermiškai apdorotas 48 val. 200 °C temperatūroje (I ciklas). Į gautą sintezės produktą buvo įmaišyta nuo 5 iki 20 % amorfinio TiO₂ priedo ir bandiniai papildomai hidrotermiškai apdoroti 24 val. 200 °C (II ciklas). Hidroterminė sintezė atlikta suspensijos nemaišant. Pradinės žaliavos ir sintezės produktai apibūdinti RSDA ir VTA metodais.

Nustatyta, kad po 48 val. hidroterminės sintezės, produkte vyrauja girolitas ir CaCO₃ pėdsakai, kurie susidarė dėl sąveikos su ore esančiu CO₂. Lyginant su vienstadijinės sintezės būdu (72 val. 200 °C) gautais produktais, po antro sintezės ciklo tiek grynoje sistemoje, tiek ir sistemose su skirtingu amorfinio TiO₂ priedo kiekiu stebimi intensyvesni girolitui būdingi difrakciniai maksimumai bei mažesnio intensyvumo CaCO₃ smailės. [3]. Ištirta, kad amorfinio TiO₂ priedas pilnai įsiterpia į sintetinio girolito struktūrą hidroterminėmis sintezės metu, nes RSDA kreivėse nėra identifikuojama jokių naujų kristalinių junginių visomis tyrimo sąlygomis. RSDA rezultatus patvirtino ir VTA duomenys: terminėse kreivėse nėra identifikuojama amorfinio TiO₂ kristalizacijai į anatazą (~450 °C) ir/arba rutilą (~600-700 °C) būdingų endoterminių virsmų.

Literatūros sąrašas

1. K. Baltakys, T. Dambrauskas, // Synthetic Gyrolite A Dual Solution for Wastewater Treatment and Portland Cement, Gewerbestrasse 11, Cham, Šveicarija, 2024
2. R. Šiaučiūnas, K. Baltakys, // Kalcio hidrosilikatai: filosilikatų grupės junginių sintezė, savybės ir panaudojimas, Studentų g. 54, Kaunas, Lietuva, 2010.
3. R. Kleinauskas, A. Eisinas // CHEMIJA IR GEOMOKSLAI: II-SIOS NACIONALINĖS CHEMIJOS IR GEOMOKSLŲ KONFERENCIJOS TEZĖS, Čiurlionio g. 21, Vilnius, Lietuva, 2025, 61

NAUJŲ 2-PIRAZOLILBENZIMIDAZOLO DARINIŲ SINTEZĖ

Kamilė Klimašauskaitė*, Melita Veikšaitė, Eglė Arbačiauskienė, Algirdas Šačkus

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*kamile.klimasauskaite@ktu.edu

Heterocikliniai junginiai, savo sudėtyje turintys benzimidazolo ir pirazolo fragmentus, pasižymi įvairiu biologiniu aktyvumu. Pirazolo fragmentas yra vienas iš labiausiai tiriamų dėl savo reikšmingo biologinio aktyvumo, tokio kaip priešvėžinis, priešuždegiminis, antioksidacinis, antigrybelinis, priešvirusinis, neuroprotekcinis [1, 2]. Benzimidazolo fragmentą turintys junginiai taip pat pasižymi reikšmingomis biologinėmis savybėmis - antibakterinėmis, antigrybelinėmis, priešvirusinėmis, antidiabetinėmis, priešuždegiminėmis [3]. Sujungus šiuos du heterociklinius fragmentus į vieną junginį, galima gauti biologiškai aktyvius biciklus, kurie yra svarbūs tolimesniame biologiškai aktyvių medžiagų kūrimo procese.

Pagrindinis šio darbo tikslas - iš 1-fenil-1H-pirazol-3-olio susintetinti 2-(1-fenil-3-metoksi-1H-pirazo-4-il)-1H-benzimidazolo darinius. Pirmiausia, iš 1-fenil-1H-pirazol-3-olio per kelias stadijas gautas 1-fenil-3-metoksi-1H-pirazol-4-karbaldehidas, kuris panaudotas kondensacijos-ciklizacijos reakcijoje su įvairiais o-fenilendiaminais. Gauti 1H-benzimidazoli papildomai N-alkilinti. Gautų junginių struktūros buvo nustatytos BMR spektroskopijos, MS spektrometrijos metodais.

Literatūros sąrašas

1. M. Li; H. Huang; Y. Pu; W. Tian; Y. Deng; J. Lu // A close look into the biological and synthetic aspects of fused pyrazole derivatives. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2022, **243**, 114739.
2. R. Sivaramakarthikeyan; S. Iniyaval; V. Saravanan; W. Lim; C. Mai; C. Ramalingan // Molecular Hybrids Integrated with Benzimidazole and Pyrazole Structural Motifs: Design, Synthesis, Biological Evaluation, and Molecular Docking Studies. *American Chemical Society (ACS)*, 2020, **5(17)**, 10085-10098.
3. S. Banerjee; S. Mukherjee; P. Nath; A. Mukherjee; S. Mukherjee; S.K. Ashok Kumar; S. De; S. Banerjee // A critical review of benzimidazole: Sky-high objectives towards the lead molecule to predict the future in medicinal chemistry. *Results in Chemistry*, 2023, **6**, 101013.

CONDUCTING POLYMER HYDROGEL FOR SMART DICLOFENAC-SODIUM DELIVERY: FORMULATION, CHARACTERIZATION, AND RELEASE KINETICS

Samuel A. Kosoko^{1*}, Ernestas Brazys^{1,2} and Arūnas Ramanavičius^{1,2}

¹ Department of Physical Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko str. 24, Vilnius LT-03225, Lithuania

² Department of Nanotechnology, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio Ave. 3, Vilnius LT-10257, Lithuania

*samuel.kosoko@chg.f.stud.vu.lt

Conducting polymer hydrogels are 3D crosslinked networks of conductive polymers that absorb large amounts of fluid while maintaining sufficient conductivity, biocompatibility, and easy modification. Their conductivity is a result of conjugated double bonds, which enables controlled drug release triggered by specific stimuli, enhancing treatment precision across various disorders [1-2]. Diclofenac (DCF), a widely used non-steroidal anti-inflammatory drug, provides analgesic, antipyretic, and anti-inflammatory effects but is associated with risks like cardiovascular events and gastrointestinal ulcers [3]. This study formulates and characterizes a Polypyrrole (PPy)-sodium dodecyl sulphate (SDS)-agarose-polyvinyl alcohol (PVA) hydrogel for the sustained release of DCF, addressing its rapid clearance and side effect profile.

The hydrogel was synthesized via in situ polymerization, where PPy-SDS was formed and incorporated into a PVA-agarose matrix. PVA-agarose matrix was prepared by boiling until 90 °C internal. The formulation involved preparing an ammonium persulfate (APS)-initiated PPy-SDS gel, which was washed, blended with 5% PVA and agarose solutions, crosslinked with citric acid, and polymerized overnight. The resulting hydrogel was shaped into spherical molds, dried, and immersed in a diclofenac sodium solution for swelling and drug loading studies.

Analysis of the formulation was conducted, with UV-Vis spectrophotometry used to quantify DCF loading and release efficiencies. Swelling behavior increased from 76.5% after 2 hours to 175.4% after 5 days, while drug loading efficiency improved from 12.7% at 2 hours to 28.2% after 5 days, indicating sustained drug loading. Over a 2-hour period, only about 14% of the drug was released. The results indicate an initial gradual release phase, followed by a slower, sustained diffusion phase, reaching a plateau at approximately 90 minutes.

These initial findings demonstrate the hydrogel's potential for controlled drug release. Further kinetic modelling will help elucidate the underlying release mechanisms.

References

1. A. Rana, M. Adhikary, P. K. Singh, B. C. Das, S. Bhatnagar. 'Smart' drug delivery: A window to future of translational medicine. *Frontiers in Chemistry* **10**, (2023). <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.1095598>
2. T.-C. Ho, C.-C. Chang, H.-P. Chan, T.-W. Chung, C.-W. Shu, K.-P. Chuang, T.-H. Duh, M.-H. Yang, Y.-C. Tyan. Hydrogels: Properties and Applications in Biomedicine. *Molecules* **27**, 2902 (2022). <https://doi.org/10.3390/molecules27092902>
3. W. Boumya, N. Taoufik, M. Achak, H. Bessbousse, A. Elhalil, N. Barka. Electrochemical sensors and biosensors for the determination of diclofenac in pharmaceutical, biological and water samples. *Talanta Open* **3**, 100026 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.talo.2020.100026>

CIKLINIŲ INDOLO DARINIŲ SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAI

Arnas Kovševič^{1*}, Asta Žukauskaitė², Vilija Kederienė¹

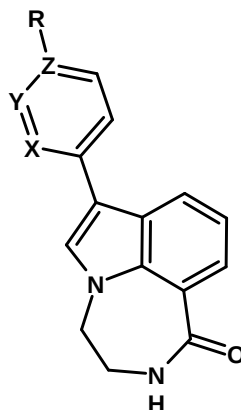
¹ Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

² Cheminės biologijos katedra, Gamtos mokslų fakultetas, Palackio universitetas, Olomouc, Čekijos respublika

*arnas.kovsevic@ktu.edu

Indolo dariniai atlieka svarbią reikšmę tiek organinėje, tiek ir medicininėje chemijoje. Jie pasižymi išskirtinėmis biologinėmis savybėmis, tokiomis kaip priešvėžinis, antimikrobinis, priešūždegiminis, antivirusinis, analgezinis poveikis ir kt. [1]. Ciklinės indolo darinių sistemos turi dar platesnes pritaikymo galimybes. Fermentas poli(ADP-ribozės)-polimerazė-1 (PARP-1) yra atsakingas už DNR regeneraciją. Yra žinoma, kad diazepinindolo sistema yra potencialus PARP-1 inhibitorius, kuris blokuoja fermento veiklą ir gali prailginti priešvėžinių terapinių preparatų veikimą [2-4].

Šio darbo tikslas – susintetinti naujas, ciklines indolo sistemas (1 pav.) ir ištirti jų savybes.



1 pav. Ciklinės indolo sistemos

Tiksliniai indolo dariniai gauti atliekant klasikines ir modernias sintezės reakcijas, tokias kaip *N*-alkilimas, ciklizacija, halogenimas, paladžio katalizuojamos kryžminio jungimo reakcijos. Darbo metu atlikta išsami naujai susintetintų indolo sistemų struktūrų analizė.

Literatūros sąrašas

1. S. Biswal // Indole: The molecule of diverse biological activities, 2012, 5, 1, 1–6.
2. J.G. Tikhe, et al. // Design, synthesis, and evaluation of 3,4-dihydro-2H-[1,4]diazepino[6,7,1-hi]indol-1-ones as inhibitors of poly(ADP-ribose) polymerase, 2004, 47, 22, 5467–5481.
3. H. Dureja, A.K. Madan // Topochemical models for the prediction of poly(ADP-ribose) polymerase inhibitory activity of indole-1-ones, 2008, 22, 4, 253–266.
4. N.A. Meanwell // Synopsis of some recent tactical application of bioisosteres in drug design, 2011, 54, 7, 2529–2591.

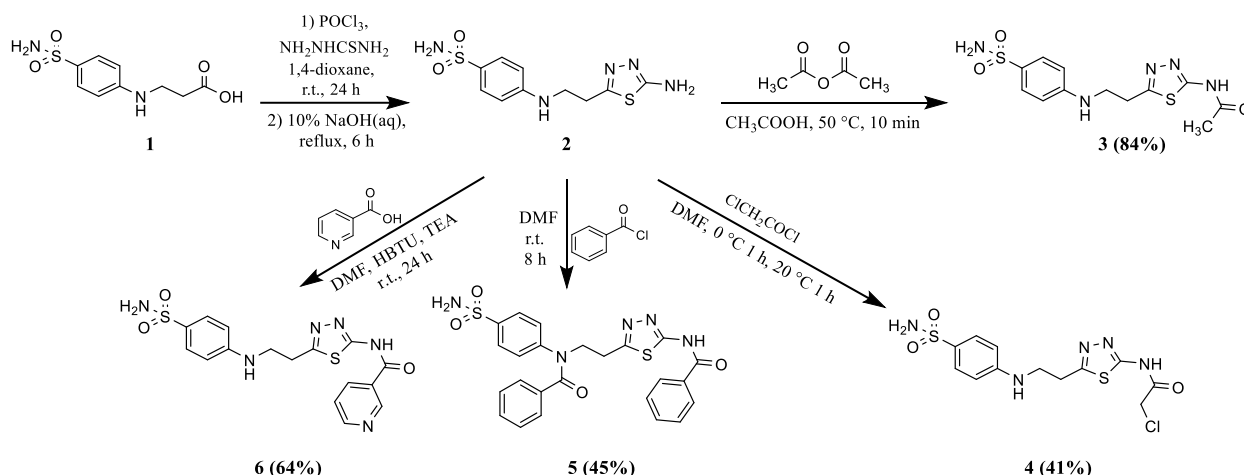
SYNTHESIS OF 1,3,4-THIADIAZOLE AMIDE DERIVATIVES

Augustas Kučinskas^{1*}, Kazimieras Anusevičius², Vytautas Mickevičius³

¹ Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, Kaunas University of Technology, Lithuania

*augustas.kucinskas@ktu.edu

1,3,4-Thiadiazoles are important five-membered heterocyclic compounds found in the structures of various drugs and possessing antimicrobial, antifungal [1], anticancer [2], insecticidal [3], antiviral [4], and herbicidal [5] biological activities.



Scheme 1. Synthesis of novel 1,3,4-thiadiazole amide derivatives **3–6**

New 1,3,4-thiadiazole amide derivatives containing a 4-aminobenzenesulfonamide moiety were obtained from 1,3,4-thiadiazole **2** which was synthesized according to known methodology (**Scheme 1**) [6]. Further in this work, an evaluation of the reactivity of amino groups was carried out. Compound **3** was obtained by the reaction of 1,3,4-thiadiazole **2** with acetic acid anhydride in good yield. By the reaction of 1,3,4-thiadiazole **2** with chloroacetyl chloride product **4** was synthesized. The diacylated derivative **5** was obtained when excess amount of benzoyl chloride was used. Compound **6** was formed by using niacin and coupling reagent HBTU according to the method [7]. By monitoring the reaction progress, it was found that only one product **6** was synthesized during the reaction. In summary, the acylation reactions first occur with the primary amine, and only then with the secondary amine, while the amide nitrogen was not reactive.

References

1. G. Serban, O. Stanasel, E. Serban, S. Bota // *Drug Des. Devel. Ther.*, 2018, **Vol. 12**, p. 1545–1566.
2. S. Iqbal et al. // *J. Photochem. Photobiol. B Biol.*, 2018, **Vol. 189**, p. 104–118.
3. A. M. El-Saghier et al. // *J. Agric. Food Chem.*, 2024, **Vol. 72**, nr. 20, p. 11369–11380.
4. G. Serban // *Molecules*, 2020, **Vol. 25**, nr. 4, p. 942–964.
5. W. Geng, Q. Zhang, L. Liu, G. Tai, X. Gan // *J. Agric. Food Chem.*, 2024, **Vol. 72**, nr. 31, p. 17191–17199.
6. L. Calvano, F. Gilson, F. Driessens, S. Petit // *Org. Process Res. Dev.*, 2022, **Vol. 26**, nr. 4, p. 1106–1114.
7. J. D. Goodreid, P. A. Duspara, C. Bosch, R. A. Batey // *J. Org. Chem.*, 2014, **Vol. 79**, nr. 3, p. 943–954.

DEVELOPMENT OF A MICROBIAL BIOFUEL CELL USING BIOCOMPATIBLE NANOCOMPOSITES

Beatričė Kulikauskaitė^{1*}, Antanas Zinovičius², Birutė Sapijanskaitė-Banevič³, Tomas Mockaitis²,
Arūnas Ramanavičius^{1,2}

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

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

³ Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, Kaunas University of Technology, Lithuania

*beatrice.kulikauskaite@chgf.stud.vu.lt

The expansion and rapid growth of industry has contributed to the generation of large amounts of wastewater. Their treatment is energy-intensive and in some cases uses expensive chemicals. In recent years, researchers have been focusing on new biotechnologies that can harness the organic matter in wastewater to produce energy while at the same time treating the wastewater [1]. In such cases, microbial biofuel cells (MBFCs) are becoming one of the most promising ways to recover energy from wastewater treatment. MBFCs are bioelectrochemical systems that generate an electric current by using micro-organisms, such as the yeast *Saccharomyces cerevisiae*, which convert chemical energy into electrical energy due to the biochemical redox processes occurring during the metabolism of the micro-organisms [2].

Despite numerous experiments, most microbial biofuel cells have one important and common drawback: low current density due to the complexity of the charge (e.g. electron) transfer between the micro-organism cells and the electrodes. By facilitating the transfer of charge from the micro-organisms to the electrode, the overall efficiency of MBFC can be significantly improved. One of the main obstacles to low charge transfer efficiency is the high electrical resistance of the micro-organism cell walls [3].

The use of certain conductive materials (e.g. electrically conductive polymers and nanoparticles) and/or the immobilisation of cells in complex matrices can improve charge transfer in microbial biofuel cells in order to increase current density. In addition, more efficient redox mediators that are less toxic and encapsulate the cells in a biocompatible electrically conductive polymer matrix can be used to increase the stability and efficiency of biofuel cells [8].

In the prototype system, a glucose concentration of 25 mmol/L, 0.1 M $K_4[Fe(CN)_6]/K_3[Fe(CN)_6]$ was used in the simulations and further measurements were made to determine which of the modified electrodes would generate the highest current under favourable conditions. The surfaces of the electrodes have been modified with polypyrrole and a layer of nanomaterials for better conductivity to increase the electron transfer between the yeast and the electrodes. The surface morphology of the modified electrodes was studied using a scanning electron microscope.

All modified electrode surfaces were found to improve electron transfer. In the system where the anode was modified with PPy/yeast/PQ the generated power was 11.7 mW/m². The biofuel cell with the anode modified with PPy/10 nm AuNPs/yeast/PQ was found to generate the highest power of all systems, with a maximum power of 1172.46 mW/m² and an increase of 677.72 times compared to the control system (1.73 mW/m²).

Reference list

1. Bose D. et al. // Sustainable power generation from sewage and energy recovery from wastewater with variable resistance using microbial fuel cell, *Enzyme and Microbial Technology*, 2018, **118**, 92–101
2. Rozene J. et al. // Yeast-based microbial biofuel cell mediated by 9,10-phenanthrenequinone, *Electrochimica Acta*, 2021, **373**, 137918
3. Kumar R. et al. // Microbial fuel cells and their applications: A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2016, **56**, 246–255
4. Kisieliute A. et al. // Towards microbial biofuel cells: Improvement of charge transfer by self-modification of microorganisms with conducting polymer – Polypyrrole, *Chemical Engineering Journal*, 2019, **356**, 1014–1021

ELEKTROCHROMINIO ELEMENTO BE ITO SAVYBIŲ TYRIMAS

Evaldas Kvietkauskas^{1*}, Karolis Ratautas²

¹ Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilnius

² Fizinių ir technologijos mokslų centras, lazerinių tyrimų skyrius, Vilnius

Elektrochrominiai elementai yra prietaisai, kurių pagalba galima reguliuoti prasiskverbiančią šviesą bei efektyviai blokuoti nepageidaujamą spinduliuotę. Šiems elementams kurti naudojamas indžio alavo oksidas (ITO), kuris naudojamas, kaip laidus skaidrus elektrodas. Bet jis yra brangus, trapus ir daugiausiai indžio atsargų yra Kinijoje, kurios senka, todėl reikalingos alternatyvos [1, 2].

Šiame darbe, pasitelkiant lazerines technologijas ant stiklo paviršiaus buvo sukurti metaliniai mikrotinkleliai, skirti naudoti kaip laidūs skaidrūs elektrodai. Ištirtos jų savybės bei pasirinktas dizainas. Gauta, jog femtosekundiniu lazeriu gaunamos siauresnės linijos, lyginant su pikosekundiniu lazeriu, optinio profilometro duomenimis.

Ant šio elektrodo sukamuoju būdu uždedamas plonas sluoksnis elektrochrominio PEDOT:PSS polimero. Išmatuotas optinis pralaidumas, išmatuotas užtamsėjimo periodas, atlikta ciklinė voltamperinė analizė.

Literatūros sąrašas

1. Angmo, D., Krebs, C. F. // Journal of Applied Polymer Science, 2013, 129, 1-14.
2. Ellmer, K. // Nature Photon, 2012, 6, 809-817.

FERMENTINĖS HIDROLIZĖS PROCESO PARAMETRŲ OPTIMIZAVIMAS, SIEKIAN- T PADIDINTI BIOLOGIŠKAI AKTYVIŲ JUNGINIŲ EKSTRAKCIJOS EFEKTYVUMĄ IŠ JUODŲJŲ SERBENTŲ IŠSPAUDŲ

Ugnė Mamonaitė^{1*}, Milda Pukalskienė²

¹ Kauno technologijos universitetas, Maisto mokslo ir technologijos katedra, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, Lietuva

*ugnmam@ktu.lt

Juodųjų serbentų išspaudos yra šalutinis produktas, susidarantis perdirbant uogas į įvairius gaminius, tokius kaip sultys, uogienės ir kt. Nors jos sudaro apie 20–30 % visos vaisiaus masės ir dažnai būna išmetamos kaip atliekos, šiose išspaudose vis dar gausu biologiškai aktyvių junginių, tokių kaip taninai, flavonoidai, antocianinai bei kiti biologiškai aktyvūs antriniai metabolitai [1, 2].

Šio tyrimo tikslas, taikant paviršiaus atsako metoda (Response Surface Methodology, RSM), nustatyti optimalias fermentinės hidrolizės sąlygas, leidžiančias maksimaliai išgauti vertingus junginius iš juodųjų serbentų išspaudų. Optimizacijai buvo pasirinkti du proceso kintamieji: proceso laikas ir fermento Vyscozyme koncentracija. Optimizavimas vertintas pagal bendrą fenolinių junginių kiekį (BFK), kuris buvo nustatytas taikant Folin–Ciocalteu metodą, ir pagrindinių antocianinų koncentraciją (cianidin-3-rutinozido, delfinidin-3-rutinozido, delfinidin-3-gliukozido ir cianidin-3-gliukozido). Jie nustatyti naudojant kiekybinę ir kokybinę analizę ultra efektyviosios skysčių chromatografijos masių spektrofotometrijos metodą [3].

Nustatyta, kad optimalios fermentavimo sąlygos yra: 4,20 val., 50 °C temperatūra ir 65 µL fermento. Esant šioms sąlygoms, ekstrakto išeiga – 23,80 mg/100 g sausosios masės (SM), BFK – 85 mg/g ekstrakto, o bendra pagrindinių antocianinų koncentracija – 61,50 mg/g ekstrakto.

Šis tyrimas atskleidžia fermentinės hidrolizės potencialą, kaip tvaraus ir efektyvaus metodo, leidžiančio panaudoti maisto pramonės šalutinius produktus ir gauti vertingus biologiškai aktyvius junginius iš juodųjų serbentų išspaudų.

Literatūros sąrašas

1. S. Sommer, J. L. Hoffmann, M. A. Fraatz, H. Zorn // Upcycling of black currant pomace for the production of a fermented beverage with Wolfiporia cocos, 2023, 60, 1313-1322.
2. B. Kruszewski, E. Boselli // Blackcurrant pomace as a rich source of anthocyanins: Ultrasound-assisted extraction under different parameters, 2024, 14, 2, 821.
3. E. Azman, Z. Zoric, K. Radić, Z. Knezović, B. Miličević // Extraction of Anthocyanins and Other Phenolics from Dried Blackcurrant (Ribes nigrum L.) Pomace via Ultrasonication, 2025, 9, 4, 100833.

PREPARATION OF Sm^{3+} IONS DOPED MgAl_2O_4 BY SOL-GEL POLYACRYLAMIDE SYNTHESIS

Pranga Prava Mandal^{1*}, Dovydas Karoblis¹, Aivaras Kareiva¹

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

*prava.mandal@chgf.stud.vu.lt

Luminescence is the emission of light from a substance that has absorbed energy, distinct from the light emitted due to heat. Specifically, it occurs when an electronically excited species, not in thermal equilibrium with its surroundings, spontaneously releases radiation. This process involves the absorption of energy, which elevates electrons to higher energy levels, followed by the emission of that energy as photons of light when the electrons return to their ground state. Essentially, luminescent materials convert absorbed energy into light emission (photons). This is known as excitation and emission. Luminescent materials are composed of a different matrix and an activator (usually transition element or lanthanide). Many different classes of materials can be used as matrices, including perovskites, pyrochlores, spinels, etc. In our experiment we are using MgAl_2O_4 spinel material as a matrix, which displays properties such as high hardness and mechanical strength, high melting point and good thermal shock resistance, wide optical transparency and a chemical inertness. While many different lanthanide ions, like Eu^{3+} [1], Ho^{3+} [2], have already been doped into the magnesium aluminate structure, there is no work regarding the Sm^{3+} substitution for this spinel for MgAl_2O_4 , which was prepared by sol-gel method using either EDTA or mixture between the EDTA and polyacrylamide. In this work, we investigated the possible Sm^{3+} ions doping into the MgAl_2O_4 system.

The MgAl_2O_4 spinel was synthesized by a sol-gel method, using either EDTA or the mixture between the EDTA and polyacrylamide. Both methods allow to prepare phase-pure MgAl_2O_4 compounds across a wide temperature range, from 700 °C to 1200 °C, with a notably short annealing time of two hours. It was observed that small amounts of Sm^{3+} ions doping nearly up to 1 mol % did not produce any impurity phases. The resulting compounds were thoroughly characterized using a variety of analytical techniques, including X-ray diffraction, scanning electron microscopy (SEM), and Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy. SEM analysis revealed a direct correlation between increasing temperature and increased particle size. FTIR spectroscopy confirmed the formation of the spinel structure.

Literatūros sąrašas

1. I. E. Kolesnikov, E. V. Golyeva, A. V. Kurochkin, M. Mikhailov, Structural and luminescence properties of $\text{MgAl}_2\text{O}_4\text{:Eu}^{3+}$ nanopowders, 2016, **654**, 32-38.
2. S. N. Manjula, M. Chandrasekhar, M. R. Anil Kumar, V. Bhoomika, N. Raghavendra, M. N. Somashekar, C. R. Ravikumar, H. Nagabhushana, Studies on photoluminescence, electrochemical sensors, and photocatalysis using Ho^{3+} -doped MgAl_2O_4 nanophosphors, 2024, **21.5**, 1245-1257.

OBUOLIŲ MILTELIŲ IR KSANTANO DERVOS ĮTAKA KEKSIUKŲ BE GLITIMO KOKYBEI

Vaida Mankutė, Dalia Čižeikienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas
vaida.mankute@ktu.edu

Įvadas

Didėjant žmonių skaičiui, kuriems nustatytas glitimo netoleravimas, taip pat didėja ir įvairių kepinų be glitimo paklausa. 2024 metų duomenimis, celiakija (autoimuninė liga, kai dėl glitimo netoleravimo kyla žarnyno uždegimas) nustatyta 1 % viso pasaulio gyventojų, o kiti sutrikimai susiję su glitimo netoleravimu sudaro 8,4 % pasaulio gyventojų. Todėl kvietiniai miltai dažniausiai keičiami miltais be glitimo - kukurūzų, ryžių arba įvairių riešutų. Dažniausiai kepiniai be glitimo pasižymi blogesnėmis tekstūros, išvaizdos ir juslinėmis savybėmis, todėl tokio tipo kepinų gamyboje naudojami įvairūs priedai kepinų kokybei ir juslinėms savybėms pagerinti [1]. Paskutiniu metu didelio susidomėjimo sulaukė obuolių išspaudų panaudojimo kepinuose galimybės, tiek asortimento didinimui, tiek aplinkosauginiu požiūriu. Plečiant kepinų asortimentą bei ieškant būdų kaip pagerinti jų skonį, tekstūrą, juslines savybes bei maistingumą, sudaromos įvairios priedų kombinacijos, pavyzdžiui, ksantano derva derinama su skaidulinėmis medžiagomis (pektinu), kurių daug yra obuolių bei kitų vaisių milteliuose arba išspaudose. Šio darbo tikslas – nustatyti obuolių miltelių (5 %, 10 %, 40 %) ir ksantano dervos (1 %) įtaką keksiukų be glitimo kokybei.

Tyrimo metodai

Tyrimo metu sudarytos septynios keksiukų be glitimo receptūros, nustatytas kepinų aukštis, tūris, savitasis tūris, drėgmės kiekis, nuokepis, tekstūros savybės bei atliktas kepinų juslinis vertinimas. Taip pat nustatyta baltymų, riebalų ir skaidulinių medžiagų kiekiai keksiukuose su 1 % ksantano dervos bei 40 % obuolių miltelių ir palyginti su kontroliniu kepinu. Keksiukų aukštis – tai jų išmatuotas skerspjūvio aukštis. Kepinų tūris prilyginamas sorų kruopų išstumtam tūriui, o savitasis tūris – tai kepinų tūrio ir masės santykis. Keksiukų masės skirtumas prieš kepimą ir po kepimo vadinamas nuokepiu. Drėgmės kiekis kepinuose nustatytas džiovinant mėginį 100-105 °C temperatūroje iki pastovios masės. Tekstūros tyrimai (kietumas, rišlumas, tamprumas) atlikti naudojant TA-XTplus ("Stable Micro Systems", UK) tekstūros analizatorių. Bendras baltymų kiekis nustatytas taikant Kjeldalio metodą, kai koeficiento reikšmė lygi 5,70, o riebalų kiekis – Soksleto metodu. Tiriamuosiuose mėginiuose nustatytas tirpių ir netirpių skaidulinių medžiagų kiekis taikant AOAC Method 991.43. Juslinio vertinimo metu dalyvavo 8 asmenys, kurie vertino šias keksiukų be glitimo savybes: spalvą, saldumą, akytumą, sausumą, priedo (obuolių miltelių) skonį, trapumą, kietumą bei bendrą priimtinumą.

Rezultatai ir jų aptarimas

Keksiukų be glitimo nustatytos savybių charakteristikos pateiktos 1 lentelėje. Didėjant obuolių miltelių koncentracijai, keksiukų aukštis, tūris, savitasis tūris mažėjo, bet drėgmės kiekis didėjo, nes obuolių milteliuose esančios skaidulinės medžiagos suriša didesnį vandens kiekį.

Ksantano derva darė teigiamą įtaką keksiukų aukščiui, tūriui, savitajam tūriui bei drėgmės kiekiui. Naudojant priedų ksantano dervos obuolių miltelių derinį, pastebėta, kad obuolių miltelių priedas turėjo tokią pat įtaką: mažėjo keksiukų aukštis, tūris ir savitasis tūris. Mažiausias drėgmės kiekis nustatytas kontroliniame mėginyje, o didžiausias – naudojant 10 % obuolių miltelių priedo. Naudojant 1 % ksantano dervos ir 40 % obuolių miltelių priedų, nustatytas didžiausias keksiukų $2,74 \pm 0,01$ cm aukštis, $110 \pm 0,83$ cm³ tūris, bei $2,51 \pm 0,02$ cm³/g savitasis tūris.

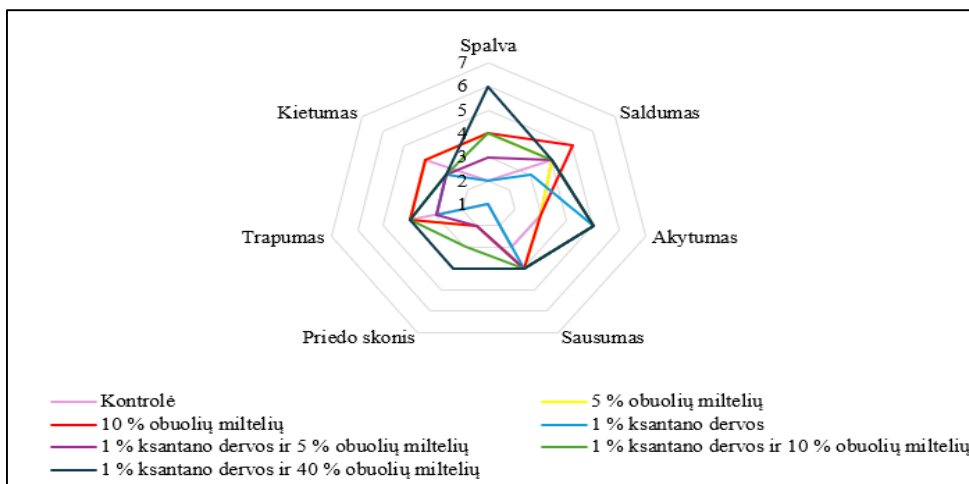
1 lentelė. Keksiukų be glitimo charakteristikos.

Receptūra	Nuokepis, %	Keksiuko aukštis, cm	Keksiuko tūris, cm ³	Savitasis tūris, cm ³ /g	Drėgmės kiekis, %
Kontrolė	9,5	$2,33 \pm 0,01$	$65 \pm 0,82$	$1,44 \pm 0,04$	$26,25 \pm 0,35$
5 % obuolių miltelių	10	$2,30 \pm 0,01$	$60 \pm 0,47$	$1,33 \pm 0,03$	$29,43 \pm 0,21$
10 % obuolių miltelių	5	$2,13 \pm 0,03$	$50 \pm 1,63$	$1,05 \pm 0,03$	$31,94 \pm 0,24$
1 % ksantano dervos	8	$2,59 \pm 0,04$	$90 \pm 0,51$	$1,96 \pm 0,02$	$30,00 \pm 0,30$
1 % ksantano dervos ir 5 % obuolių miltelių	10	$2,44 \pm 0,09$	$85 \pm 0,84$	$1,88 \pm 0,04$	$29,89 \pm 0,002$
1 % ksantano dervos ir 10 % obuolių miltelių	9	$2,10 \pm 0,01$	$80 \pm 0,94$	$1,76 \pm 0,02$	$30,21 \pm 0,22$
1 % ksantano dervos ir 40 % obuolių miltelių	12	$2,74 \pm 0,01$	$110 \pm 0,83$	$2,51 \pm 0,02$	$30,72 \pm 0,71$

Obuolių miltelių įtaka keksiukų kietumui priklausė nuo priedo koncentracijos: 5 % priedo mažino kietumą nuo $121,27 \pm 3,73$ N iki $103,98 \pm 2,23$ N, o 10 % priedo didino iki $122,35 \pm 5,02$ N. Priedas ksantano derva žymiai mažino kepinų kietumą iki $57,29 \pm 4,38$ N, o deriniai su 5 % ir 10 % obuolių miltelių taip pat mažino kietumą (atitinkamai $51,84 \pm 2,04$ N ir $45,70 \pm 5,72$ N). Kepinių rišlumas priklausė nuo priedų koncentracijų. Vertinant tik obuolių miltelių įtaką, 5 % priedo koncentracija padidino rišlumą nuo $0,386 \pm 0,038$ iki $0,408 \pm 0,023$, bet 10 % sumažino iki $0,337 \pm 0,032$. Rišlumo sumažėjimas taip pat nustatytas naudojant ksantano dervos priedą. Naudojant 1 % ksantano dervos ir 40 % obuolių miltelių priedų derinį, nustatytas rišlumas yra $0,353 \pm 0,003$. Nustatyta, kad tyrimo metu naudoti priedai didelės įtakos keksiukų be glitimo tamprumui neturėjo. Naudojant 1 % ksantano dervos ir 10 % obuolių miltelių priedų derinį nustatytas didžiausias tamprumas – $0,836 \pm 0,07$.

Keksiukų cheminės sudėties (baltymų, riebalų ir skaidulinių medžiagų) nustatymo rezultatai pateikti 3 lentelėje. Tyrimo metu kontrolinės receptūros mėginiuose nustatyta, kad baltymų kiekis yra $3,57 \pm 0,12$ %, riebalų – $17,58 \pm 0,35$ %, skaidulų – 2,10 % (iš kurių netirpios 1,69 %, o tirpios 0,41 %). Keksiukuose be glitimo su 1 % ksantano dervos ir 40 % obuolių miltelių priedų deriniu nustatytas baltymų kiekis yra $3,88 \pm 0,08$ %, riebalų $15,49 \pm 0,31$ %, skaidulų 4,39 %, iš kurių netirpios 2,73 % ir tirpios 1,66 %. Remiantis Europos parlamento ir tarybos reglamentu NR. 1924/2006 dėl teiginių apie maisto produktų maistingumą ir sveikatingumą, galima teigti, jog šis produktas yra skaidulų šaltinis, nes 100 g produkto yra mažiausiai 3g skaidulinių medžiagų [2].

Juslinio vertinimo rezultatai pateikti 1 paveiksle. Labiausiai priimtini buvo keksiukai, kuriuose naudota 1 % ksantano dervos ir 40 % obuolių miltelių.



1 pav. Keksiukų be glitimo jutulinio vertinimo rezultatai

Išvados:

1. Obuolių milteliai mažino keksiukų aukštį, tūrį bei savitąjį tūrį, tačiau dėl priedo gebėjimo surišti vandenį – didino gaminių drėgmės kiekį. Šio priedo įtaka kepinių tekstūros savybėms priklausė nuo koncentracijos. Naudojant 5 % obuolių miltelių priedą, sumažėjo kietumas bei padidėjo rišlumas, tačiau padidinus priedo iki 10 % – kietumas padidėjo, o rišlumas sumažėjo.
2. Ksantano derva turėjo teigiamą įtaką keksiukų be glitimo gamyboje. Šis priedas padidino keksiukų aukštį, tūrį, savitąjį tūrį ir drėgmės kiekį. Naudojant ksantano dervos ir obuolių miltelių priedų derinį, keksiukų be glitimo savybės kito. Naudojant derinį ir didinant obuolių miltelių koncentraciją nuo 5 % iki 10 %, mažėjo keksiukų aukštis, tūris ir savitasis tūris. Ksantano derva žymiai sumažino keksiukų be glitimo kietumą.
3. Vertinant bendrąjį priimtinumą, geriausiai įvertinti keksiukai be glitimo, kuriems naudota 1 % ksantano dervos ir 40 % obuolių miltelių priedų derinys.
4. Tyrimo metu buvo sukurta receptūra, kurios gaminius – be glitimo keksiukus – galima ženklinti kaip skaidulų šaltinį, nes nustatytas skaidulų kiekis buvo 4,39 %, iš kurių tirpios sudarė 2,73 %, o netirpios – 1,66 %.

Literatūros sąrašas

1. F. Salehi // Improvement of gluten-free bread and cake properties using natural hydrocolloids: A review, 2019, **7**, 11, 3391–3402.
2. Europos Parlamento ir Tarybos reglamentas (EB) Nr. 1924/2006 dėl teiginių apie maisto produktų maistingumą ir sveikatingumą, Briuselis 2006-12-20 (galiojanti suvestinė redakcija: 2014-12-13).

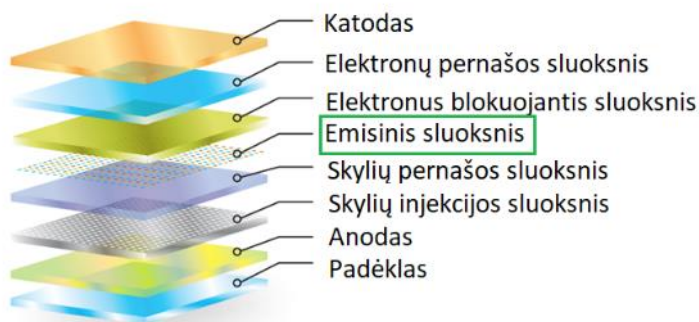
9,10-DIHDROAKRIDANIL FRAGMENTUS TURINČIŲ ELEKTROAKTYVIŲ ORGANINIŲ SPINDUOLIŲ SINTEZĖ IR SAVYBĖS

A. Marapolskis*, R. Keruckienė, J. V. Gražulevičius

Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijų universitetas, K. Baršausko g. 59, Kaunas, 51423 Kauno m. sav., Lietuva
*aurimas.marapolskis@ktu.edu

Organiniai šviesą skleidžiantys diodai (angl. OLED) – naudojami elektroniniuose vaizdą perteikiančiuose įrenginiuose, o OLED rinkos dydis kiekvienais metais sparčiai auga [1]. Priešingai nei skystųjų kristalų ekranai (angl. LCD), OLED įrenginiai neturi foninio šviesos šaltinio, todėl šios technologijos dėka galima išgauti plonesnius (nei LCD ekranai), lanksčius, aukšto spalvų kontrasto ir ryškumo vaizduoklius. [2]

OLED įrenginius sudaro katodo, elektronų pernašos, elektronus blokuojantis, emisinis, skylių pernašos, skylių injekcijos, anodo ir padėklo sluoksniai. Per prietaisą tekant elektros srovei, emisinis organinis sluoksnis skleidžia šviesą. [3] Siekiant pasiekti platų OLED prietaisų panaudojimą, efektyvių organinių spinduolių paieška išlieka aktuali.



1 pav. OLED struktūra. (<https://oled.com/oleds/>)

Bus pristatyta serija 9,10-dihidroakridanilfragmentus turinčių organinių spinduolių, pasižyminčių efektyvia mėlynos spalvos spinduliuote, bei nagrinėjama jų terminių, elektrocheminių ir fotofizikinių savybių priklausomybė nuo struktūros.

Literatūros sąrašas

1. HONG, Gloria; GAN, Xuemin; LEONHARDT, Céline; ZHANG, Zhen; SEIBERT, Jasmin ir kt. A Brief History of OLEDs—Emitter Development and Industry Milestones. *Advanced Materials*, vol. 33 (2021), nr. 9, pp. 2005630. ISSN 0935-9648. Prieiga per: <https://doi.org/10.1002/adma.202005630>.
2. IVANIUK, Khrystyna; STAKHIRA, Pavlo; YAREMCHUK, Iryna; KUTSIY, Stepan; BULAVINETS, Tetiana ir kt. (Tetrafluorovinylphenyl)carbazole as a Multifunctional Material for OLED Applications. *ACS Applied Electronic Materials*, vol. 5 (2023), nr. 4, pp. 2156–2168. Prieiga per: <https://doi.org/10.1021/acsaelm.3c00047>.
3. KANG, Kyungnam; BYEON, Inseop; KIM, Young Gu; CHOI, Jong-ryul ir KIM, Donghyun. Nanostructures in Organic Light-Emitting Diodes: Principles and Recent Advances in the Light Extraction Strategy. *Laser & Photonics Reviews*, vol. 18 (2024), nr. 8, pp. 2400547. ISSN 1863-8880. Prieiga per: <https://doi.org/10.1002/lpor.202400547>.

EVALUATION AND COMPARISON OF ANTIOXIDANT AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY IN LAVENDER AND SAGE CALLUS CULTURES IN VITRO

Tabita Maryam^{*1}, Ilona Jonuškienė¹, Rima Stankevičienė¹, Ingrida Tumosienė¹, Kristina Kantminienė²

¹ Department of Organic Chemistry, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

² Department of Physical and Inorganic Chemistry, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

*tabmar@ktu.edu

Natural extracts of lavender and sage are widely used in the pharmaceutical, cosmetic and food industries for their antioxidant, antibacterial, anti-diabetic, and anti-inflammatory properties. Both plants accumulate a wide range of phytochemicals, compounds, and essential oils, the composition and concentration of which can be influenced by various factors. These chemical compounds protect cellular functions and structures by reducing oxidative stress by neutralizing reactive oxygen species (ROS) [1]. The aim of this study is to evaluate and compare the antioxidant, phytochemical and antibacterial activity of medicinal plants [2].

The study was carried out using callus cultures of *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* grown in Murashige and Skoog medium supplemented with different cytokinins 6-benzylaminopurine (BAP) (0.2 mg/L) and thidiazuron (TDZ) (0.5 mg/L), the auxins 1-naphthylacetic acid (NAA) (0.1 mg/L), 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) (0.5 mg/L) and indole-3-acetic acid (IAA) (0.1 mg/L) and the additive L-tryptophan (0.5 mg/L). The antioxidant activity of the plant materials was evaluated by DPPH, FRAP, ABTS, and reducing power assays. The antioxidant enzyme activity of *Lavandula angustifolia* and *Salvia officinalis* callus cultures and plant extracts of leaves, blossoms and shoots was also evaluated in vivo. Antibacterial activity against *Bacillus subtilis* and *Escherichia coli* was measured using the Kirby-Bauer disc diffusion method.

It was found that chlorophyll *a*, chlorophyll *b*, carotenoids, antioxidant enzyme activity and total phenolic acid concentration were highest by lavender callus culture with TDZ (0.5 mg/L), IAA (0.1 mg/L) and L-tryptophan (0.5 mg/L). Studies have shown that both callus cultures grown with NAA (0.1 mg/L), BAP (0.2 mg/L) and 2,4-D (0.5 mg/L) gave the highest antioxidant activity by DPPH, FRAP and ABTS. The highest antibacterial activity against *Escherichia coli* was found in extract of lavender blossoms in vivo.

List of references

1. W. Hassan, H. Noreen H, S. Rehman, S. Gul, et al. // Current Topics in Medicinal Chemistry, 2017, 17, 12, 1336-1370.
2. I. Jonuškienė, R. Stankevičienė, K. Kantminienė, I. Tumosienė // Agriculture, 2023, 13, 8, 1529-1543.

KAVOS TIRŠČIŲ IR VANDENS KIEKIO ĮTAKA β -PUSHIDRAČIO GIPSO STIPRIUI GNIUŽDANT

Neringa Matutytė^{1*}, Nora Kybartienė¹

¹ Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

**neringa.matutyte@ktu.edu*

Kava yra vienas populiariausių gėrimų visame pasaulyje. Prognozuojama, kad 2030 metais kavos suvartojimas pasieks 12 mln. tonų [1]. Didelė kavos paklausa yra neatsiejama nuo kartu didėjančio atliekų kiekio, liekančio po kavos gamybos proceso. Daugiau nei 90 % susidarančių kavos tirščių patenka į sąvartynus, kur irdami išskiria kenksmingas šiltnamio efektą skatinančias dujas [2]. Visgi, kavos tirščiuose yra gausu įvairių naudingų medžiagų, tokių kaip (hemi)celiuliozė, ligninas, riebalai, aliejai bei kiti bioaktyvūs junginiai, kuriuos galima išskirti ir panaudoti kuriant aukštesnės pridėtinės vertės produktus [3]. Tačiau išsamesnės informacijos apie po medžiagų išskyrimo liekančių kavos tirščių pritaikymo galimybes, jog šie vėl netaptų atlieka, šiuo metu trūksta.

Šio tyrimo tikslas yra nustatyti 20 °C ir 100 °C temperatūros vandeniui apdorotų kavos tirščių vandens ir kietos medžiagos santykio įtaką β -pushidračio gipso stipruminėms savybėms. Medžiagos analizuotos taikant VTA, RSFA, RSDA metodus bei naudojant optinį mikroskopą. Paruošus β -pushidračio gipso su (ne)apdorotu 5 % (pagal masę) kavos tirščių priedu mišinius buvo nustatytos tokios bandinių savybės, kaip vandens/kietos medžiagos santykis (V/K), stipris gniuždant bei tankis.

Nustatyta, kad bandinių, kuriuose naudoti kavos tirščiai buvo apdoroti 20 °C temperatūros vandeniui, V/K santykis normalios konsistencijos tešlai gauti sumažėjo nuo 0,70 iki 0,65 lyginant su bandiniais, kuriuose buvo naudotas neapdorotas priedas. Tuo tarpu kavos tirščius apdorojus 100 °C temperatūros vandeniui, reikalingas V/K santykis sumažėjo iki 0,60. Gauti rezultatai parodė, kad didėjant V/K santykiui, gipso bandinių su 5 % (ne)apdorotu kavos tirščių priedu stipris gniuždant mažėja. Tačiau bandinių su 20 °C ir 100 °C temperatūros vandeniui apdorotu priedu stipris gniuždant buvo atitinkamai 4-11 % ir 35 % didesnis negu bandinių, kuriuose buvo naudoti neapdoroti kavos tirščiai. Buvo nustatyta tiesinė priklausomybė tarp gipso bandinių stiprio gniuždant bei tankio. Taip pat ištirta, kad didėjant V/K santykiui, kavos tirščių dalelių susitraukimas gipso bandiniuose didėja, o tai turi įtakos ir bandinių stipriui.

Apibendrinant galima pasakyti, kad gipso bandiniuose naudojant 5 % kavos tirščių priedą ir didinant V/K santykį, bandinių stipris gniuždant mažėja. Skirtingos temperatūros vandeniui apdorojus kavos tirščius, bandinių stipris gniuždant padidėjo nuo 4 % iki 35 % lyginant su bandiniais, kuriuose buvo naudotas neapdorotas priedas.

Literatūros sąrašas

1. B. Yusufoglu et al. // Bio-recycling of spent coffee grounds: Recent advances and potential applications, 2024, **55**, 101111.
2. M. Lauberts et al. // Spent Coffee Grounds Valorization in Biorefinery Context to Obtain Valuable Products Using Different Extraction Approaches and Solvents, 2022, **12**, 1, 30.
3. V. Kafková et al. // Integrated Approach to Spent Coffee Grounds Valorization in Biodiesel Biorefinery, 2023, **15**, 7, 5612.

GREEN SEMICONDUCTORS: SYNTHESIS AND ANALYSIS OF INDIUM SULFIDE THIN FILMS

Aistis Melnikas^{1*}, Yudania Sanchez Gonzalez², Vidas Pakstas³, Skirma Zalenkiene¹, Asta Bronusiene¹

¹ Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Kaunas University of Technology, Lithuania

² Institut de Recerca en Energia de Catalunya (IREC), Spain

³ Department of Characterisation of Materials Structure, Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius

*aistis.melnikas@ktu.edu

Thin films are essential in advancing modern technologies due to their wide range of applications in electronics, optoelectronics, and energy systems. Chemical synthesis methods—such as chemical bath deposition (CBD) and solvothermal processes—offer environmentally friendly, low-cost, and scalable alternatives to physical deposition techniques, aligning with current efforts toward greener materials processing [1][2].

Indium sulfide is a non-toxic, cadmium-free semiconductor with a suitable band gap (~2.0–2.3 eV) and high optical absorption, making it an environmentally responsible choice for replacing more hazardous compounds like CdS [3]. Its properties make it highly suitable for use in sustainable photovoltaic and photocatalytic systems [4].

The ecological and functional advantages of In_2S_3 have stimulated growing interest in its application as a buffer layer in thin-film solar cells, as well as in photodetectors and gas sensors [5][6]. The material's performance is closely tied to the quality and morphology of the thin films, which can be fine-tuned through chemical synthesis routes [7].

In this work we have synthesized thin indium sulfide films by chemical bath deposition method. Structural and morphological analyses, including X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM), confirmed the successful formation of crystalline In_2S_3 thin films.

This study demonstrates an environmentally friendly and cost-effective method for producing indium sulfide thin films. The results support the advancement of environmentally friendly materials for future optoelectronic and energy applications, providing a sustainable alternative to more harmful and resource-demanding materials.

References.

1. K. L. Chopra, S. R. Das // Thin Film Solar Cells, 1983. – Plenum Press.
2. R. Ortega-Borges, D. Lincot // Journal of The Electrochemical Society, 1993, t. 140, Nr. 12, p. 3464–3473.
3. C. D. Lokhande, et al. // Materials Research Bulletin, 2014, t. 59, p. 118–130.
4. F. Cao, et al. // Applied Surface Science, 2010, t. 256, Nr. 15, p. 4829–4833.
5. M. Ristov, et al. // Thin Solid Films, 1991, t. 200, Nr. 1, p. 67–72.
6. H. M. Pathan, C. D. Lokhande // Bulletin of Materials Science, 2004, t. 27, Nr. 2, p. 85–111.
7. R. S. Mane, C. D. Lokhande // Materials Chemistry and Physics, 2000, t. 65, Nr. 1, p. 1–31.

IZOTIURONIO DRUSKŲ, TURINČIŲ FOSFONRŪGŠTIES ARBA KARBOKSIRŪGŠTIES INKARINĘ GRUPĘ, SINTEZĖ IR TAIKYMAS PEROVSKITINIUIOSE SAULĖS ELEMENTUOSE

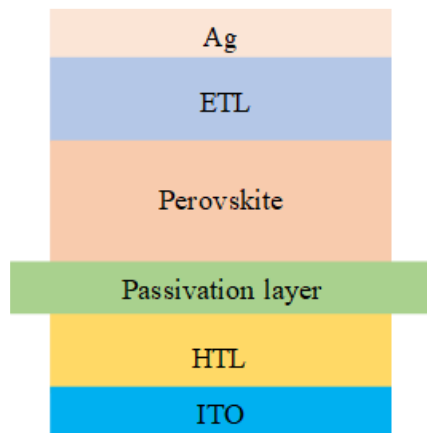
Justina Mikučiūnaite^{1*}, Kasparas Rakštys²

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

*justina.mikuciunaite@ktu.edu

Saulės energija yra viena iš labiausiai naudojamų atsinaujinančios energijos rūšių ir tai yra viena iš priežasčių, kodėl šiuo metu ypač daug dėmesio skiriama perovskitinių saulės elementų plėtrai. Perovskitiniai saulės elementai (PSE) yra sparčiai besivystanti trečiosios kartos technologija, kuri jau pasiekė didesnę energijos konversijos efektyvumą nei silicio saulės elementai [1]. Perovskitinių saulės elementų gamyba yra paprastesnė, patys elementai yra lengvi ir lankstūs, o tai padidina jų pramoninio taikymo galimybes. Nepaisant šių privalumų, perovskitai yra labai jautrūs aplinkos veiksniams, o gamybos metu susidaro įvairūs kristalinės gardelės defektai. Dažniausiai šiems defektams sumažinti arba pašalinti taikoma perovskito paviršiaus pasyvacija organinėmis druskomis [2].

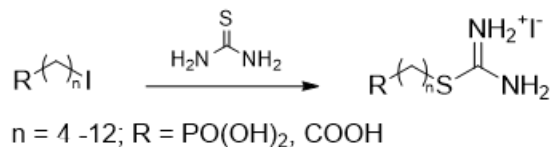
Anksčiau atlikti tyrimai parodė, kad izotiuironio grupė gerai sąveikauja su perovskito sluoksniu, todėl junginiai, turintys šią grupę, yra tinkami perovskito pasyvacijai. Perovskitinis sluoksnis gali būti pasyvuojamas iš viršaus arba apačios, tačiau šiai dienai geriausi rezultatai buvo pasiekti pasyvuojant perovskito sluoksnį iš apačios [1 pav.].



4 pav. Perovskitinio saulės elemento schema su pasyvuojant iš apačios.

Dėl šios priežasties svarbu atsižvelgti ir į sąveiką tarp skylių transportinio sluoksnio ir perovskito bei pasyvavimui naudojamos organinės druskos kad būtų užtikrintas kuo didesnis saulės elemento efektyvumas. Pagal pateiktą schemą [2 pav.] buvo susintetintos organinės izotiuironio druskos su fosfonrūgšties inkarine grupe bei jos pritaikytos perovskitinių saulės elementų pasyvavimui. Pastebėta, kad pasyvavimui pritaikius gautus junginius perovskitinių saulės elementų efektyvumas buvo pagerintas, tačiau ilgėjant $-CH_2-$ fragmentų skaičiui, prastėja druskų tirpumas. Siekiant pagerinti gautus rezultatus ir perovskitinių saulės elementų pasyvavimo procesą buvo pasirinkta susintetinti analogiškus junginius su karboksirūgšties inkarine grupe.

Fosfonrūgštys ir karboskirūgštys gerai sąveikauja su skylių transportiniu sluoksniu, užtikrindamos greitą krūvio pernašą ir pagerindamos bendrą perovskitinio saulės elementų veikimą [3].



2 pav. Sintezės schema.

Šiame darbe buvo palyginti bifunkciniai pasyvavimo agentai, turintys izotiuonio bei fosfonrūgšties arba karboskirūgšties fragmentus, ir įvertintas jų poveikis perovskito saulės elementams.

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos lėšomis, sutarties nr. [S-ST-24-19].

Literatūros sąrašas

- [1] T. Chowdhury // RSC Advances, 2023, **13**, 3, 1787 – 1810.
- [2] Yu, X., Sun, X. Angewandte Chemie International Edition, 2025, **64**, 4, e202419608.
- [3] Du, K. Materials, 2023, **16**, 23, 7306.

BIOLOGICAL HEAVY METAL FILTER UTILIZING THE PROTOZOAN TETRAHYMENA THERMOPHILA BIOACCUMULATION PROPERTIES

Mindaugas Matijūnas^{1*}, Remigijus Ivanauskas¹

¹ Kaunas University of Technology, Department of physical and inorganic chemistry.

*mindaugas.matijunas@ktu.edu

Dissolved heavy metals in wastewater represent a persistent threat to both environmental and public health due to their chronic toxicity [1]. Conventional treatment approaches—such as chemical precipitation and membrane ultrafiltration—are often energy-intensive and may not be sustainable at lower contaminant concentrations [2]. Alternatively, biological processes offer an environmentally friendly solution by exploiting the innate abilities to sequester heavy metals via mechanisms including bioprecipitation, biosorption, and bioaccumulation [3].

In this study, the bioaccumulation potential of the protozoan *Tetrahymena thermophila* was evaluated for a suite of heavy metals. The bioaccumulatory properties of *T. thermophila* were harnessed by designing a novel filter – constructed from recycled, compressed scrap textiles (dimensions: 2.5 cm × 5.0 cm × 0.25 cm) – into which a concentrated suspension of nutrients with protozoa was inlaid. As a renewable nutrient source, spirulina was used to replace conventional peptone. The optimized biofilter achieved cell densities between 20,000 and 32,000 cells/cm³ and bioaccumulated approximately 90% (47.02 μM) of Zn²⁺ ions from wastewater over a three-day period. The bioaccumulation capacity, measured during toxicity evaluations (0.17 – 0.22 ng/cell), was comparable to that observed in the filter tests (0.12 – 0.19 ng/cell).

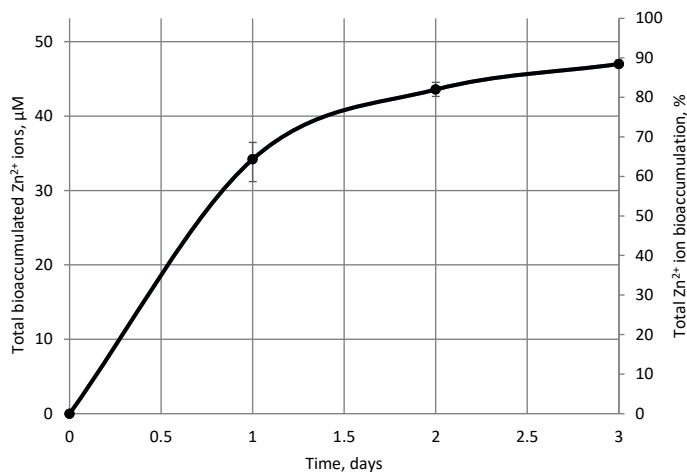


Fig. 1. Left – biofilter design. Points indicate areas where concentrated cell nutrient suspension was inlaid. Right – Bioaccumulation capacity of the tested filter. Initial Zn²⁺ concentration – 53.15 μM.

References

1. K. Vikas, SciMed Central // Chemical Engineering & Process Techniques. 8(3): 1082, 2023
2. N. A. A. Qasem, R. H. Mohammed, D. U. Lawal // npj Clean Water 4, 36, 2021
3. P.R. Sreedevi, K. Suresh, G. Jiang // Journal of Water Process Engineering, Volume 48, 2022

CONSTRUCTION AND IMPLEMENTATION OF MACHINE LEARNING INTERATOMIC POTENTIALS FOR H_3PO_4 SYSTEMS

Gabrielius Mockus^{1*}, Deimantas Šmigelskas¹, Rokas Silkinis¹, Linas Vilčiauskas¹

¹ Department of Chemical Engineering and Technology, Center for Physical Sciences and Technology, Lithuania

**gabrielius.mockus@ftmc.lt*

The use of machine learning in computational chemistry is growing quickly. One area where this is especially useful is in the construction of machine-learned interatomic potentials (MLIPs), which are now supported by the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [1].

MLIPs offer two key advantages: they are generally more accurate than traditional empirical interatomic potentials, and they allow for faster simulations while using fewer computational resources compared to methods like Density Functional Theory (DFT).

During our research, we have constructed an MLIP for H_3PO_4 and systems similar to it [2]. The main aim was to explore how proton conduction works in H_3PO_4 , as well as similar systems. Since H_3PO_4 is known to be one of the best pure proton conductors [3], studying its behavior could help improve fuel cell technologies and also deepen the understanding of proton transport in biological systems [4].

The results suggest that correctly implemented MLIPs can accurately model the molecular dynamics of these systems, achieving performance close to DFT but with much lower computational cost.

Literature

1. J. Hafner // Journal of Computational Chemistry, 2008, **29**, 13, 2044-2078.
2. R. Jinnouchi // Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, **24**, 25, 15522-15531.
3. L. Vilčiauskas, M. Tuckerman, G. Bester, S. J. Paddison, K.-D. Kreuer // Nature Chemistry, 2012, **4**, 6, 461–466.
4. A. Mikalčiūtė, L. Vilčiauskas // Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, **23**, 10, 6213-6224.

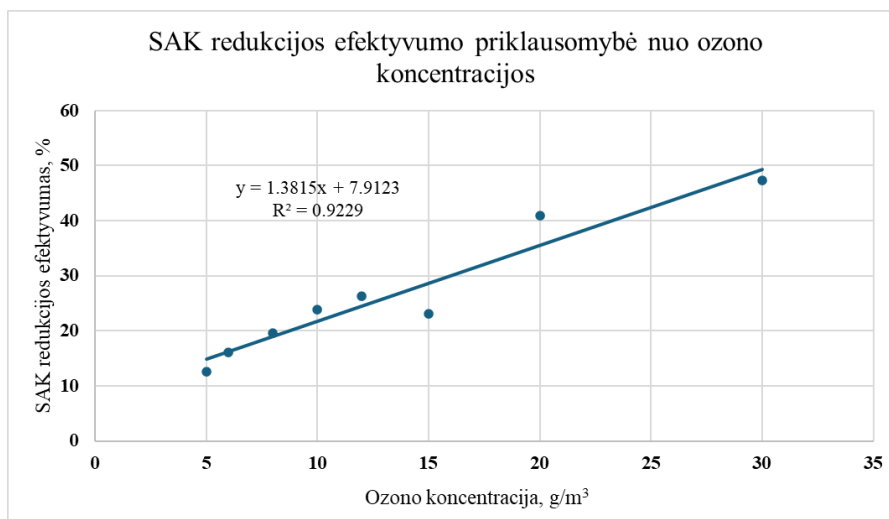
KETVIRTINIO NUOTEKŲ VALYMO EFEKTYVUMO VERTINIMO REALIU LAIKU GALIMYBIŲ TYRIMAI

Emilija Mockutė, Povilas Reškevičius, Inga Urniežaitė

Aplinkosaugos technologijų katedra, KTU, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, Lietuva. [*emilija.mockute@ktu.edu](mailto:emilija.mockute@ktu.edu)

Tikslas. Įvertinti SAK metodo taikymo galimybes ketvirtinio nuotekų valymo efektyvumui kontroliuoti.

Miestų nuotekų valymo įrenginiai efektyviai šalina organines medžiagas, azotą ir fosforą, tačiau ne mikroteršalus, tokius kaip PFAS, farmacinės medžiagos ir ftalatai, kurie kelia grėsmę aplinkai ir žmonių sveikatai. ES, siekdama suvaldyti šias rizikas, priėmė naują miesto nuotekų valymo direktyvą, numatančią ketvirtinio valymo diegimą. EMPEREST projekte UAB „Kauno vandenys“ bandomas ketvirtinio valymo prototipas, teršalų pašalinimo efektyvumas stebimas realiu laiku taikant 254 nm SAK matavimus ir analizuojant ištirpusios organinės anglies (IOA) koncentraciją. 1pav. atvaizduojama SAK redukcijos efektyvumo priklausomybė nuo ozono koncentracijos.



1 pav. SAK redukcijos efektyvumo priklausomybė nuo ozono koncentracijos

Išvados. Ozonavimo metu SAK mažėja sparčiau nei IOA, nes pirmiausia oksiduojamos aromatinės struktūros, o GAA filtracijos metu SAK ir IOA mažėja tolygiai, nes aktyvioji anglis adsorbuoja įvairius organinius junginius.

Padėka. EMPEREST projektui už galimybes pasinaudoti Interreg Baltijos jūros regiono programa 2021-2027 m.

Literatūros sąrašas

1. Z. Béalu, J. Walther, A. Abusafia, K. Altmann, M. Meurer, O. Gretzschel, M. Schäfer, H. Steinmetz // Removal of Organic Micropollutants and Microplastics via Ozonation Followed by Granular Activated Carbon Filtration., 2024, 11 (11), 241–241.
2. K. S. Kim, B. S. Oh, J. W. Kang, D. M. Chung, W. H. Cho, Y. K. Choi // Effect of Ozone and GAC Process for the Treatment of Micropollutants and DBPs Control in Drinking Water: Pilot Scale Evaluation, 2005, 27(1), 69–79.

SILICIO PAVIRŠIUJE SUFORMUOTŲ FOSFOLIPIDINIŲ MEMBRANŲ ELEKTROCHEMINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS

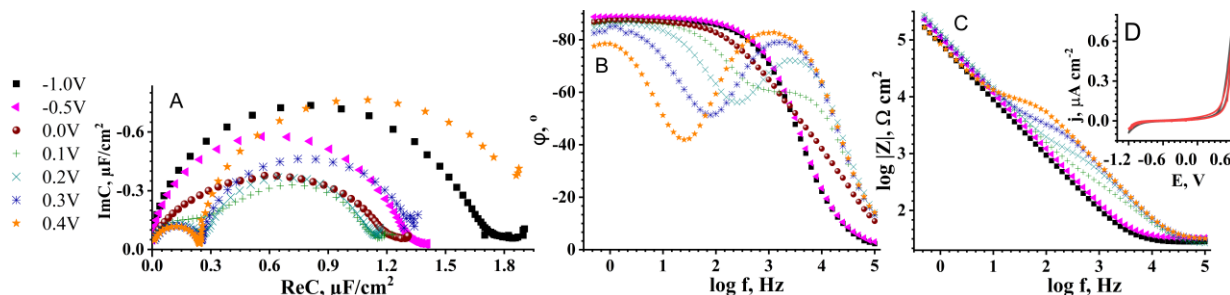
Kajus Momgaudis^{1*}, Aušra Valiūnienė¹

¹ Chemijos institutas, chemijos ir geomokslių fakultetas, Vilniaus universitetas, Lietuva

*kajus.momgaudis@chgf.stud.vu.lt

Fosfolipidinių membranų tyrimai yra ypač svarbūs mokslinėse srityse, siekiančiose perprasti biologiniuose procesuose vykstančius reiškinius. Struktūrinį pagrindą sudarantys fosfolipidų dvisluoksniai atlieka signalų perdavimą ląstelėse, bei prisideda prie svarbių ląstelių funkcijų, tokių kaip apsauginė-barjerinė paskirtis ar medžiagų transportas. Šios biologinės sistemos jau yra plačiai ištirtos ant metalų [1, 2] ir metalo oksidinio paviršių [3], tačiau tokių substratų paviršiaus nelygumai kelia problemų dėl nepakankamo rezultatų atkuriamumo.

Rezultatų sklaidos problema siejama su nevienodu naudojamų paviršių šiurkštumu. Todėl šio tyrimo tikslas buvo suformuoti ir tirti prikabintas lipidinių dvisluoksnių membranas (tBLM, angl. *Tethered Bilayer Lipid Membrane*) ant atomiškai lygaus poliruoto silicio paviršiaus. tBLM formavimui silicio paviršiuje buvo suformuotas savitvarkis monosluoksnis (SAM), naudojant oktadeciltrichloro silano (OTS) junginį. Kadangi suformuoto SAM elektrocheminės savybės gali lemti tBLM reikšmingumą ir kuriamų tBLM jutiklių jautrumą poras formuojančių toksinų nustatymui, todėl šiame darbe buvo atlikti SAM ir tBLM elektrocheminiai tyrimai, naudojant elektrocheminio impedanso spektroskopijos (EIS) metodą.



1 pav. Si paviršiuje suformuoto OTS SAM elektrocheminiai tyrimai PBS, pH 7,1. A: EIS kompleksinės talpos grafikas B: EIS Bode fazės grafikas. C: EIS impedanso modulio grafikas. D: OTS SAM ciklinė voltamperograma. Visi EIS spektrai buvo fiksuoti nuo 10^5 Hz iki 0,5 Hz, naudojant Ag/AgCl (3M KCl) palyginamąjį elektrodą.

Naudojantis EIS metodu gaunamas gausus informacijos kiekis apie globalias substrato elektrochemines bei tarpfazines savybes. Šios kritinės įžvalgos sudaro pagrindą tolesniam biologijos ir medžiagų mokslo vystymuisi, leidžia tiksliau modeliuoti membraninių sistemų savybes bei numatyti jų veikimą realiomis sąlygomis.

Literatūros sąrašas

1. T. Sabirovas, A. Valiūnienė, G. Valincius // Mechanically Polished Titanium Surface for Immobilization of Hybrid Bilayer Membrane Journal of The Electrochemical Society, 2018, **165**, 10, G109-G115.
2. T. Sabirovas, A. Valiūnienė, G. Valincius // Hybrid bilayer membranes on metallurgical polished aluminum Scientific Reports, 2021, **11**, 1, 1-11.
3. I. Gabrūnaitė, G. Valinčius, A. Žilinskas, A. Valiūnienė // Tethered Bilayer Membrane Formation on Silanized Fluorine Doped Tin Oxide Surface, Journal of The Electrochemical Society, 2022, **169**, 3, 037515

TERMOJAUTRŲS DEKSTRINO DARINIAI: SINTEZĖ, SAVYBĖS IR TAIKymo GALIMYBĖS

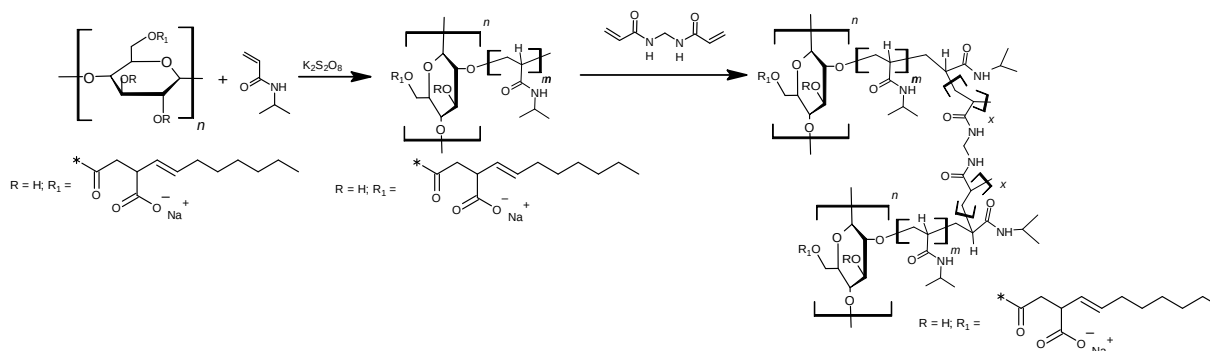
Emilija Morkvėnaitė*, Ramunė Rutkaitė, Miglė Savickė

Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

*emilija.morkvenaite@ktu.edu

Termojautrūs polimerai yra itin svarbūs šiuolaikinėje medžiagų chemijoje ir biomedicinoje dėl savo gebėjimo keisti fizines ir chemines savybes, reaguojant į temperatūrinius pokyčius. Tinkamai modifikuojant tokius sintetinius ir biopolimerus, juos galima pritaikyti, kuriant termojautrius hidrogelius, išmaniąsias dangas ir bioaktyvių junginių įkapsuliavimo sistemas [1].

Šiame darbe buvo susintetinti termojautrūs tinklini dekstrino oktenilsukcinatų ir poli(*N*-izopropilakrilamido) (PNIPAM) kopolimerai (1 schema). Pirmajame sintezės etape radikalinės polimerizacijos būdu susintetinti skiepytieji kopolimerai, prie dekstrino oktenilsukcinatų, kuriuose oktenilsukcinato grupių kiekis svyravo nuo 4,37 iki 10,67 %, grandinių suformuojant šonines PNIPAM grandines. Antrajame etape, skiepytieji kopolimerai buvo sutinklini, naudojant *N,N'*-metilenbisakrilamidą. Dekstrino darinių cheminė sudėtis ir jos pokyčiai buvo įvertinti naudojant FT-IR spektroskopiją, o terminės charakteristikos – termogravimetrinę analizę ir diferencinę skenuojamąją kalorimetriją.



2 schema. Dekstrino darinių ir *N*-izopropilakrilamido kopolimerizacijos ir tinklinimo *N,N'*-metilenbisakrilamidu reakcijų schema

Visų kopolimerų vandeninius tirpalus/dispersijas šildant, pasiekus 31–33 °C temperatūrą, vyko fazių atsiskyrimas ir jiems buvo būdinga žemutinė kritinė tirpumo temperatūra. Tinklėtų darinių brinkimo tyrimai, atlikti skirtingo pH terpėse, parodė, kad rūgštinėje terpėje ir aukštesnėje temperatūroje brinkimas intensyvesnis, taip pat didesnį brinkimą įtakojo didesnis oktenilsukcinato grupių kiekis. Tinklini dekstrino dariniai buvo panaudoti gamtinių ekstraktų (artišokų ir žaliųjų kavos pupelių) imobilizavimui, suformuojant tabletes. Ekstraktų atpalaidavimo iš tablečių įvairiose terpėse tyrimai patvirtino šių medžiagų potencialą, kuriant kontroliuojamo veikliųjų medžiagų atpalaidavimo sistemas.

Literatūros sąrašas

1. K. Zhang // Thermo-Responsive Hydrogels: From Recent Progress to Biomedical Applications, 2021, **Vol. 7**, No. 3, p. 77.

DERIVATIVES OF 2,7-DIBROMO-9,9-DIMETHYL-9H-FLUORENE and 2,7-DIBROMO-9,9-SPIROBIFLUORENE AS ELECTROACTIVE MATERIALS

R., Naghizade, A., Kalatozishvili, R., Keruckienė, J. V. Gražulevičius

Department of Polymer Chemistry and Technology,
Faculty of Chemical Technology,
Kaunas University of Technology
Radvilėnų pl. 19, Kaunas, Lithuania
rashad.naghizade@ktu.edu

Low-molar-mass and polymer organic light emitting diodes have attracted considerable attention due to their great application potential in large area flat panel displays and solid state lighting [1]. Such devices tend to have multilayer device configuration with a hole transport layer, an electron transport layer and an emissive layer, and some of them also have a hole injection and an electron injection layer [2].

The selection of appropriate materials for each layer is of great importance. Generally, the molecular structures of hole transport materials usually contain electron-donating moieties, such as carbazole, triarylamine, diphenylamine, N-phenyl-1-naphthylamine etc. [3]. However, traditional methods for synthesizing electroactive materials have notable drawbacks such as low reaction yields, longer reaction times, dependence on hazardous, expensive and moisture-sensitive reagents, as well as involving large amounts of reactants. Additionally, these methods often require intense reaction conditions, longer workup procedures, and difficulties in catalyst regeneration.

In this work, we employed efficient Suzuki coupling reactions of 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene and 2,7-dibromo-9,9'-spirobifluorene with (B-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-boronic acid and (6-Phenyldibenzo[b,d]furan-4-yl)boronic acid. Their thermal, electrochemical, and photophysical properties will be presented.

Reference List

1. A., Holmes Nature 2003 421 800–801.
2. P., Strohrigl, J.V., Gražulevičius Adv Mater 2002 14 1439–1452.
3. Y., Shirota, H., Kageyama Chem Rev 2007 107 953–1010.

NANOSTRUCTURIZATION OF BARE GOLD ELECTRODES FOR BIOFUEL CELL APPLICATIONS: DROP-CASTED NANOPARTICLES VS ELECTROCHEMICALLY FORMED SURFACES

Mindaugas Oksas¹, Arnas Naujokaitis¹, Dalius Ratautas², Rasa Rutkienė², Vitalija Jasulaitienė¹, Rolandas Meškys², Marius Dagys², Rokas Žalnėravičius^{1,2}

¹Centre for Physical Sciences and Technology, Sauletekio av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania

²Institute of Biochemistry, Life Sciences Center, Vilnius University, Saulėtekio av. 7, LT-10257 Vilnius, Lithuania
mindaugas.oksas@gmc.stud.vu.lt

Direct electron transfer (DET) between redox enzymes and electrodes has been widely studied to understand electron transfer and develop third-generation biosensors and biofuel cells [1]. Since the potential drops caused by mediated electron transfer (MET) are higher than the DET ones, the latter usually exhibit lower onset potentials and, consequently, higher open circuit voltages (OCV). These properties become crucial to maintaining modern, ultra-low-power devices such as implantable sensors [2-3]. Many efforts have been addressed to improve DET reactions towards the nano-structurization of bare electrode surfaces. However, even in labs, their modification is challenging. Scalable nano-structuring methods of nano-structurization would be of great interest for biosensor and biofuel cell applications.

The electrochemically fabricated nanoporous gold (nPG), as well as highly nanoporous gold (hPG) electrodes, represent a very promising alternative for the scale production of nanostructured electrodes. The morphology of the hPG electrode exhibits a well-defined porous structure with a diameter ranging from 12 to 43 μm , as confirmed by scanning electron microscopy (SEM) analysis (Fig. 1 a). The porous gold matrix is made of oval-shaped structures with sizes ranging from 33 to 97 nm (Fig. 1 b). In this study, nPG, hPG and Au NPs modified electrode surfaces were synthesized and further used to improve DET-based bioanode performances. It was shown that the glucose dehydrogenase-based bioanode exhibit higher current densities on the hPG electrodes compared to nPG and drop-casted Au NPs-modified gold electrodes (Fig. 1 c)

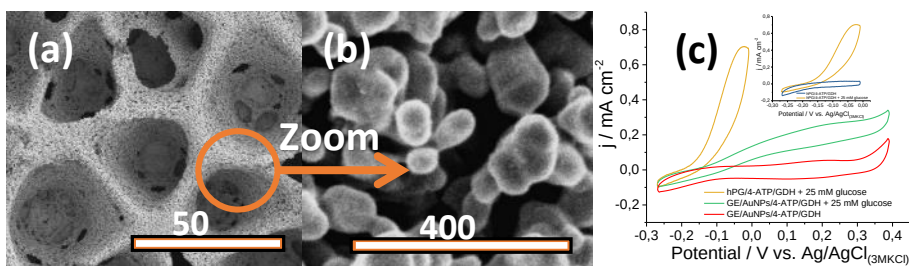


Fig. 1. Top-side SEM images of the highly porous gold (hPG) electrode (a, b) produced via two-step electrochemical processes: electro-deposition and hydrogen bubble template. Cyclic voltammograms (c) show the DET performances of bioanodes based on glucose dehydrogenase immobilized on the hPG and Au NPS-modified gold electrodes.

References:

1. P. Bollella, Y. Hibino, K. Kano, L. Gorton, R. Antiochia // *Anal. Chem.* (2018), **90**, 20, 12131-12136.
2. T. Ruzgas // *Encyclopedia of interfacial chemistry*, 2018 209–216.
3. M.J. Moehlenbrock, S.D. Minteer // *Chem. Soc. Rev.*, (2008), **37**, 1180-1196.

OPTIMIZATION OF STEAM METHANE REFORMING FOR ECONOMIC AND ENVIRONMENTAL PERFORMANCE

Henry Jonhson C. Omekara*, Nieves G. Pedros Chamorro*, Rimvydas Abromavičius, Andrius Jaskūnas

Department of Physical and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology KTU, Lithuania

[*henry.omekara@ktu.edu](mailto:henry.omekara@ktu.edu), nieves.pedros@ktu.edu

As the global energy demand continues to rise and concerns about climate change intensify, the search for sustainable and low-emission energy alternatives has become more urgent than ever. Hydrogen has emerged as a promising energy carrier due to its high energy content, versatility, and potential to support decarbonization across multiple sectors. However, most of the hydrogen produced today comes from fossil fuels through processes like steam methane reforming (SMR), which are associated with significant CO₂ emissions. Recent advancements in SMR technology including carbon capture, utilization and storage (CCUS) and process intensification, have reduced its environmental impact and are classified under "blue hydrogen" pathways. These enhancements represent an important transition phase, but they still rely on natural gas and are not fully emission-free. [1]

This paper explains that hydrogen production through SMR remains the most economically viable method today. As a result, the main focus is on optimizing SMR not only to improve its cost-effectiveness, but also to reduce its environmental burden. Improvements in heat integration, reactor design, and emissions control are discussed, along with strategies like partial substitution with green hydrogen. Although renewable methods such as water electrolysis powered by solar and wind energy offer a carbon-free alternative, their current high costs and scalability limitations hinder their wide-scale adoption at this stage. [2]

To support the optimization process, a simulation study was carried out using Aspen HYSYS, a process modeling software widely used in the chemical industry. A model was developed for a methane reforming system with a production capacity of 30,000 kg/h, corresponding to the natural gas consumption of current technology. Technological enhancements included modifying the temperature regime of the primary reformer, reducing the fuel gas requirement, increasing air input to the secondary converter, and enriching it with pure oxygen to maximize methane conversion. Additionally, 30% green hydrogen (relative to total hydrogen produced) was introduced. Simulation results showed that by supplying 3,101 kg/h of raw hydrogen, the amount of gas combusted was reduced from 18,000 kg/h to 13,000 kg/h, leading to a CO₂ emission reduction of approximately 8,294 kg/h. These findings demonstrate that targeted process optimization of SMR, supplemented by green hydrogen, can offer significant environmental benefits while maintaining economic feasibility.

References

- [1] V. Nikolaidis, A. Poullikkas // Hydrogen Production Technologies: From Fossil Fuels toward Renewable Sources, 2017, Volume 5, Issue 2, Pages 1–17.
- [2] V. Almansoori, A. Betancourt-Torcat, M.M. El-Halwagi // Techno-economic Evaluation of Deploying CCS in SMR Based Merchant H₂ Production with NG as Feedstock and Fuel, 2017, Volume 5, Issue 5, Pages 500–509.

CELL FATE DETERMINATION POST-ELECTROPORATION: UNVEILING THE IMPACT OF INTRACELLULAR MOLECULE LEAKAGE

Anusiya Panneerselvam^{1*}, Baltramiejus Jakštys², Saulius Šatkauskas²

¹Biochemistry Cathedral, Nature Science faculty, Vytautas Magnus University, Kaunas, Lithuania

²Cell and Tissue Biotechnology laboratory, Research Institute of Natural and Technological Sciences, Vytautas Magnus University, Kaunas, Lithuania

*anusiya.panneerselvam@stud.vdu.lt

Electroporation applies high-voltage electrical pulses to alter cellular membrane permeability. This leads to two mechanistically distinct forms of cell death: first-stage irreversible electroporation (FirEP), through catastrophic membrane failure, and latestage irreversible electroporation (LirEP), through delayed stress responses induced cell death after initial pore resealing. In this study, we investigated intracellular molecule loss and how these molecules impact cell viability following electroporation. We investigated CHO-K1 cells using flow cytometry and clonogenic assays. Results indicated that cell fate, either recovery or irreversible permeabilization, is determined within 35 minutes post-electroporation. FirEP occurred following intense pulsing, whereas LirEP followed moderately strong electric fields. Interestingly, balancing electroporation buffer with electroporation supernatant (EP SN) which contained extracted intracellular content from irreversibly electroporated cells partially rescued LirEP-affected cells, highlighting the significance of EP SN maintaining cell homeostasis after EP. Further we demonstrated that loss of intracellular macromolecules (>30 kDa), but not the loss of small molecules such as ATP, is the major cause of reduced electroporated cell viability. This verifies the hypothesis that macromolecules as proteins and nucleic acids that leaked via transient pores play a significant role in increasing cell survival after EP. These findings give mechanistic insight into the impacts of molecular leakage during electroporation and provide strategies for minimizing delayed cell death. In conclusion, this concept sheds more light on cell death due to electroporation and offers a framework for the improvement of electroporation-based treatments.

2-ALKENILTIOIMIDAZOLŲ ELEKTROFILINĖS CIKLIZACIJOS REAKCIJOS, SKIRTOS IMIDAZO[2,1-*b*][1,3]TIAZINŲ SINTEZEI

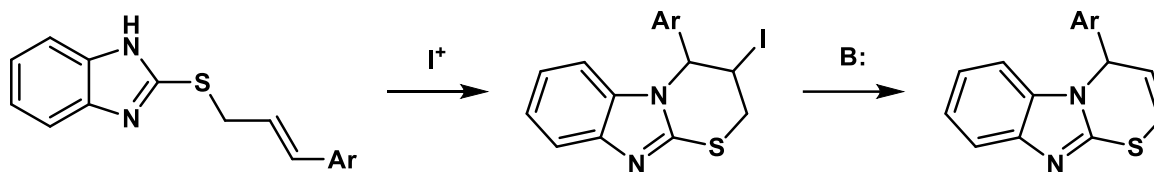
Martyna Paulauskaitė^{1*}, Ieva Žutautė¹

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

**martyna.paulauskaite@chgf.stud.vu.lt*

Imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentą turinčių junginių biologinių savybių spektras yra itin platus, apimantis prieštuberkuliozinį [1], priešūždegiminį [2], priešgrybelinį [3] bei amiloidų agregaciją slopinantį [4] poveikį. Šiems junginiams būdingas puikus cheminis stabilumas ir gebėjimas selektyviai sąveikauti su įvairiomis biomolekulėmis, todėl jie itin patrauklūs tiek sintetiniu, tiek medicininio požiūriu.

Imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinai gali būti sintetinami įvairiais keliais. Šiuo metu populiarus būdas yra alkinų elektrofilų inicijuojamos nukleofilinės ciklizacijos reakcijos. Tokiu būdu galima efektyviai formuoti imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino žiedus, išlaikant aukštą selektyvumą bei gerą reakcijos išeigą. Tačiau 2-alkeniltioimidazolų elektrofilų inicijuojama ciklizacija iki šiol nėra išsamiai tyrinėta. Todėl šio darbo tikslas yra ištirti 2-alkeniltioimidazolų elektrofilinės ciklizacijos metodus, naujų imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino junginių sintezei.



1 schema. Benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinų sintezė

Pradiniu junginiu buvo pasirinktas 2-cinamiltiobenzimidazolas, kuris buvo susintetintas per kelias stadijas. Toliau, naudojant įvairius elektrofilinius I⁺ šaltinius, buvo optimizuotos ciklizacijos reakcijos sąlygos, kurių metu susidarė imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino dariniai su gerai nueinančia grupe (1 schema). Vėliau šiuos junginius paveikus baze, jodas buvo nesunkiai eliminuojamas. Tačiau priklausomai nuo reakcijos sąlygų buvo gauti skirtingi junginiai, kas suteikia galimybę kontroliuoti reakcijos selektyvumą.

Literatūros sąrašas

1. J. X. Gong // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements 2016, **191**, 7, 1036–1041.
2. N. Slyvka // Current Chemistry Letters, 2023, **12**, 2, 335–342.
3. M. D. LaFleur // Journal of Antimicrobial Chemotherapy, 2011, **66**, 4, 820–826.
4. I. Misiunaite // ACS Chemical Neuroscience, 2024, **15**, 24, 4418–4430.

PENKTOJE PADĖTYJE CIKLINIAIS AMINAIIS IR AMIDAIIS MODIFIKUOTŲ 1-CHLOR-2,4-DIMETOKSIBENZENŲ SINTEZĖ

Ugnius Popovas*, Ieva Žutautė

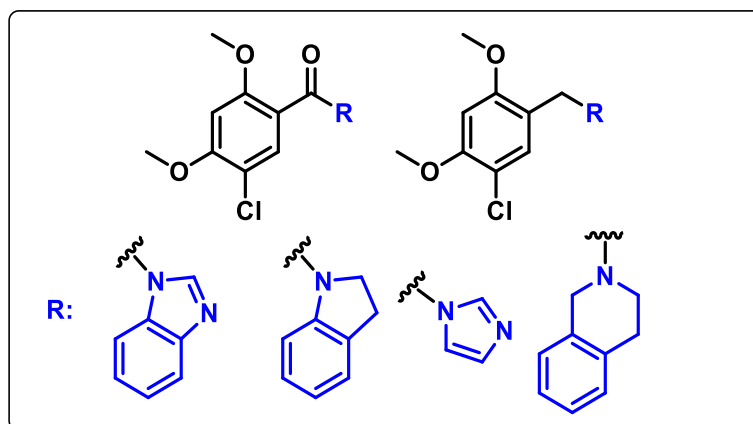
Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas, Lietuva

*ugnius.popovas@chgf.stud.vu.lt

Hsp90 (angl. Heat Shock Protein) yra vienas pagrindinių molekulinų šaperonų, atsakingas už daugiau nei 300 klientinių baltymų brendimo procesų reguliavimą. Daugelis šių baltymų yra susiję su sunkiai gydomomis ligomis, tokiomis kaip vėžys, neurodegeneraciniai bei infekciniai susirgimai. Dėl to Hsp90 laikomas svarbiu taikiniu ieškant naujų sintetinių baltymo slopiklių. Vienas iš pagrindinių jo farmakoforų yra rezorcinolio fragmentas. Jo hidroksigrupės formuoja vandenilinius ryšius su Hsp90 N-terminalio domeno aminorūgštimis, o tai lemia baltymo slopinimą. Dėl šios savybės rezorcinolio fragmentą turintys junginiai plačiai taikomi kuriant pažangesnius antros kartos Hsp90 slopiklius [1].

Norint sukurti naujas struktūras, pasižyminčias geresnėmis baltymo slopinimo savybėmis, buvo nuspręsta susintetinti junginius, kurių sudėtyje yra rezorcinolio fragmentą turintys amidai ir aminorūgštys. Bazinė molekule pasirinktas 4-chlorrezorcinolis.

Pirmiausia į šio junginio šeštąją padėtį buvo įvesta aldehido grupė. Antrajame etape, atsižvelgiant į planuojamus tolimesnius sintezės žingsnius, 4-chlorrezorcinolio hidroksigrupės buvo apsaugotos naudojant metiljodidą. Trečiajame etape sintezė išsišakoja: vienu keliu aldehido grupė oksiduota iki karboksirūgšties naudojant kalio permanganatą, o vėliau ši rūgštis kondensuota su pasirinktais aminorūgštimis, taip gaunami amidai. Kita sintezės kryptis – aldehido redukcija iki pirminio alkoholio, kuris vėliau, dviejų pakopų reakcijoje, pirmiausia brominamas fosforo tribromidu, po to vykdomas nukleofilinis pakeitimas tiksliniais aminorūgštimis.



1 schema. Tikslinių sintetintų junginių, turinčių 1-chlor-2,4-dimetoksibenzeno fragmentą, struktūros.

Literatūros sąrašas:

1. Li, L., Wang, L., You, Q., & Xu, X. // Heat Shock Protein 90 Inhibitors: An Update on Achievements, Challenges, and Future Directions. (2019). *J. Med. Chem.*, **63**(5), 1798–1822.

3-[(2,4-DIFLUORFENIL)AMINO]PROPANO RŪGŠTIES DARINIŲ SINTEZĖ IR CHEMINĖS SAVYBĖS

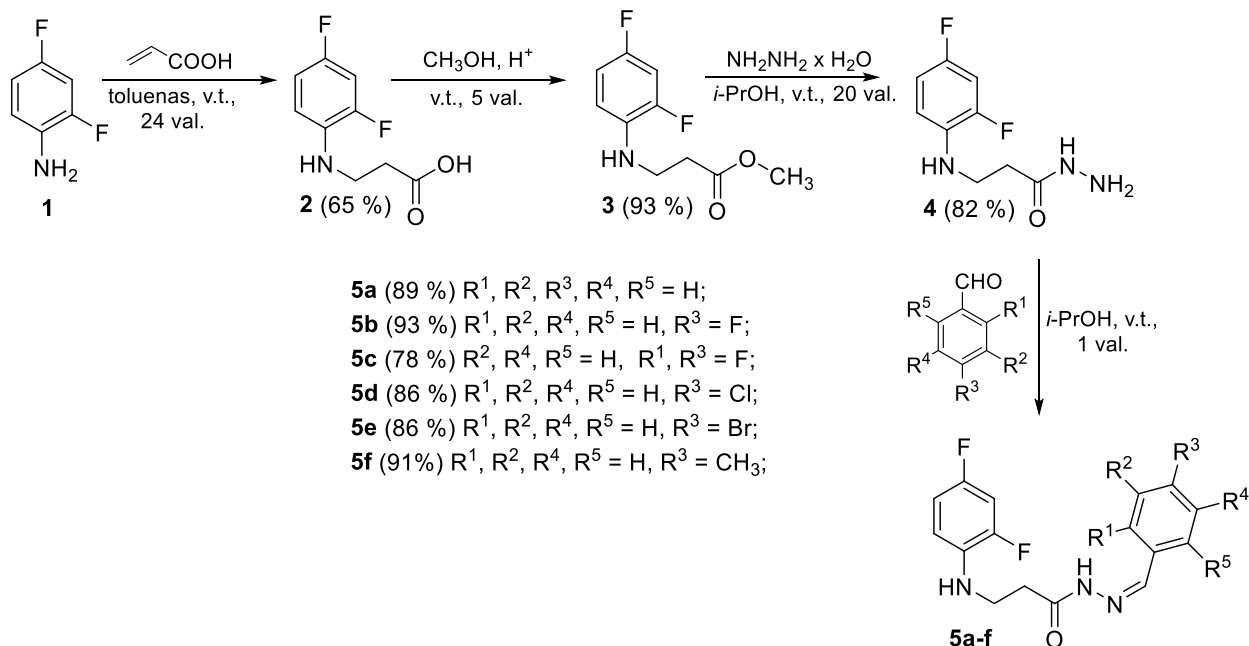
Guoda Pranaitytė^{1*}, Birutė Grybaitė¹

¹ Kauno technologijos universitetas, Organinės chemijos katedra, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, Lietuva

*guoda.pranaityte@ktu.edu

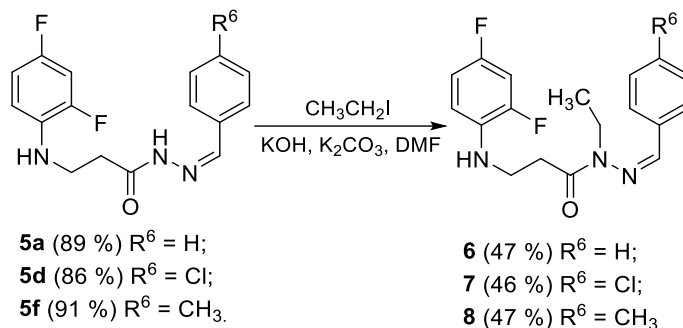
Fluoro atomas pasižymi unikaliomis savybėmis – stipriu elektroneigiamumu bei nedideliu van der Waals'o spinduliu, skaitine reikšme panašiu į vandenilio atomo spindulį. Dėl šių savybių aromatiniai fluoro fragmentai dažnai įtraukiami į vaistines molekules, siekiant pagerinti jų metabolinį stabilumą, modifikuoti lipofiliškumą, toksiškumą bei farmakokinetines vaisto savybes [1]. Medicininėje chemijoje dėmesio sulaukia ir hidrazono fragmentą turintys junginiai, kurių sintezė nesudėtinga, o biologinis aktyvumas gana platus: antioksidacinis, antibakterinis, analgetinis, priešvėžinis [2].

Siekiant susintetinti molekules, turinčias aromatinį fragmentą su fluoro atomais, pradiniu sintezės junginiu naudotas 2,4-difluoranilinas (**1**), kuriam reaguojant su akrilo rūgštimi, esant mišinio virimo temperatūrai, suformuota 3-[(2,4-difluorfenil)amino]propano rūgštis (**2**). Vykiant esterifikacijos reakciją gautas propanoatas **3**, kuris vėliau panaudotas hidrazido **4** sintezėje. Tolimesniame tyrimų etape buvo susintetinta eilė hidrazono fragmentą turinčių darinių **5a–f**, šiam tikslui hidrazidas **4** ištirpintas 2-propanolyje, į mišinį pridėta atitinkamo aromatinio aldehido ir reakcija vykdyta mišinio virimo temperatūroje 1 valandą (**1 schema**).



1 schema. Pradinių medžiagų **2–4** ir hidrazono fragmentą turinčių 3-[(2,4-difluorfenil)amino]propano rūgšties darinių **5a–f** sintezė

Norint daugiau sužinoti apie tikslinio taikinio struktūrą bei padidinti susintetintų hidrazonų lipofiliškumą, buvo ištirtos junginių **5a**, **5d** bei **5f** alkilinimo reakcijos jodetanu. Ištirpinus minėtus hidrazonus dimetilformamide jie buvo veikiami jodetanu, reakcijos mišinyje esant kalio hidroksido ir kalio karbonato, gauti etilo fragmentą turintys dariniai **6**, **7**, bei **8** (2 schema).



2 schema. Hidrazono fragmentą turinčių junginių **5a**, **5d** ir **5f** alkilinimo reakcija

Junginių struktūros patvirtintos 1H BMR, ^{13}C BMR, FT-IR spektroskopijų, elementinės analizės duomenimis. Priešvėžinis junginių aktyvumas šiuo metu tiriamas Merilando universiteto Mikrobiologijos ir Imunologijos katedroje (angl. *Department of Microbiology and Immunology, University of Maryland School of Medicine, Baltimore, MD, 21201, USA*).

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (LMT) projekto S-ST-24-23 lėšomis.

Literatūros sąrašas

1. E. Henary, S. Casa, T. L. Dost, J. C. Sloop, M. Henary // The Role of Small Molecules Containing Fluorine Atoms in Medicine and Imaging Applications. *Pharmaceuticals*, 2024, 17, 3, 281.
2. R. Çakmak, E. Başaran, S. Kaya, S. Erkan // Synthesis, spectral characterization, chemical reactivity and anticancer behaviors of some novel hydrazone derivatives: Experimental and theoretical insights, 2022, 1253, 132224.

FERMENTACIJOS TAIKYMAS AUGALŲ POŽEMINĖS DALIES BIOLOGIŠKAI VEIKLIŲ MEDŽIAGŲ IŠGAVOS PADIDINIMUI

Rugilė Raudžiūtė, Vilma Kaškonienė

Instrumentinės analizės Atviros prieigos centras, Gamtos mokslų fakultetas, Vytauto Didžiojo universitetas, Lietuva
rugile.raudziute@stud.vdu.lt

Fermentacija iš augalų padeda išlaisvinti biologiškai veiklias medžiagas, sukeldama augalų ląstelių sienelių struktūrinį irimą [1]. Taikant šį metodą tikimasi išgauti didesnius naudingų medžiagų kiekius, kurie turėtų stipresnį farmakologinį poveikį žmonių sveikatai [2]. Paprastoji kiaulpienė (*Taraxacum officinale* L.) ir didžioji varnalėša (*Arctium lappa* L.) plačiai paplitę augalai visame pasaulyje, turintys antioksidacinių, antibakterinių, priešvėžinių savybių. Šios savybės siejamos su biologiškai veikliomis medžiagomis [3-4]. Darbo tikslas – naudojant spektrofotometrinius metodus nustatyti didžiosios varnalėšos (*Arctium lappa* L.) ir paprastosios kiaulpienės (*Taraxacum officinale* L.) požeminės dalies metanolinių ekstraktų antioksidacinį aktyvumą po atliktos skirtingos trukmės fermentacijos avižų raugu ir įvertinti biologiškai veiklių medžiagų išgavą. Ši tema yra aktuali, nes didėja susidomėjimas natūraliais antioksidantais, o mūsų žiniomis, nėra atlikta išsamių tyrimų, kuriuose būtų fermentuojamos šių augalų požeminės dalys naudojant avižų raugą.

Ekstraktai vertinami spektrofotometriniais metodais: įvertinamas bendras fenolinių junginių ir flavonoidų kiekis bei radikalų surišimo aktyvumas naudojant DPPH (2,2-difenil-1-pikrilhidrazilo) laisvąjį radikalą. Rezultatai išreiškiami mg rutino ekvivalentų 1 g žaliavos. Fermentacija atlikta pridedant avižų raugo, kuris gaunamas dvi paras fermentuojant avižas, o kiti mėginiai praturtinami raugu, papildomai pridedant gliukozės. Rauge esančios pieno rūgšties bakterijos, padeda išlaisvinti biologiškai veiklias medžiagas, pažeidžiant augalo ląsteles [5]. Kontroliniu bandiniu laikomi nefermentuoti ekstraktai. Nustatyta, kad fermentacija turėjo teigiamos įtakos paprastosios kiaulpienės bendram fenolinių junginių kiekiui, kurį padidino beveik du kartus, o bendras flavonoidų kiekis po fermentacijos siekė $1,37 \pm 0,02$ mg, kai kontroliniuose mėginiuose nustatyta - $0,96 \pm 0,01$ mg/g. Fermentuojant su raugu ir praturtinat gliukoze, antioksidacinis aktyvumas padidėjo iki 15 % lyginant su nefermentuotais ekstraktais. Fermentacija taip pat turėjo teigiamos įtakos fenolinių junginių išgavai iš varnalėšos šaknų (fenolinių junginių kiekis padidėjo 1,5 karto). Varnalėšos ekstraktuose bendras flavonoidų kiekis padidėjo daugiausiai, kuriame be raugo buvo papildomai pridėta gliukozės – $2,06 \pm 0,02$ mg/g, kai kontroliniuose mėginiuose iki $1,87 \pm 0,03$ mg/g. Radikalų surišimo aktyvumas po fermentacijos padidėjo 20 %.

24 valandų trukmės fermentacija turėjo didžiausią teigiamą poveikį biologiškai veiklių medžiagų išgavos padidinimui lyginant su ilgesne 48 ir 72 valandų fermentacija. Ilgesnė fermentacija lėmė biologiškai veiklių medžiagų kiekio sumažėjimą net 2 kartus.

Literatūros sąrašas

1. Y. Xiaohua et al. // Fermentation, 2024, **10**, 1, 48.
2. A. Izábal-Carvajal et al. // Waste, 2023, **1**, 3, 806-814.
3. D. Katy et al. // Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine, 2018, **1**, 20, 1741-4288.
4. F. Esmaeli et al. // Journal of Food Quality, 2021, 0146-9428.
5. I. Shariful et al. // Applied Food Research, 2024, **4**, 2, 100610.

LUMINESCENCE PROPERTIES OF CHROMIUM DOPED YAG AND YLuAG: INFLUENCE OF Cr³⁺ CONCENTRATION

Nerija Ričkutė^{*}, Greta Inkrataitė, Ramūnas Skaudžius

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

^{*}*nerija.rickute@chg.f.stud.vu.lt*

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

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

VARIO RAŠALŲ IR DAŽŲ STABILIZAVIMAS 2,5–HEKSANDIOLIU

Gustė Rudaitytė^{1*}, Aušra Čiuladienė², Aivaras Kareiva¹

¹ Vilniaus universiteto Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas, Lietuva

² Lietuvos mokslų akademijos Vrublevskių bibliotekos Dokumentų konservavimo ir restauravimo skyrius, Lietuva

*guste.rudaityte@chgf.stud.vu.lt

Viso pasaulio bibliotekose ir archyvuose didžiąją dalį saugomų dokumentų sudaro knygos, rankraščiai ir grafikos darbai. Dauguma šių, popieriaus pagrindo, dokumentų pažeisti dėl geležies-galo rašalo ir vario dažų sukeltos celiuliozės destruktijos [1,2]. Pereinamųjų metalų jonai, esantys istoriniuose rašaluose ar dažuose, daro didelę žalą rašytiniams kultūros objektams. Vienas iš plačiausiai naudotų rašalų dėl puikių savo savybių, tokių kaip lengvas pagaminimas, patvarumas ir atsparumas vandeniui buvo geležies-galo rašalas. Šiame rašale be geležies, taip pat gausu kitų pereinamųjų metalų, ypač vario [3]. Knygų iliustracijose ir žemėlapiuose plačiai naudoti žalieji neorganiniai vario pigmentai: malachitas ir verdigris. Vario jonai pasižymi dideliu kataliziniu aktyvumu ir skatina oksidacinį celiuliozės irimą rašytiniuose dokumentuose. Cu²⁺ jonai dalyvauja Fentono reakcijose, kurių metu susidarę hidroksilo radikalai (·OH), ardo β-1,4-gliukozidinius ryšius celiuliozėje [4].

Atsižvelgiant į popierinės laikmenos reikšmingumą, jos išsaugojimas kelia didelį susidomėjimą. Dabar siūlomos vario jonus stabilizuojančios medžiagos, tokios kaip TBAB (tetrabutilamonio bromidas), BTA (benzotriazolas), imidazolio druskos, veiksmingai sulėtina vario jonų sukeltą oksidacinį celiuliozės skaidymą, tačiau jos turi ir tam tikrų trūkumų. Kompleksuojant vario jonus gali susidaryti netirpūs kompleksai, kurių pašalinimas tolimesniuose dokumento restauravimo procesuose yra sudėtingas ar neįmanomas. Taip pat, laikui bėgant pastebimas popieriaus spalvos, tekstūros ar mechaninių savybių pasikeitimą [5,6].

Šiame darbe atliktas vario rašalų ir dažų ant popierinės laikmenos stabilizavimo, naudojant 2,5-heksandiolio (2,5-HDO) vandeninį tirpalą, tyrimas. 2,5-HDO poveikis popierinei laikmenai buvo įvertintas taikant ivairius analizės metodus. Mėginių paviršiaus morfologija buvo tiriama skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM). Atliktas pH nustatymas ir spalvos pokyčio ΔE įvertinimas CIE(Lab)* (ang. *International Commission on Illumination*) koordinatinių sistemoje. IR spektroskopija buvo naudojama rašalų ir dažų funkcinių grupių identifikavimui ir apibūdinimui.

Literatūros sąrašas

1. J. Malešič, J. Kolar, M. Anders // Restaurator. International Journal for the Preservation of Library and Archival Material, 2015, **36**, 4, 283-305.
2. M. Jablonsky, J. Šima // J Cult Herit, 2021, **48**, 269–276.
3. J. Kolar, M. Strlič, M. Budnar, J. Malešič, V.S. Šelih, J. Simčič // Acta Chim. Slov., 2003, **50**, 763–770.
4. Y. Yan, J. Yao, W. Xu, S. Jin, Y. Zhang, Y. Tang // ACS Sustain Chem Eng, 2023, **11**, 14, 5325–5334.
5. K. Ahn, C. Hofmann, M. Horsky, A. Potthast // Carbohydr Polym, 2015, **134**, 136–143.
6. G. Ceres, V. Conte, V. Mirruzzo, J. Kolar, M. Strlic // ChemSusChem, 2008, **1**, 921–926.

ORGAN-ON-A-CHIP: REVOLUTIONIZING DRUG DISCOVERY AND CANCER RESEARCH

Hamidreza Sahaleh¹

¹ 1Kaunas University of Technology, Faculty of Chemical Technology

**hamidreza.sahaleh@ktu.edu*

Organ-on-a-chip (OOC) technology also known as physiological systems is an evolution in biological science and drug discovery. Traditional testing methods like 2D, cell culture and animal models have some limitations in accurately mimicking human physiology. In contrast, OOC is a microfluidic system that replicate the physiological and mechanical properties of human organ and allow researchers to culture physiologically relevant combinations of primary human cells together in a microfluidic chip. A recent advancement in OOCs is Heart-on-a-chip. The HoC enables the precise simulation of heart tissue environment and improves the study of cardiac physiology and pathology. HoC platforms have been successfully utilized to model majority of cardiovascular conditions, such as ischemia, cardiac fibrosis, myocardial infraction, myocardial hypertrophy and other heart diseases. These chips have advanced detection methods such as, real time monitoring of electrical and mechanical activities, which play a key role in assessing drug efficacy and safety in a controlled environment. Over the past decade, significant progress has been made in spatial modelling for cancer therapeutics using OOC technology, enhancing physiological exposure criteria. In lung cancer study, Organ-on-a-chip offer an unparalleled window into the human immune response. By incorporating critical features of the human tissue microenvironment, the complexity of immune cell recruitment can be modelled with greater specificity. Inside each chip, there is a co-culture of primary human cells with a tissue-vascular interface. Media flow in the vascular channel provides the shear stress required to model human immune cell recruitment with specificity. Additionally, an air-liquid interface can be established when modelling the lung. To simulate the mechanical forces of breathing or intestinal peristalsis, cyclic stretch is applied. Together, these features accurately model complex immunological mechanisms and accelerate the development of targeted, safer, and more effective therapeutics. Organ on chips allow sex or genetic differences to be further understood, and a patient's own cells can be used to support the development of more personalized medicines. By providing more reliable predictions for drug effects, OOC technologies can help to develop safe and efficacious therapeutics faster and more cost effectively.

References

1. Tao, J., Xu, H., & Zhan, H. // Heart-on-a-chip: A revolutionary organ-on-chip platform for cardiovascular disease modeling, 2025, 23, 1, 2025.
2. Avula, L. R., & Grodzinski, P. // Cancer-on-chip: A breakthrough organ-on-a-chip technology in cancer cell modeling, 2024, 10, 115, 2024.
3. Zhu, S., Zhang, X., & Wang, X. // Organ-on-a-chip: A new frontier in personalized medicine and drug discovery, 2023, 6, 8, 2023.
4. Liu, Y., Zhang, L., & Zhang, J. // Advances in organ-on-a-chip models for drug development and disease modeling, 2020, 327, , 465-479.

VITRIMERŲ, GAUTŲ IŠ AUGALINIO ALIEJAUS IR GLICEROLIO DARINIŲ, SAVYBIŲ TYRIMAI

Viltė Šereikaitė^{1*}, Aukšė Navaruckienė¹, Jolita Ostrauskaitė¹

¹Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

*vilte.sereikaite@ktu.edu

Vitrimeriai – tai tinkliniai polimerai, turintys tiek termoreaktyviųjų, tiek ir termoplastinių polimerų privalumų. Dėka dinaminių kovalentinių ryšių jie gali būti perdirbami aukštesnėje temperatūroje, tačiau išlaiko tvirtumą žemesnėje temperatūroje [1]. Keičiant temperatūrą, galima pakeisti vitrimerų tinklinės struktūros topologiją, suteikiant jiems ypatingas savybes, tokias kaip savaiminis gijimas, pataisomumas, perdirbamumas, formos atmintis, kietosios būsenos plastiškumas ir kt. [2]. Vitrimeriai gali būti naudojami dangoms, klėjams ir 3D spausdintiems gaminiais gauti. Dėl perdirbamumo ir savaiminio gijimo savybių jie yra perspektyvūs automobilių dalių, erdvėlaivių komponentų ir vartojimo prekių gamyboje. Be to, vitrimeriai turi didelį potencialą biomedicinoje: audinių inžinerijoje, vaistų pernešimo sistemų ir formos atminties prietaisų gamyboje [3].

Šiame darbe vitrimeriai buvo susintetinti iš akrilgrupės turinčių augalinio aliejaus ir glicerolio darinių fotopolimerizacijos būdu. Buvo ištirtos jų reologinės, terminės, termomechaninės ir mechaninės savybės. Tyrimo rezultatai parodė, kad polimerai pasižymi formos atminties savybėmis – juos pakaitinus virš stiklėjimo ir topologijos sustingimo temperatūrų, galima suteikti naują formą, kuri, atvėsus žemiau šių temperatūrų, yra išlaikoma. Savaiminio pataisomumo eksperimentas parodė, kad polimero dalys gali savaime susijungti aukštesnėje temperatūroje be išorinio slėgimo ir išlaikyti geras pradinių polimerų mechanines savybes. Tai lėmė dinaminių kovalentinių ryšių mainų reakcijos ir, galimai, likusių laisvų funkcinių grupių terminę polimerizaciją. Nustatyta, kad perdirbtų polimerų savybės priklauso nuo karšto presavimo temperatūros, slėgio ir dalelių dydžio. Terminio perdirbimo metu vitrimero bandiniai įgavo didesnę standumą (padidėjo Jungo modulis), tapo tvirtesni (padidėjo stipris tempiant) ir mažiau elastingi (sumažėjo ištįsa trūkio metu). Sukurtas šviesai jautrus pradinių medžiagų mišinys buvo išbandytas mikrospaudimo litografijoje, siekiant patikrinti pradinio medžiagų mišinio tinkamumą replikų gamybai, vertinant jų gebėjimą tiksliai atkurti sudėtingas mikrostruktūras ir paviršiaus detales.

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (projekto Nr. S-MIP-23-52) lėšomis. Prof. M. Malinausko grupei iš Vilniaus universiteto Lazerinių tyrimų centro dėkojame už 3D šablono spausdinimą.

Literatūros sąrašas

1. A. Mariani, G. Malucelli // Biobased vitrimers: towards sustainability and circularity, Chemical Communications, 2025, t. 61, p. 2173–2189.
2. Y. Tao, X. Liang, J. Zhang, I. M. Lei, J. Liu // Polyurethane vitrimers: Chemistry, properties and applications, Journal of Polymer Science, 2022.
3. H. Sharma, B. Krishnakumar, T. J. Dickens, G. J. Yun, A. Kumar, S. Rana // A bibliometric survey of research trends in vitrimer, Heliyon, 2023, t. 9, nr. 6, straipsnio nr. e17350.

MANGANESE COATINGS: TEMPERATURE INFLUENCE ON ELECTROCHEMICAL DEPOSITION

Vasaris Statkevičius^{1*}, Nerita Žmuidzinavičienė¹, Egidijus Griškonis¹

¹ Department of Physical and Inorganic Chemistry, Kaunas University of Technology, Lithuania

*vasaris.statkevicius@ktu.edu

Manganese, as a chemical element, is utilized across various industries, particularly in the production of steel. Electrochemical deposition is a low-energy process, but the electronegativity of manganese limits this process. Enhancing the electrolyte with additional materials, such as selenium, sulfur, and tellurium compounds, has been shown to improve the efficiency of manganese electrochemical deposition [1]. Although the use of selenium and sulfur compounds have proved effective the drawbacks such as: selenium compound toxicity, sulfurs corrosive properties, leave more to be desired. Research on insertion of tellurium additives in manganese coatings is scarce and by that this research seeks to expand it [2]. The carbon steel (ASTM A283) plates were used as a substrate for electrodeposition of Mn coatings. For degreasing and etching the surface of carbon steel plates before electrodeposition process NaOH and HCl solutions were used, respectively. After each of these procedures, the rinsing with distilled water was applied. Electrochemical deposition was carried out in aqueous electrolyte containing the mixture of MnSO₄ and (NH₄)₂SO₄. The ammonium complexes in solution inhibit the formation of manganese hydroxides, resulting in denser and thicker manganese coatings [3]. Sodium tellurate (Na₂TeO₄) was used as an additive; pH of electrolyte was maintained between 2.30-2.35. During electrochemical deposition two anodes, coated with lead (IV) oxide (Pb/PbO₂), and polyvinylchloride (PVC) woven membrane, separating the anode and cathode compartments, were used. Deposition lasted for 7 minutes with a cathodic current density of 15 A/dm², at four different temperatures: 20, 40, 60, 80 °C.

Table 1. Current yield and thickness of manganese coating depending on the deposition temperatures

Deposition temperature, °C	20 °C	40 °C	60 °C	80 °C
Current yield, %	58.1±4.7	65.6±9.6	72.1±7.4	86.1±5.9
Mn coating thickness, μm	9.9±0.8	11.6±1.7	12.4±1.3	14.8±1.0

References:

1. J. Lu, D. Dreisinger, T. Glück // Hydrometallurgy, 2014, **141**, 105–116.
2. M. Fernández-Barcia // Surf Coat Technol, 2018, **344**, 261–268.
3. N. Žmuidzinavičienė, E. Griškonis, A. Šulčius // Coatings, 2023, **13**, 9, 1617.

STRUKTŪRINĖS TEKSTILĖS PAVIRŠIAUS ĖSDINIMO PARAMETRŲ OPTIMIZAVIMAS IR PANAUDOJIMO GALIMYBIŲ TYRIMAS

Evaldas Sutkus^{1*}, Valentina Krylova¹

¹Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

*evaldas.sutkus@ktu.edu

Saulės energija yra vienas iš perspektyviausių būdų elektros energijai gauti fotovoltinės konversijos metu, saulės elementuose. Šiuo metu plačiausiai naudojami silicio saulės elementai, nors plačiai prieinami, turi keletą trūkumų: jų gamyba reikalauja daug medžiagų, yra gana trapūs ir pasižymi sumažėjusiu efektyvumu esant aukštoms temperatūroms [1]. Siekiant išspręsti šiuos iššūkius, atsirado hibridinės organinės-neorganinės medžiagos kaip potencialios alternatyvos. Struktūrinės tekstilės medžiagų integravimas su neorganiniais puslaidininkiais suteikia galimybę sukurti efektyvesnius bei lanksčius saulės elementus dėl jų puikių optinių bei elektrinių savybių, įskaitant aukštą teorinį efektyvumą, didelį termodinaminį stabilumą, mažą toksiškumą ir nebrangią gamybą [2, 3].

Šiame tyrime pagrindinis dėmesys skiriamas ėsdinimo parametrų optimizavimo įvertinimui, siekiant pagerinti struktūrinės tekstilės ir neorganinių puslaidininkių paviršiaus suderinamumą.

Siekiant nustatyti tinkamus ėsdinimo parametrus, procesas buvo vertinamas stebint susidarančias hidroksilo grupes bandinių paviršiuje po apdorojimo ėsdinimo tirpale, sudarytame iš rūgščių mišinio ir oksidatoriaus [4]. Kelių, komerciškai prieinamų struktūrinės tekstilės gaminių bandiniai buvo apdoroti šiame tirpale 2, 4 ir 6 valandas, 70-100°C temperatūroje. Tada mėginiai buvo nuplauti karštu vandeniu, distiliuotu vandeniu, išdžiovinti ir užregistruoti susilpninto bendro atspindžio Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektrai. Po ėsdinimo, kad būtų nustatytas ėsdinimo laipsnis, reikalingas nusodinto puslaidininkio sluoksnio sukibimui su paruoštais mėginiais užtikrinti, buvo naudojamas labai paprastas ir nebrangus nuosekliosios jonų sluoksnių adsorbcijos ir reakcijos metodas Ag_2S ploniems sluoksniams nusodinti kambario temperatūroje [5]. Nustatyta, kad optimali paviršiaus modifikacija buvo pasiekta po 6 valandų ėsdinimo, kai susidarė pakankama -OH grupių koncentracija bandinių paviršiuje. Tai rodo padidėjusį bandinių paviršiaus hidrofiliškumą, kas pagerino nusodinamo Ag_2S sluoksnio adheziją.

Sėkmingas Ag_2S plonųjų sluoksnių nusodinimas ant tinkamai apdorotų polimerinių substratų gali sudaryti sąlygas sukurti lanksčius, efektyvius ir ekonomiškus hibridinius saulės elementus. Ateityje pagrindinis dėmesys bus skiriamas Ag_2S plonų sluoksnių nusodinimo parametrų ant struktūrinės tekstilės optimizavimui ir galimybių juos naudoti saulės elementams gaminti įvertinimui.

Literatūros sąrašas:

1. Oni, A.M., Mohsin, A.S.M., Rahman, M.M., & Hossain Bhuian, M.B. // Energy Rep. 2024, 11, 3345-3366.
2. Dong, W., Fu, J., Yang, J., Ren, S., Zhu, H., Wang, Y., Hao, J., Zhang, Y., & Zheng, Z., J. // Mater. Chem. C. 2023, 11, 16842-16858
3. Hussain, N.A., Latif, L.A., & Mohamad, H.J., Indones. J. // Electr. Eng. Comput. Sci. 2023, 31, 692-699.
4. Alaburdaite, R., Krylova V. // Polym. Degrad. Stab. 2023, 211, 1-14.
5. Geremew, T., J. // 3D Print. Appl. 2022, 1, 1-24.

5-CHLORPIRIDIN-2-IL FRAGMENTĄ TURINČIŲ N-PAKEISTŲ KARBOHIDRAZIDŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIO AKTYVUMO VERTINIMAS

Simona Talačkaite^{1*}, Aida Šermukšnytė¹, Kristina Kantminienė², Ilona Jonuškienė¹, Ingrida Tumosienė¹

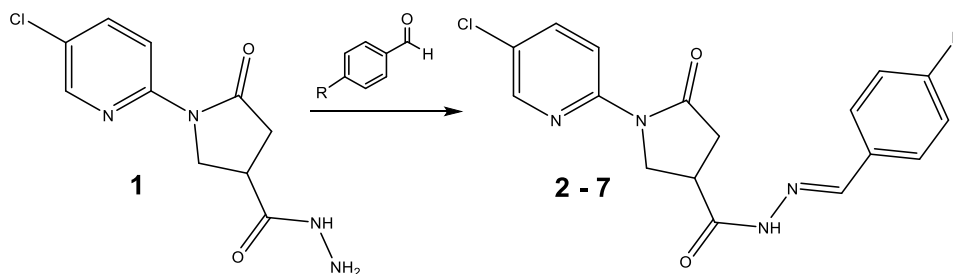
¹ Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas

² Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*simona.talackaite@ktu.edu

Heterocikliniai junginiai sudaro esminę daugelio farmacinių preparatų struktūros dalį, kadangi lemia jų fizikinę-cheminę charakteristiką, farmakodinamiką, farmakokinetiką bei biologinį prieinamumą. Šiuolaikinėje farmacijos praktikoje heterocikliniai fragmentai aptinkami maždaug 75 % mažos molekulinės masės vaistinių medžiagų [1]. Tarp jų ypatingas dėmesys skiriamas 5-chlorpiridinui ir jo dariniams, kurie dažnai pasitelkiami kaip pagrindiniai junginiai naujų bioaktyvių medžiagų sintezės procesuose. Piridino žiedo struktūra pasižymi baziškumu, hidrofiliškumu, cheminiu stabilumu bei gebėjimu sudaryti vandenilinius ryšius, kas yra reikšminga sąveikai su biologiniais receptoriais [2]. Tuo tarpu pirolidono dariniai taip pat išlieka aktualūs dėl savo plataus biologinio aktyvumo spektro. Jie intensyviai tiriami dėl potencialių antimikrobinių, priešnavikinių, priešuždegiminių ir antivirusinių savybių bei gebėjimo selektyviai sąveikauti su specifiniais biologiniais taikiniiais [3]. ADMET (absorbcijos, pasiskirstymo, metabolizmo, išskyrimo ir toksiškumo) parametrai numatymas yra labai svarbus vaistų atradimo ir kūrimo aspektas ir atlieka svarbų vaidmenį optimizuojant naujų vaistinių preparatų farmakokinetines savybes.

Šio darbo tikslas: susintetinti biologiškai aktyvius junginius, kurių struktūroje yra 2-aminopiridino fragmentas, atlikti ADMET savybių tyrimą ir biologinio aktyvumo analizę (1 schema).



Nr.	2	3	4	5	6	7
R	H	Cl	F	N(CH ₃) ₂	NO ₂	SCH ₃

1 schema. 5-chlorpiridino darinių 2-7 sintezė

2-Amino-5-chlorpiridinui reaguojant su itakono rūgštimi vandenyje susidaro 1-(5-chlorpiridin-2-il)-5-oksiropirolidin-3-karboksirūgštis, iš kurios toliau gaunamas metilo 1-(5-chlorpiridin-2-il)-5-oksiropirolidin-3-karboxilatas, kuris reakcijoje su hidrazinhidratu transformuojamas į 1-(5-(5-chlorpiridin-2-il)-5-oksiropirolidin-3-karbohidrazidą **1**. Hidrazidas toliau naudotas sintezės reakcijose su įvairiais aldehidais gaunant tikslinius hidrazonus **2-7**. Norint įvertinti susintetintų **2-7** junginių biologinį aktyvumą buvo vykdyti antioksidaciniai ir antibakteriniai tyrimai. Atlikus redukcinių savybių įvertinimą pastebėta, jog intensyviausiomis redukcinėmis savybėmis

pasižymėjo dimetilamino pakaitą turintis junginys **5**. Pagal FRAP metodą, stipriausiu antioksidaciniu aktyvumu pasižymėjo **2** ir **5** junginiai, kurių aktyvumas redukuojant Fe^{+3} –TPTZ kompleksą siekė 49,9 ir 93,6 $\mu\text{mol/L}$. ABTS radikalo slopinimo tyrimo metu junginiai rodė 95,5-100 % aktyvumą, tačiau junginys **5** vienintelis parodė 100 % aktyvumą. DPPH radikalo slopinimo metodu nustatyta, jog intensyviausiu slopinimu (17,72 %) pasižymėjo **5** junginys, kiti junginiai parodė minimalų aktyvumą – 0,4-2,69 %. Antibakterinio aktyvumo tyrimas buvo atliktas prieš gramneigiamas *Escherichia coli* ir gramteigiamas *Bacillus subtilis* bakterijas. *Escherichia coli* bakterijų tyrime didžiausiu antibakteriniu aktyvumu, iš visų junginių, pasižymėjo **5** junginys, kurio slopinimo zona siekė 1,2 cm, o junginiai **4** ir **6** pasižymėjo šiek tiek mažesniu antibakteriniu aktyvumu, kurių slopinimo zonos atitinkamai buvo 1 ir 0,9 cm. Prieš *Bacillus subtilis* didžiausią aktyvumą parodė junginiai **5** ir **6**, jų slopinimo zonos buvo vienodos - abiejų siekė 1,1 cm. Junginys **4** pasižymėjo šiek tiek mažesniu antibakteriniu aktyvumu, jo slopinimo zona siekė 0,9 cm.

Susintetintų junginių farmacinės savybės ir pritaikomumas vaistų gamybai buvo įvertintas pasitelkiant *in silico* programinę įrangą „AdmetLab 2.0“. Atlikus **2-7** junginių ADMET analizę nustatyta, jog visų junginių molekulinė masė (MW) patenka į priimtina oralinio biologinio prieinamumo intervalą, o jos vertės yra nuo 342,09 iki 388,08. **3, 4, 5** ir **7** junginių logP vertės yra 3,5-4,379, tai rodo vidutinį lipofiliškumą, tinkamą absorbcijai, o **5** ir **9** junginių logP vertės yra šiek tiek mažesnės, dėl to jų tirpumas vandenyje yra geresnis. Didžiausia kancerogeniškumo tikimybė pasižymėjo junginiai **5, 6** ir **7**, likę junginiai parodė vidutinę tikimybę. AMES vertės junginių **2, 3, 4** ir **7** rodo vidutinę mutageniškumo riziką dėl ko gali sukelti nedidelį mutageninį poveikį, o junginys **6** turi didesnę mutageniškumo potencialą ir gali kelti riziką dėl DNR pažeidimų.

Nr.	2	3	4	5	6	7
MolW	342,09	376,05	346,1	385,13	387,07	388,08
logP	3,296	4,01	4,379	3,50	3,37	3,97
Kancerogeniškumas	0,307	0,337	0,485	0,801	0,767	0,819
AMES	0,171	0,143	0,154	0,453	0,850	0,161

2 schema. 5-chlorpiridino darinių **2-7** ADMET nustatytos savybės

Apibendrinant, buvo susintetinti nauji 2-amino-5-chlorpiridino fragmentus turintys hidrazonai ir įvertintos jų biologinės savybės bei atlikti ADMET tyrimai. Rezultatai parodė, jog junginys, struktūroje turintis dimetilamino pakaitą, visais ištirtais atvejais pasižymėjo intensyviausiu antioksidaciniu ir antibakteriniu aktyvumu, tikėtina dėl šio pakaito elektronų donorinės prigimties, dėl vandenilinių ryšių susidarymo ir dėl geresnio junginio tirpumo vandenyje. *In silico* tyrimas parodė, jog šis junginys pasižymi geromis logP ir AMES savybėmis, tačiau gali turėti kancerogeniškumo tikimybę.

Literatūros sąrašas

1. A. Rusu, I. Moga, L. Uncu, G. Hancu // The Role of Five-Membered Heterocycles in the Molecular Structure of Antibacterial Drugs Used in Therapy, 2023, **15**, 11, 2554.
2. A. Šermukšnytė, ir kt. // Novel Antimicrobial and Antitumor Agents Bearing Pyridine-1,2,4-triazole 3-thione-hydrazone Scaffold: Synthesis, Biological Evaluation, and Molecular Docking Investigation, 2024, **14**, 12, 1592.
3. K. M. Pandya, P. S. Desai // Design and Synthesis of 5-oxopyrrolidine-3 Carboxylic acid Derivatives as Potent Anti-inflammatory Agents, 2020, **13**, 2, 1054-1062.

IMODAZOPIRAZOLOOKSAZEPINAI: POTENCIALIAI BIOLOGIŠKAI AKTYVIŲ MOLEKULIŲ SINTEZĖ

Agnė Užupytė^{1*}, Eglė Arbačiauskienė¹, Algirdas Šačkus¹

¹ Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos Universitetas, Lietuva

**agne.uzupyte@ktu.edu*

Medicininėje chemijoje heterociklinėms molekulėms skiriama daug dėmesio dėl jų farmakologinio aktyvumo įvairovės, lemiančios vis didėjančią jų svarbą. Benzimidazolas yra heterociklinis junginys, sudarytas iš benzeno ir imidazolo žiedų. Dėl sintezės paprastumo ir struktūrinės įvairovės, benzimidazolo skeletas yra perspektyvus vaistinių medžiagų kūrimo pagrindas. Žinoma, kad daugelis benzimidazolo darinių pasižymi įvairiu biologiniu aktyvumu, tokiu kaip antibakterinis, antivirusinis, priešvėžinis, priešūždegiminis, antituberkuliozinis, antihelmininis ir kt. poveikis [1]. Farmakologinė benzimidazolo svarba siejama su jo fizikinėmis ir cheminėmis savybėmis, t. y., vandenilinio ryšio sudarymo, π - π ir hidrofobinių sąveikų, kas leidžia benzimidazolo dariniams efektyviai jungtis su taikiniais [2].

Šiame tyrime pateikiama efektyvi dviejų etapų imidazopirazolooksazepino darinių sintezė iš pirazolo-4-karbaldehido ir įvairių diaminų.

Reakcijos su vienodus pakaitus 4- ir 5-padėtyje turinčiais diaminiais buvo efektyvios, o gauti junginiai pasižymėjo aukštomis išeigomis. Reakcijos su viena pakaitą 4-padėtyje turinčiais diaminiais buvo mažiau efektyvios gryninimo aspektu, dėl susidariusių regioizomerų mišinių. Keli regioizomerai mažais kiekiais buvo atskirti. Junginiai tiriami dėl biologinių savybių. Naujų kondensuotų heterociklinių junginių struktūros buvo patvirtintos ¹H, ¹³C ir ¹⁵N-BMR spektroskopijos metodais.

Literatūros sąrašas

1. J. Monga ir kt. Current topics in medicinal chemistry, 2024, Vol. 24, no. 5, p. 437–485.
2. R. Kumar ir kt. Current topics in medicinal chemistry, 2024, Vol. 24, no. 17, p. 1504–1528.

3-ARILPROPARGILALKOHOLIŲ SINTEZĖ AMILOIDŲ AGREGACIJOS MODULIATORIŲ KŪRIMUI

Tadas Vasiliauskas^{1*}, Ieva Žutautė

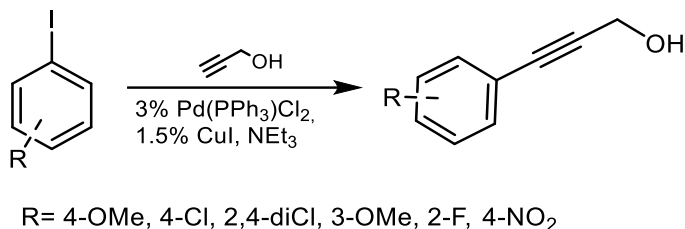
¹Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Lietuva

²Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Lietuva

**tadas.vasiliauskas@chgf.stud.vu.lt*

Amiloidų baltymų agregacija į netirpias fibriles yra susijusi su Alzheimer'io ir Parkinson'o ligomis. Nustatyta daugiau nei 30 baltymų ir peptidų, kurių citotoksiški agregatai kaupiasi tarpląstelinėse organų ir audinių erdvėse. Kol kas dabartinis šių ligų gydymas yra susijęs su atsiradusių simptomų slopinimu, bet ne pačios priežasties šalinimu. Todėl pastaraisiais metais labai išaugo susidomėjimas baltymų agregacijos mechanizmų tyrimais bei jų slopiklių bei moduliatorių paieška. Pastaroji koncentruojama į mažamolekulinių gamtinių bei sintetinių junginių tyrimus. Naujausi tyrimai parodė, kad sintetiniai imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinai veikia kaip amiloidų agregacijos modulatoriai. [1]

Pagal imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinų retrosintetinę analizę, norint gauti tikslinius kondensuotus heterociklus reikia atlikti atitinkamų 2-alkinilioimidazolų ciklizacijos reakciją. Šie pradiniai junginiai gaunami pakeitimo reakcijos metu iš atitinkamų propargilbromidų ir 2-tioimidazolo. Iš atliktų eksperimentų yra žinoma, kad tiesioginė propargilbromido ir jodbenzeno sujungimo reakcija vyksta prastomis išeigomis, todėl šio darbo tikslas yra susintetinti 3-arilpropargilalkoholius, reikalingus atitinkamų imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazinų formavimui. Tikslui pasiekti pasirinkti atitinkami jodbenzeno dariniai, kurie *Sonogashira* reakcijos pagalba [2] jungiami su propargilalkoholiu.



1 schema. Darbe atliktų reakcijų bendroji lygtis

Literatūros sąrašas

1. I. Misiūnaitė, K. Mikalauskaitė, M. Paulauskaitė, R. Sniečkutė, V. Smirnovas, A. Brukštus, M. Žiaunys, I. Žutautė // ACS Chemical Neuroscience 2024, **15**, 24, 4418–4430.
2. R. Chinchilla, C. Nájera // Chemical Reviews, 2007, **107**, 3, 874–922.

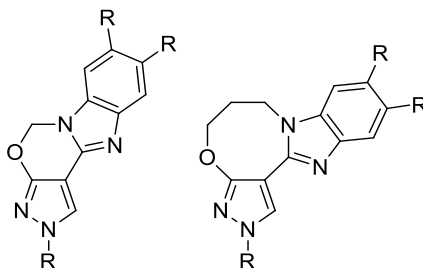
KONDENSUOTŲ OKSAZINO IR OKSAZOCINO DARINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAI

Povilas Viltrakis¹, Eglė Arbačiauskienė¹, Algirdas Šačkus¹, Vilija Kederienė¹

Organinės chemijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva
povilas.viltrakis@ktu.edu

Oksazino ir oksazocino dariniai randa pritaikymą įvairiose chemijos srityse. Oksazinai yra plačiai ištirtinami šešianariai heterocikliniai junginiai, pasižymintys priešvėžinėmis, neuroprotektinėmis, antivirusinėmis ir kitomis savybėmis [1, 2]. Šiuos junginius taip pat galima aptikti gamtoje, o sintetiniai jų analogai plačiai yra naudojami ne tik vaistinių medžiagų, bet ir fluorescencinių zondu gamyboje [3]. Oksazocinai yra mažiau tyrinėti aštuonariai heterocikliniai dariniai, kurie taip pat pasižymi plačiu biologiniu aktyvumu, tokiu kaip analgetinis, antitrombotinis, priešvėžinis poveikis ir kt. [4]. Oksazocino dariniai nėra aptinkami gamtoje, o sintetiniai dariniai naudojami vaistų kūrimo.

Šio darbo tikslas – taikant kondensacijos ir ciklizacijos reakcijas susintetinti naujus potencialiai biologiškai aktyvius oksazino ir oksazocino darinius.



1 pav. Kondensuoti oksazino ir oksazocino dariniai

Pradžioje, tarpinių alkilimo ir Vilsmeier-Hack reakcijų metu susintetintas pradinis junginys 3-(benziloksi)-1-fenil-1*H*-pirazol-4-karbaldehidai. Tuomet nuo 3-(benziloksi)-1-fenil-1*H*-pirazol-4-karbaldehido pašalinta apsauginė benzilo grupė panaudojant trifluoracto rūgštį. Tiksliniai oksazino ir oksazocino dariniai gauti kondensacijos ir ciklizacijos reakcijų metu, pradžioje karbaldehidui reaguojant su aromatiniais diaminais, tuomet su pakeistais alkilimo agentais. Tirtas gautų naujų, funkcionalizuotų ciklinių oksazino ir oksazocino darinių biologinis aktyvumas.

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (LMTLT) lėšomis, projekto Nr. S-SV-24-167.

Literatūros sąrašas:

1. GULATI, G.K. ir kt. Recent progress in multi-stimulable photochromic oxazines with their wide-ranging applications. In *Dyes and Pigments* . 2021. Vol. 192, p. 109445.
2. KAUR, N. Six-membered O,N-heterocycles. In *Metal and Nonmetal Assisted Synthesis of Six-Membered Heterocycles* . 2020. p. 413–458.
3. MISHRA, J.K. ir kt. Amino acid based enantiomerically pure 3-substituted benzofused heterocycles: A new class of antithrombotic agents. In *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* . 2010. Vol. 20, no. 1, p. 244–247.
4. PARVEEN, B.R. ir kt. Synthesis, characterization, anti-inflammatory activity and molecular docking studies of aromatic aldehydes substituted oxazine derivatives derived from 3-methoxy chalcone. In *Journal of Molecular Structure* . 2025. Vol. 1321, p. 139729.

A MACHINE LEARNING MODEL FOR OPTIMIZATION OF PYRROLE ELECTROPOLYMERIZATION

Jonas Vinciunas^{1,3*}, Vilma Ratautaite^{1,2}, Arūnas Ramanavičius^{1,2}

¹*Department of Nanotechnology, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio Av. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania*

²*Department of Physical Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko St. 24, LT-03225 Vilnius, Lithuania*

³*Department of Pharmaceutical Science, Faculty of Science, Utrecht University, Heidelberglaan 8, 3584 CS Utrecht, The Netherlands*

**Vinci.jonas@gmail.com*

Abstract

Pyrrole is a monomer, commonly used for the production of polypyrrole (PPy), a versatile polymer which exhibits multiple useful properties, such as electrical conductivity, resistance to a broad range of pH and temperature conditions. PPy also has a prominent use case in the production of molecularly imprinted polymers, which can further be utilized in electrochemical sensors. However, despite the widespread use of PPy, there have been few attempts to optimize the electropolymerization behaviour using computational modeling. In this paper we present a machine learning model, which is used to optimize the pH and/or buffer choice, upper/lower polymerization voltage for pyrrole electropolymerization using chronoamperometry.

Keywords

Pyrrole, Polypyrrole, Electropolymerization, Machine Learning, Chronoamperometry

Acknowledgements. Rytis Pilionis for conducting experiments, Prof. Habil. Dr. Arunas Ramanavicius for securing resources and financing.

Citations

1. V.Ratautaite et.al., // Molecularly imprinted polypyrrole based sensor for the detection of SARS-CoV-2 spike glycoprotein, 2022, Volume 403, 139581, 1,7
2. A. Hefnawy et.al., // Machine learning model of polypyrrole based-supercapacitor electrode: Fabrication, characterization, and prediction, 2025, Volume 1019, 179240, 1,5

OPTIMIZING OPTICAL AND MAGNETIC PROPERTIES AT THE NANOSCALE: A STRATEGY FOR BIMODAL NANOPROBES

Viktorija Vrubliauskaitė^{1*}, Eglė Ežerskytė, Vaidas Klimkevičius¹

¹ Institute of Chemistry, VU Faculty of Chemistry and Geosciences, Lithuania

*viktorija.vrubliauskaite@chgf.stud.vu.lt

Nanoparticles with both magnetic and luminescent properties have attracted scientific interest due to their potential applications in diagnostic imaging and therapeutic delivery systems [1]. The optical and magnetic properties of nanoparticles, as well as their viability as nanoprobes in the human body, are strongly related to their size and morphology. This study aims to precisely control the size of NaGdF₄-based nanoparticles by tailoring the synthesis parameters (temperature, duration, and reagent ratios) to maximize optical and magnetic response while not compromising their biocompatibility. The chosen synthesis route was thermal co-precipitation. The phase purity, particle size, and morphology of obtained nanoparticles were examined using X-ray diffractometry and transmission electron microscopy (TEM) imaging. The optical properties, including emission and excitation spectra, as well as decay curves, were analyzed using photoluminescence (PL) spectroscopy. Additionally, the magnetic properties of NPs were evaluated by a 3T clinical-grade MRI apparatus.

Three upconverting nanoparticle sample series doped with the sensitizer/activator pair Yb³⁺/Er³⁺ were synthesized to examine how various synthesis parameters affect their size and optical response. The results indicated that increasing the synthesis temperature and duration, as well as decreasing the molar ratio of NH₄F/Ln³⁺ in the initial reaction mixture, resulted in nanoparticles with larger diameters, which exhibited higher upconversion emission intensities and longer lifetimes.

Another series of NaGdF₄ nanoparticles doped with Eu³⁺ ions were synthesized while varying the synthesis duration to determine the influence of dopant type on particle. Results showed that irrespective of dopants, the increased synthesis duration resulted in particles with larger diameters exhibiting stronger emission intensities. For these Eu³⁺-doped NPs, the paramagnetic properties as a function of synthesis duration (particle size) were examined via 3T clinical MRI apparatus since it is established that Gd³⁺ ion present in the host matrix has strong paramagnetic properties and could change the relaxivity of water molecules [2].

Acknowledgments. Experiments financed by the European Union (project no. P-ST-24-76) in accordance with an agreement with the Research Council of Lithuania.

Bibliography

1. P. Das, S. Ganguly, S. Margel, A. Gedanken // *Nanoscale Advances*, 2021, **3**, 6762–6796.
2. L. Blomqvist, G.F. Nordberg, V.M. Nurchi, J.O. Aaseth // *Biomolecules*, 2022, **12**(6), 742.

OPTIMIZING PLATING TECHNIQUE FOR DIFFERENT BACTERIAL STRAINS

Sampson Kennie Wayoe^{1*}, Johnson Emmanuel Sharpe^{1*}, David Visentin², Željka Maglica²,

¹ Faculty of Biotechnology and Drug Development, University of Rijeka, Croatia

² Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Lithuania
sampson.wayoe@chgf.stud.vu.lt

Abstract

Plating methods are essential for bacterial quantification and analysis, but traditional techniques require significant resources and incubator space (1). This study aimed to optimize the drop plate method for *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, and *Mycobacterium smegmatis* to improve efficiency while maintaining accuracy and reproducibility. The drop plate method enables simultaneous plating of multiple dilutions, significantly reducing the number of Petri dishes and media used. Additionally, an absorbance-based approach (OD600) was integrated to determine the appropriate dilution for plating, streamlining the process further. If OD600 was below 0.4, the 4th and 5th dilutions were plated, whereas OD600 above 0.5 led to plating the 5th and 6th dilutions. Results demonstrated that this approach successfully minimized resource consumption without compromising bacterial quantification accuracy. Furthermore, duplicate plating at each time point confirmed the reproducibility of results. This optimized workflow offers a cost-effective, scalable solution for bacterial enumeration while ensuring reliable experimental outcomes.

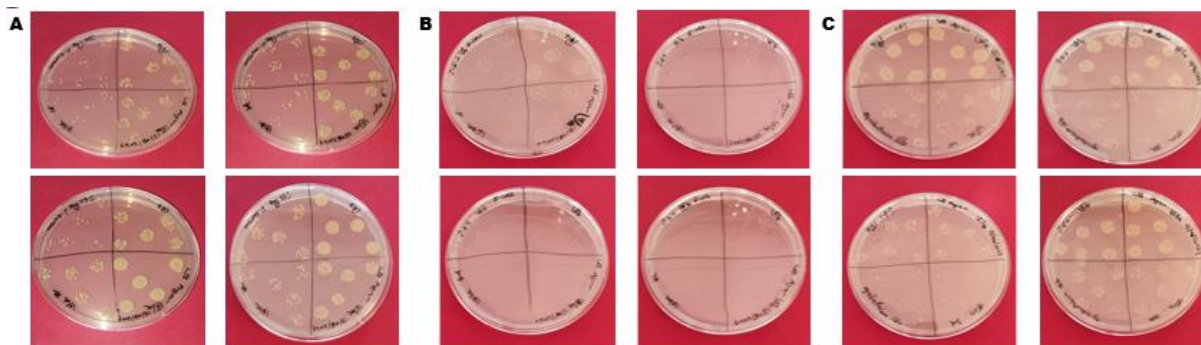


Figure 1. Quadrant dilution results for the drop plate method. (A) *Staphylococcus aureus* quadrant plates showing colony growth from different dilutions. (B) *Escherichia coli* quadrant plates displaying colony counts from various dilutions. (C) *Mycobacterium smegmatis* quadrant plates demonstrating colony formation across dilutions. Each quadrant represents a different dilution level, showcasing the efficiency of the drop plate method in assessing bacterial growth.

Acknowledgement

I would like to sincerely thank my supervisor, Željka Maglica, and my mentor, David Visentin, for their invaluable guidance, support, and encouragement throughout this work. Their expertise and insights played a crucial role in shaping this project, and I am deeply grateful for their mentorship.

Reference

1. C. Chen, G. Nace, P. Irwin // J Microbiol Method, 2003, 55, 475–479.

EVALUATION OF THE EFFECTIVENESS OF USING BUCKLE ARRESTORS TO PREVENT SUBSEA PIPELINE PROPAGATION BUCKLING IN WEST AFRICA FIELDS

Sampson Kennie Wayoe^{1,2}

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

² Department of Marine Engineering, Regional Maritime University, Ghana

e-mail: Sampson.wayoe@chgf.stud.vu.lt

One of the difficulties subsea production systems face is the transportation of crude oil [1]. This research evaluated the effectiveness of using buckle arrestors to prevent propagation buckling in subsea pipelines, particularly in the oil and gas fields of West Africa. Two organizations (Tullow oil & TechnipFmc) within the West Africa offshore oil and gas industry is used in this case study. At upstream stages of its operational activities, the petroleum industry is a tremendously diverse sector with a large number of organizations and participants. This research lacks the necessary resources (money, time, staff, and tools) to conduct a thorough examination to evaluate the effectiveness of using buckle arrestors to prevent propagation buckling in subsea pipelines within the oil and gas fields in West Africa and so this report had to use a case study approach and a survey to address its research questions, concentrating on the subsea pipelines sectors of the industry, because there were not many resources available for this kind of research, and it was necessary to be brief and concentrate on the research intersection (research questions). The study emphasizes usage of buckle arrestors that can withstand high pressures, high temperatures, and corrosion while remaining cost-effective in the oil and gas fields in West Africa. Recommendations highlights the use of integral and clamp buckle arrestor types and autonomous robotics for installation of buckle arrestors and sustainability in subsea pipeline operations in the oil and gas fields in West Africa.

References

1. B. Oyenein // Challenges of Deepwater Developments, 2011,367-373.

A

Abromavičius, Rimvydas	65
Aleksaitytė, Gabija	15
Ambrasevičiūtė, Silvija	16
Anusevičius, Kazimieras	43
Arbačiauskienė, Eglė	40, 80, 82
Ashraf, Madiha	18

B

Baltaševičiūtė, Paula	19
Baniukaitienė, Odeta	21
Barauskaitė-Šarkinienė, Neringa	16
Bašinskaitė, Rugilė	21
Bendžiūtė, Simona	22
Bernotavičiūtė, Reda	23
Brazys, Ernestas	41
Bronsiene, Asta	55
Bruckštus, Algirdas	34
Bučinskaitė, Paulina	25
Bukšnaitienė, Rita	34

C

Čereškaitė, Vanesa	26
Chamorro, Nieves G. Pedros	65
Čiuladienė, Aušra	73
Čižeikienė, Dalia	49

D

Dagys, Marius	64
Daškevičienė, Marytė	36
Dastankyzy, Aigul	12
Dervinytė, Sofija Beatričė	27
Drūtytė, Aistė	30
Družaitė, Paulina	29
Durgaryan, Ranush	36

E

Eisinas, Anatolijus	39
Elsheikh, Maab	11
Ežerskytė, Eglė	84

F

Franckevičius, Marius	19
-----------------------------	----

G

Gasiulytė, Eidvyelė	31
Getautis, Vytautas	36
Gliaudytė, Laura	32
Gojaeva, Shovkat	33
Gražulevičius, J. V.	52, 63
Griškonis, Egidijus	76

Griškonytė, Gabija	34
Grybaitė, Birutė	69
Gulbinas, Vidmantas	19

H

Hayashi, Koichiro	11
-------------------------	----

I

Inkrataitė, Greta	72
Ishikawa, Kunio	11
Ivanauskas, Remigijus	58

J

Jakštys, Baltramiejus	66
Jankūnaitė, Dalia	38
Jašinskaitė, Goda	21
Jašinskas, Vidmantas	19
Jaskūnas, Andrius	65
Jasulaitienė, Vitalija	64
Jonuškienė, Ilona	18, 53, 78

K

Kairytė, Fausta	35
Kalatozishvili, A.	63
Kaleininkaitė, Guostė	36
Kaminskyi, Daniil	37
Kantminienė, Kristina	53, 78
Kareiva, Aivaras	12, 48, 73
Karoblis, Dovydas	12, 48
Kaškonienė, Vilma	71
Kederienė, Vilija	30, 42, 82
Keruckienė, R.	52, 63
Kirklytė, Leonora	38
Kishida, Ryo	11
Kleinauskas, Ričardas	39
Klimašauskaitė, Kamilė	40
Klimkevičius, Vaidas	84
Kosoko, Samuel A.	41
Kovševič, Arnas	42
Krugly, Edvinas	31
Krylova, Valentina	77
Kučinskas, Augustas	43
Kulikauskaitė, Beatričė	44
Kvietkauskas, Evaldas	46
Kybartienė, Nora	54

L

Lu, Ming-Chun	29
Lugauskas, Evaldas	12

M

Maglica, Željka	85
Magomedov, Artiom	36
Malinauskienė, Vida	23, 30
Mamonaitė, Ugnė	47
Mandal, Pranga Prava	12, 48
Mankutė, Vaida	49
Marapolskis, A.	52
Martuzevičius, Dainius	29
Maryam, Tabita	53
Masionė, Goda	33
Maslauskaitė, Eglė	26
Matijūnas, Mindaugas	58
Matutytė, Neringa	54
Melnikas, Aistis	55
Meškys, Rolandas	64
Mickevičius, Vytautas	43
Mikučiūnaitė, Justina	56
Mockaitis, Tomas	44
Mockus, Gabrielius	59
Mockutė, Emilija	60
Momgaudis, Kajus	61
Morkvėnaitė, Emilija	62

N

Naghizade, R.	63
Naujokaitis, Arnas	64
Navaruckienė, Aukšė	75
Niaura, Gediminas	13

O

Oksas, Mindaugas	64
Omekara, Henry Jonhson C.	65
Ostrauskaitė, Jolita	75

P

Pakštas, Vidas	19, 55
Paleckienė, Rasa	26
Panneerselvam, Anusiya	66
Paulauskaitė, Martyna	67
Petrašauskienė, Neringa	18
Popovas, Ugnius	68
Pranaitytė, Guoda	69
Prasauskas, Tadas	33
Pukalskienė, Milda	47
Pupiūtė, Aistė	21

R

Rakštys, Kasparas	56
Ramanavičius, Arūnas	41, 44, 83
Ratautaite, Vilma	83
Ratautas, Dalius	64

Ratautas, Karolis	46
Raudžiūtė, Rugilė	71
Reškevičius, Povilas	60
Ričkutė, Nerija	72
Rudaitytė, Gustė	73
Rutkaitė, Ramunė	27, 62
Rutkienė, Rasa	64
Ruzgys, Paulius	16

S

Šačkus, Algirdas	40, 80, 82
Sahaleh, Hamidreza	74
Sanchez Gonzalez, Yudania	55
Sapijanskaitė-Banevič, Birutė	44
Šatkauskas, Saulius	16, 66
Savickė, Miglė	27, 62
Šereikaitė, Viltė	75
Šermukšnytė, Aida	78
Sharpe, Johnson Emmanuel	85
Shimabukuro, Masaya	11
Silkinis, Rokas	59
Skudžius, Ramūnas	72
Šlinkšienė, Rasa	15
Šmigelskas, Deimantas	59
Stankevičienė, Rima	18, 53
Statkevičius, Vasaris	76
Sutkus, Evaldas	77

T

Talačkaitė, Simona	78
Tauraitė, Daiva	37
Tichonovas, Martynas	38
Tsuchiya, Akira	11
Tumosienė, Ingrida	53, 78

U

Urnėžaitė, Inga	25, 60
Užupytė, Agnė	80

V

Valiūnienė, Aušra	61
Vasiliauskas, Tadas	81
Vaškevičienė, Irena	23
Veikšaitė, Melita	40
Vilčiauskas, Linas	59
Viltrakis, Povilas	82
Vinciunas, Jonas	83
Visentin, David	85
Vrubliauskaitė, Viktorija	84

W

Wayoe, Sampson Kennie	85, 86
-----------------------------	--------

Y		Žalnėravičius, Rokas.....	64
Yang, Bowen	36	Žarkov, Aleksej	22
Z		Zinovičius, Antanas	44
Zalėnkienė, Skirma.....	55	Žmuidzinavičienė, Nerita	76
		Žukauskaitė, Asta	42
		Žutautė, Ieva	34, 35, 67, 68, 81

Vilnius University Press

9 Saulėtekio Av., III Building, LT-10222 Vilnius

info@leidykla.vu.lt, www.leidykla.vu.lt/en/

www.knygynas.vu.lt, www.journals.vu.lt