

Chemistry and Chemical Technology 2026

Student Scientific Conference

May 22 2026, Kaunas, Lithuania



ORGANIZED BY



Vilnius University



CENTER FOR PHYSICAL SCIENCES AND TECHNOLOGY



Klaipeda University



LIETUVOS CHEMIKŲ DRAUGIJA
Lithuanian Chemical Society

Kaunas University of Technology
Faculty of Chemical Technology

Student's Scientific Conference

„Chemistry and Chemical Technology 2026“
Abstract Book

Kaunas, 2026

Sponsors



BIOTECHA

Biou^R

Cosmoway
COSMETICS LABORATORY

HI-LABS
SMART. CLEAN.
GREEN.



 **nord**clinic

SilikataS

VIVA
FERTILIS

Organizing Committee

Dr. Tadas Prasauskas (Kaunas University of Technology, Lithuania) – chairman
Dr. Jolanta Donėlienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Ina Jasutienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Vilija Kederienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Milda Keršienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Raimonda Kubiliūtė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Rasa Paleckienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Gerda Paurė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
PhD student Gailė Pocevičiūtė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Deimantė Rosliuk (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Jūratė Simokaitienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Joana Solovjova (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Rasa Šlinkšienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Ingrida Tumosienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)

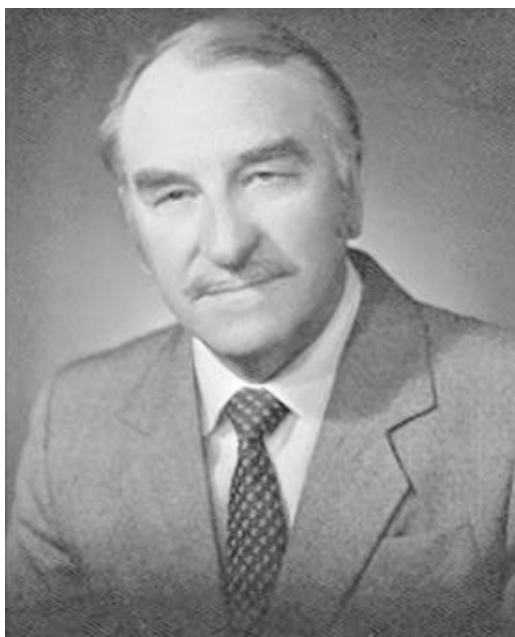
Scientific Committee

Prof. Dr. Vaida Kitrytė-Syrpa (Kaunas University of Technology, Lithuania) – chairwoman
Prof. Dr. Ingrida Ancutienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Assoc. Prof. Dr. Jonas Baltrušaitis (Lehigh University, USA)
Assoc. Prof. Dr. Audrius Bučinskas (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Prof. Dr. Vytautas Getautis (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Assoc. Prof. Dr. Ilona Jonuškienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Prof. Habil. Dr. Aivaras Kareiva (Vilnius University, Lithuania)
Assoc. Prof. Vaidotas Kisielius, Aarhus University (Denmark).
Prof. Dr. Dainius Martuzevičius (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Prof. Dr. Rasa Pauliukaitė (Center for Physical Sciences and Technology, Lithuania)
Prof. Habil. Dr. Rimantas Ramanauskas (Center for Physical Sciences and Technology, Lithuania)
Prof. Dr. Ramunė Rutkaitė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Prof. Dr. Raimundas Šiaučiūnas (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Assoc. Prof. František Šoukal (Brno University of Technology, Czech Republic)
Prof. Dr. Maris Turks (Riga Technical University, Latvia)
Assoc. Prof. Dr. Eugenijus Urnėžius (University of Portland USA)

Editors of a Conference Book of Abstracts

Dr. Ina Jasutienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)
Dr. Ingrida Tumosienė (Kaunas University of Technology, Lithuania)

Prof. ROMUALDAS BALTRUŠIS



On May 1 of this year, Professor Romualdas Baltrušis, a distinguished scientist and habilitated doctor, celebrates his 100th birthday. For most of this long period, Prof. R. Baltrušis devoted his work to the Kaunas Polytechnic Institute and its successor, Kaunas University of Technology.

Romualdas Baltrušis was born on May 1, 1926, in Ukmergė. After graduating from Antanas Smetona Gymnasium in Ukmergė in 1945, he studied chemistry at Kaunas University and, having graduated with honours, began his scientific career in 1950 as a postgraduate (aspirant) at the D. Mendeleev Institute of Chemical Technology in Moscow under Prof., Academician V. Radionov. From 1952, he continued his work at the Department of Organic Chemistry of the Kaunas Polytechnic Institute (KPI), where, under the guidance of Academician Antanas Purėnas, he investigated the synthesis of β -amino acids and their derivatives. As early as 1954, he defended his Candidate of Sciences (Chemistry) dissertation, "Synthesis and transformations of N-aryl β -amino acids," and sixteen years later, in 1970, he defended his doctoral dissertation devoted to the synthesis of N-aryl, N-pyridyl, and N-quinolyl β -alanines and their transformations into pyrimidine derivatives. In 1973, he was awarded the academic title of Professor.

R. Baltrušis served as a professor for eight years. In 1980, he was elected Head of the Department of Organic Chemistry and led the department until 1990. Thereafter, until his retirement (1994), he worked as a professor in the department. Prof. R. Baltrušis was greatly appreciated by students and undoubtedly with good reason: in 1986 he won the Best Lecturer competition and delivered lecture courses in a range of subjects, including organic chemistry, bioorganic chemistry, polymer physics and chemistry, polymer chemistry, and the chemistry of wood and cellulose.

Prof. R. Baltrušis has written three textbooks, both independently and in collaboration with co-authors.: "Fundamentals of the chemistry of macromolecular compounds" (1966) and "Organic chemistry", Parts I and II (1969/1971). For these organic chemistry textbooks, Prof. R. Baltrušis and co-authors were awarded a republican prize (1975). In 1999, Prof. R. Baltrušis prepared and published the monograph "Synthesis, transformations, and properties of N-aryl

(heterocyclyl) β -alanines". Together with co-authors, he translated V. Radionov's "Practical works in organic chemistry, and edited Russian-to-Lithuanian translations of the books "Organic macromolecular compounds" and "Physical chemistry of polymers". In 1986, Professor Romualdas Baltrušis was awarded the honorary title of Distinguished Scientist of Lithuania.



Prof. R. Baltrušis, A. Machtejeva, A. Zubienė, Z. J. Beresnevičius in the laboratory of the Department of Organic Chemistry, 1971



Organic Chemistry Laboratory of Growth Regulator Synthesis: prof. R. Baltrušis, J. Bylinskaitė, V. Mickevičius, Z. J. Beresnevičius, 1986

More than 130 scientific articles published with co-authors, 49 author's certificates, nearly 40 popular-science articles, participation in 38 scientific conferences, and the supervision of 9 doctoral and 2 habilitation theses, whose graduates continue research in the synthesis of the compounds, testify to the exceptionally successful activity of this talented scientist and educator. We congratulate Professor Romualdas Baltrušis on this honourable jubilee and wish him strong health and continued success in his diverse and fruitful endeavours.

Prof. VACLOVA ZELIONKAITĖ



In 2026, we celebrate the 100th anniversary of the birth of Professor Vaclova Zelionkaitė – a distinguished Lithuanian chemist, habilitated doctor, professor, State Prize laureate, and long-standing academic of the Faculty of Chemical Technology.

Vaclova Zelionkaitė was born on 11 May 1926 in Girstupis village, Kaunas district. After graduating from Kaunas 5th Gymnasium, she entered the Faculty of Chemical Technology of Kaunas State Vytautas Magnus University in 1945 and graduated in 1950. While still a student, she began her first scientific work under the supervision of Academician Jonas Janickis.

In 1955, V. Zelionkaitė defended her dissertation and was awarded the degree of Candidate of Chemical Sciences. In 1964, she defended her Doctor of Chemical Sciences dissertation, titled *Research in the Field of Selenium Oxyacids*, which was later recognised as equivalent to a habilitated doctor degree. She became the first woman in Lithuania to be awarded the Doctor of Chemical Sciences degree. In 1968, she was awarded the academic title of Professor. Professor Zelionkaitė worked at the Department of Physical Chemistry until 1969, where she taught courses in physical and colloid chemistry, sulphuric acid technology, and fixed nitrogen technology. She supervised laboratory work, diploma projects, industrial placements, and the scientific work of postgraduate students and colleagues.

From 1969 to 1985, Prof. V. Zelionkaitė served as Head of the Department of Inorganic Chemistry and later continued her work as professor of the department. She taught courses in general and inorganic chemistry and supervised laboratory and research-based teaching activities in inorganic and analytical chemistry. Her main research field was the chemistry of sulphur, selenium, tellurium and arsenic compounds, including the formation, properties and transformations of oxyacids containing these elements. Her scientific work led to the synthesis and characterization of about 50 new inorganic compounds, some of which showed biological activity and potential for applications in conductive and semiconductive films on polymer materials. She also led applied research contracts with industrial enterprises and research institutes in Lithuania and abroad.



V. Zelionkaitė graduated from the Faculty of Chemical Technology, 1950 (Prof. V. Zelionkaitė family archive)



Commemoration of chemists' anniversaries at the Faculty of Chemical Technology of KTU, 1996. From left: Prof. E. Pacauskas, Prof. R. Baltrušis, Prof. B. Stulpinas, Prof. V. Zelionkaitė, Prof. J. Janickis. (KTU Museum)

Prof. Zelionkaitė authored and co-authored more than 150 scientific publications and received 7 author's certificates. She made a substantial contribution to chemical education by preparing teaching and methodological publications, including *Sulphuric Acid Production* (1968), *Laboratory Works in Physicochemical Analysis*, *Lecture Notes in Inorganic Chemistry* (Part I, 1972; Part II, 1975), and *Laboratory Works in General and Inorganic Chemistry*, which was published in six editions between 1972 and 1997. In 1995, she also published the textbook *General and Inorganic Chemistry*.

Professor Vaclova Zelionkaitė passed away on 13 August 2017. Her scientific achievements, pedagogical work, and dedication to academic life remain an important part of the history of inorganic chemistry, chemical education, and the Faculty of Chemical Technology.

Invited Speakers



Assoc. Prof. Jonas Baltrušaitis

Department of Chemical and Biomolecular
Engineering
Lehigh University, USA

Jonas Baltrušaitis is an Associate Professor of Chemical and Biomolecular Engineering at Lehigh University, whose work is characterized by a multidisciplinary approach to sustainable chemical engineering and molecular-level surface science. He earned his PhD in Physical Chemistry from the University of Iowa in 2007 and has authored more than 300 peer-reviewed publications. His research spans fundamental catalysis and atmospheric chemistry, as well as smart nutrient-delivery systems for sustainable agriculture. Using advanced surface-sensitive spectroscopies, he connects theoretical physical chemistry with practical engineering solutions for global challenges, including the remediation of forever chemicals and catalytic processes in fossil fuel refining.

Presentation Overview

In the realm of electrochemical CO₂ reduction, Prof. Baltrušaitis focuses on the conversion of greenhouse gases into value-added fuels and chemical feedstocks, such as formic acid, methane, and ethylene. His research is particularly distinguished by its move toward realistic industrial applications, investigating how catalysts perform under dilute flue gas conditions rather than idealized pure CO₂ streams.

By engineering specialized electrode surfaces, such as tin-decorated copper oxides, his group has achieved high Faradaic efficiency while suppressing the competing hydrogen evolution reaction. Through the integration of X-ray Photoelectron Spectroscopy and computational modelling, his work provides mechanistic insights necessary to develop a low-temperature redox cycle, ultimately supporting the transition toward a sustainable, solar-fuel-based economy.



Prof. Rasa Pauliukaitė

Department of Nanoengineering,
Center for Physical Sciences and Technology,
Lithuania

Professor Rasa Pauliukaitė is a chemist and leading Chief Researcher at the Department of Nanoengineering, where she also heads the Laboratory of Functional Nanomaterials. She obtained her PhD in Physical Sciences at the Institute of Chemistry in Vilnius in 1998 and gained postdoctoral experience in Austria, Slovenia, Switzerland, and Portugal. Her research over more than 20 years has focused on the development of materials for sensors and the optimization of their architecture to achieve improved analytical performance, including sensitivity, stability, and selectivity. She has supervised seven PhD students and has extensive experience in international collaboration with academic institutions worldwide.

Presentation Overview

Electroanalysis is a subdiscipline of electrochemistry focused on the development of novel techniques, analytical methodologies, and modified electrode systems for quantitative analysis. Recent advances have expanded the range of detectable analytes and improved the reproducibility and robustness of electrochemical sensors, making them increasingly suitable for continuous monitoring and point-of-care diagnostics.

Our research group develops electrochemical sensors for a broad range of applications, including health monitoring, plant health studies, archaeological sample investigation, and fungal detection. A central aspect of this work is the exploration and integration of advanced materials, with particular emphasis on carbon-based nanomaterials and conducting polymers, as well as electrochemical approaches for detecting both electroactive and non-electroactive species.

In this contribution, we present key aspects of the synthesis, characterisation, and application of these materials in the electrochemical sensing of diverse analytes and applications.



Prof. Maris Turks

Faculty of Natural Sciences and Technology
Riga Technical University, Latvia

Māris Turks is Professor at the Faculty of Natural Sciences and Technology, Riga Technical University, Latvia. He obtained his doctoral degree in organic chemistry from the Swiss Federal Institute of Technology in Lausanne and subsequently spent one year as a Postdoctoral Fellow at Stanford University. In 2007, he returned to Riga Technical University and started his independent academic career. He served as Director of the Institute of Technology of Organic Chemistry during period 2010-2023 and as Dean of FMSAC RTU during period 2018-2023. Since 2024, Prof. Turks is Dean of the Faculty of Natural Sciences and Technology, RTU. Since 2015, M. Turks serves as associate editor of SCI journal "Chemistry of Heterocyclic Compounds". Prof. Turks' research interests include organosilicon and organogermanium chemistry, sulfur dioxide chemistry, carbohydrate and nucleoside chemistry, functionalized heterocycles, energetic compounds, and natural triterpenoids.

Presentation Overview

The lecture will present recent advances in 1,2-metalloid shift chemistry of propargyl silanes and germanes for the stereocontrolled synthesis of allylic and heterocyclic systems. Electrophilic activation of propargyl metalloids induces vinyl cation–allyl cation rearrangements through 1,2-metalloid migration, generating reactive intermediates suitable for intermolecular and intramolecular trapping by various nucleophiles. The developed methodology enables efficient access to multifunctionalized products containing vinyl halide, vinyl silane, and heterocyclic motifs, which can be further transformed by cross-coupling and allylic substitution reactions. Mechanistic aspects of electrophile-induced rearrangements, stereocontrolled double-bond formation, and multicomponent processes involving sequential nucleophilic additions will be discussed. The presented work demonstrates the synthetic potential of metalloid migration strategies for the preparation of structurally complex organic molecules.



Assoc. Prof. František Šoukal

Faculty of Chemistry Brno
University of Technology, Czechia

František Šoukal is affiliated with the Faculty of Chemistry at Brno University of Technology in Czechia, where he has long been engaged in research in the field of inorganic materials chemistry and physics. His expertise is strongly focused on the chemistry and technology of cementitious and construction materials, particularly on the processes governing their formation, transformation, and long-term performance. His research specializes in the mineralogical and microstructural aspects of reaction processes, with particular emphasis on hydration and carbonation of cementitious and alternative binder-based secondary raw materials. His research group has recently focused on the development of ultra-high-performance concretes for ballistic protection of critical infrastructure, carbonation hardening of inorganic binders, and the development of low-emission and sustainable construction materials.

Presentation Overview

The plenary lecture focuses on reducing CO₂ emissions in the energy-intensive cement industry through the mineral carbonation of calcium silicate-based materials. It presents carbonation as an effective approach for long-term CO₂ sequestration while simultaneously improving the mechanical properties of non-cementitious materials.

The core of the presentation addresses a detailed investigation of the accelerated carbonation of γ -C₂S using isothermal calorimetry, including the development of custom high-pressure ampoules that enable measurements under elevated CO₂ pressures. The results demonstrate that carbonation is a rapid and strongly exothermic process, occurring predominantly within the first hours and leading mainly to the formation of crystalline phases such as calcite and aragonite, alongside amorphous products.

The lecture further highlights the influence of process parameters on reaction kinetics and confirms that isothermal calorimetry is a suitable method for studying carbonation under controlled conditions, with the water-to-solid ratio identified as a key factor.



Assoc. Prof. Vaidotas Kisielius,

Department of Environmental Science,
Aarhus University, Denmark

Vaidotas Kisielius works at Aarhus University, Department of Environmental Science, in the field of Environmental Chemistry & Toxicology. In collaboration with international partners, he focuses on advanced mass spectrometry methods for the analysis of trace organic compounds in complex environmental samples. His research includes high-resolution mass spectrometry, environmental chemistry, micropollutant fate, environmental metabolomics, and advanced wastewater post-treatment technologies.

Presentation Overview

Mass spectrometry imaging (MSI) is a relatively new analytical technique that allows not only identification of compounds present in a sample, but also determination of their spatial distribution. In this presentation, the capabilities of MSI to enable simultaneous detection of compounds, without the need for chemical labelling, will be introduced. The approach is applicable across environmental science, biology, biotechnology, medicine, and materials research. It can be used to illustrate the distribution of pollutants in heterogeneous environmental samples, track metabolites in biological tissues, follow pharmaceuticals within organs, and investigate additives, degradation products, and contaminants within polymers and other complex materials.

The concept will be illustrated through two selected case studies. First, MSI applied to wastewater biofilms shows that micropollutant degradation is not uniform, but occurs in localized “hotspots” within the biofilm structure. Second, an example from environmental toxicology demonstrates that MSI can map the distribution of contaminants in biological tissues, such as in the nervous system of an intact, multicellular aquatic organism.



Assoc. Prof. Eugenijus Urnėžius

Department of Chemistry and Biochemistry
University of Portland, USA

Eugenijus Urnėžius graduated from Vilnius University in 1992. He continued his studies at Case Western Reserve University (1994–1999) under the guidance of Prof. John D. Protasiewicz and, after defending his PhD thesis, joined the group of Prof. John E. Ellis at the University of Minnesota for postdoctoral training (1999–2001). He began his independent academic career at Michigan Technological University in 2001 and moved to the University of Portland in 2009, where he is currently Associate Professor in the Department of Chemistry and Biochemistry. His research focuses on electroactive organophosphorus compounds and coordination complexes supported by multidentate phosphorus/sulfur ligands.

Presentation Overview

2,5-Di(phosphino)-1,4-hydroquinones function as effective binucleating ligands towards Ni(II) centers. Their derivatives, 2,5-di(phosphoryl)-3,6-di(X)-1,4-hydroquinones (phosphoryl = -P(=O)Ph₂ or -P(=O)iPr₂; X = F or Cl), readily undergo double oxidative dehalogenation yielding 2,5-dihydroxy-1,4-quinones appended with two -P(=O)R₂ groups. These compounds are redox-active, engage in strong hydrogen bonding with water, and display versatile coordination chemistry towards Cu(II) centers.

Replacing -P(=O)R₂ groups on 2,5-dihydroxy-1,4-quinone with two phosphonato (-P(=O)(OR)₂; R = Me or Et) substituents profoundly affected the solubilities of the functionalized dihydroxy quinones in both water and organic media. In addition, 1,4-hydroquinones appended with two -P(=O)R₂ or -P(=O)(OR)₂ groups were also found to function as single-benzene fluorophores. Spectroscopic, structural, and electrochemical properties of these compounds, as well as synthetic methods used in their preparation, will be presented and discussed.

PROGRAMME

8.00 – 9.00 Registration and Welcome Coffee (Santaka Valley)

9.00 – 9.30 Opening of the Conference (Santaka Valley)

- Opening address by the Vice-Rector for Research of Kaunas University of Technology
- Academic tributes in honour of Prof. Romualdas Baltrušis and Prof. Vaclova Zelionkaitė

9.30 – 11.00 Plenary Session – Keynote Lectures (Santaka Valley):

Session chairs: Prof. Vaida Kitrytė-Syrpa and Assoc. Prof. Vaidotas Kisielius

- Assoc. Prof. Jonas Baltrušaitis, Lehigh University (USA). Storing electron energy in high-value chemicals: from flue gas CO₂ electrochemical oxidation to formic acid co-production
- Prof. Rasa Pauliukaitė, Center for Physical Sciences and Technology (Lithuania). How could electroanalysis help improve well-being?
- Prof. Maris Turks, Riga Technical University (Latvia). 1,2-Metalloid Shift-Enabled Access to Allylic and Heterocyclic Systems from Propargyl Metalloids

11.00 – 11.30 Coffee break / Poster presentations / Exhibition by Industrial Partners (Santaka Valley)

11.30 – 13.00 Plenary Session – Keynote Lectures (Santaka Valley):

Session chairs: Prof. Vaida Kitrytė-Syrpa and Assoc. Prof. Jonas Baltrušaitis

- Assoc. Prof. Vaidotas Kisielius, Aarhus University (Denmark). Visualizing metabolism: mass spectrometric imaging of localized biotransformation in biofilms
- Assoc. Prof. František Šoukal, Brno University of Technology (Czech Republic). Mineralogical Insights into Accelerated Carbonation Products
- Assoc. Prof. Eugenijus Urnėžius, University of Portland (United States of America). Expanded roles of benzoquinonoid platform rendered by phosphine, phosphine oxide, or phosphonate appendages: binucleating ligands for Ni(II) or Cu(II) centers, water-soluble electroactive substances, and single-benzene fluorophores

13.00 – 14.00 Lunch Break / Poster presentations / Exhibition by Industrial Partners (Santaka Valley)

14.00 – 16.30 Parallel Sessions in Thematic Sections

- International Scientific Conference
Parallel Sessions in Thematic Sections (Santaka Valley)
- Student Scientific Conference
Oral Presentation Sessions in Thematic Sections (Faculty of Chemical Technology)

16.30 – 17.00 Coffee Break / Poster presentations / Exhibition by Industrial Partners (Santaka Valley)

17.00 – 17.30 Awards and Closing of the Conference (Santaka Valley)

PRESENTATIONS / PRANEŠIMAI

| | |
|--|-----------|
| Inorganic Chemistry and Technology / Neorganinė chemija ir technologija | 24 |
| Agnė Stravinskaitė, Aivaras Kareiva, Inga Grigoravičiūtė. SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND APPLICATION OF CARBONATED HYDROXYAPATITE | 25 |
| Greta Melkūnaitė, Justina Gaidukevič. SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF GRAPHENE OXIDE AND POLY(ANILINE-ANTHRANILIC ACID) COPOLYMER COMPOSITES | 26 |
| Amina Elkady, Arnas Naujokaitis, Vidas Pakštas. OPTIMIZATION OF ANTIMONY SELENIDE (Sb ₂ Se ₃) ABSORBER LAYERS VIA VAPOR TRANSPORT DEPOSITION (VTD) | 27 |
| Evelina Kasparavičiūtė, Remigijus Ivanauskas, Skirma Žalėnienė. ANNEALING EFFECTS IN Sb ₂ S ₃ THIN FILMS | 28 |
| Dovilė Burakovaitė, Greta Linkaitė, Inga Grigoravičiūtė, Liudmila Bulko-Vitkauskienė, Justina Gaidukevič. SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, AND APPLICATION OF REDUCED GRAPHENE OXIDE/CALCIUM-DEFICIENT HYDROXYAPATITE COMPOSITES FOR ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF DOPAMINE | 29 |
| Henry Johnson Chiemeziem Omekara, Oluwaseun Deborah Aiyeola, Nieves Ganghe Pedros Chamorro, Andrius Jaskūnas. EFFECT OF OPERATING PARAMETERS ON ALKALINE ELECTROLYSIS PERFORMANCE | 30 |
| Islam Hassan, Rasa Pauliukaitė. IBUPROFEN DETECTION AT DIFFERENTLY TREATED CARBON ELECTRODES | 31 |
| Miglė Minalgaitė, Skirmantė Tutlienė, Ramūnas Skaudžius. STUDY OF THE IMPACT OF THE CZOCHRALSKI METHOD PARAMETERS ON THE QUALITY OF LITHIUM FLUORIDE SINGLE CRYSTAL | 36 |
| Simona Bendziute, Jonas Stadulis, Guna Kriekė, Guna Doke, Andris Antuzevics, Aleksej Zarkov. SYNTHESIS AND PHOTOCROMIC PROPERTIES OF BARIUM CHLORAPATITE CERAMICS | 37 |
| Virgis Baltakys, Aldas Marcinkus, Matas Sajatauskas, Titas Pijoraitis, Audrius Juta. SPACE-TIME OF NON-EQUILIBRIUM SYSTEMS: CHEMICAL POTENTIAL DURING PHASE TRANSITIONS α-Fe, γ-Fe, δ-Fe AND LIQUID | 38 |
| Vytautas Taurele, Raimundas Siauciunas. THE INFLUENCE OF CO-MILLING AAC WASTE WITH QUARTZ SAND: EFFECTS ON MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES | 39 |

| | |
|--|-----------|
| Tautvydas Pudžmys, Greta Inkrataitė. STRUCTURAL CHANGES OF YAG:PR INDUCED BY TITANIUM DOPING | 40 |
| Gabrielius Mockus, Linas Vilčiauskas. CONSTRUCTION AND ANALYSIS OF MACHINE LEARNING FORCE FIELDS FOR AQUEOUS PHOSPHORIC ACID SYSTEMS | 41 |
| Vydmantė Astrauskaitė, Nora Kybartienė. THE INFLUENCE OF SPENT COFFEE GROUND BIOCHAR ON THE PROPERTIES OF BUILDING GYPSUM COMPOSITES | 42 |
| Viltė Razmanavičiūtė, Rasa Šlinkšienė. BIOKURO PELENŲ NAUDOJIMO GALIMYBĖS MIŠKININKYSTĖJE IR ŽEMĖS ŪKYJE | 43 |
| Augustinas Zinkus, Mantas Sriubas, Brigita Abakevičienė. SAMARIO IR GADOLINIO OKSIDAIS MODIFIKUOTŲ CERIO OKSIDO NANOMILTELIŲ, SUSINTETINTŲ IŠDEGINIMO IR NUSODINIMO IŠ TIRPALŲ METODAIS, SAVYBIŲ ANALIZĖ | 44 |
| Austėja Šernaitė, Monika Skruodienė, Meldra Kemere, Ramūnas Skaudžius. $Gd_3Ga_{5-2x}Mg_xZr_xO_{12}:Cr^{3+}$ ir $Gd_3Ga_{5-2x}Zn_xZr_xO_{12}:Cr^{3+}$ PAKEISTŲ GRANATŲ SINTEZĖ IR LIUMINESCENCIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS | 45 |
| Dominykas Sapeliauskas, Kristina Jančaitienė. MAISTO PRAMONĖS ATLIEKOS GRANULIUOTOMS TRĄŠOMS GAUTI | 46 |
| Ema Juočinskytė, Skirma Žalenkienė. PLONŲ INDŽIO SULFIDO SLUOKSNIŲ NUSODINIMAS ANT POLIAMIDO 6 PAGRINDO IR UV TYRIMAI | 47 |
| Ema Mišeikytė, Edita Paluckienė, Eglė Baušienė. pH REGULIATORIAUS RECEPTŪROS KŪRIMAS | 48 |
| Gabija Aleksaitytė, Rasa Šlinkšienė. ŽALIAVŲ DALELIŲ DYDŽIO ĮTAKA GRANULIŲ FIZINĖMS IR MECHANINĖMS SAVYBĖMS | 49 |
| Ieva Krivaitė, Kristina Jančaitienė. MAISTO ATLIEKOS SKYSTŲJŲ TRĄŠŲ GAMYBOJE | 50 |
| Jonas Piepalis, Rasa Šlinkšienė. DAUGIAKOMPONENTĖS MIKROELEMENTINĖS SUSPENSINĖS TRĄŠOS IR JŲ GAVIMO BŪDAS | 51 |
| Kamilė Dargytė, Tadas Dambrauskas. MIKROBANGINĖ CINKO JONAIŠ MODIFIKUOTO HIDROKSIAPATITO SINTEZĖ | 52 |
| Neringa Matutytė, Rita Kazernavičiūtė, Arūnas Burlingis, Nora Kybartienė. KAVOS PARUOŠIMO SĄLYGŲ ĮTAKA KAVOS TIRŠČIŲ SUDEČIAI IR JŲ POVEIKIUI β -PUSHIDRAČIO GIPSO SAVYBĖMS | 53 |
| Nida Vileniškytė, Ingrida Ancutienė, Asta Bronušienė. NUO HETEROMETALINIO KOMPLEKSO IKI $ZnIn_2S_4$ DANGŲ: SINTEZĖS STRATEGIJA IR SAVYBIŲ TYRIMAS | 54 |
| Ugnė Malinauskaitė, Tadas Dambrauskas. MAGNIO JONŲ ĮTAKA KARBONIZUOTO HIDROKSIAPATITO SUSIDARYMUI MIKROBANGINĖS SINTEZĖS METU | 55 |

| | |
|--|----|
| Vaiva Ubavičiūtė, Miglė Nareckaitė, Sima Laukaitytė, Skirma Žalėnienė. CINKO SULFIDO SINTEZĖ IR RENTGENO SPINDULIŲ DIFRAKCIJOS ANALIZĖ | 56 |
| Vanesa Čereškaitė, Eglė Maslauskaitė, Rasa Paleckienė. BIOSKAIDŽIŲ TRĄŠŲ DANGŲ KOMPOZICIJŲ TYRIMAI | 57 |
| Organic Chemistry and Technology / Organinė chemija ir technologija | 58 |
| Aryvdas Kalėda, Vida Malinauskienė, Patrik Olekšak, Kamil Musilek. SYNTHESIS OF NEW N-SUBSTITUTED 6-AMINO BENZO[B]THIOPHENE-1,1-DIOXIDES | 59 |
| Eivydas Trioška, Carl Johan Wallentin, Edvinas Orentas. HETEROGENEOUS EPOXIDATION OF ALKENES USING BIOMASS-BASED CATALYST | 60 |
| Meda Antanaitytė, Mariia Stanitska, Alena Kimpel, Dmytro Volyniuk, Juozas Vidas Gražulevičius. TETRAPHENYLETHYLENYL- AND FLUORENYL-FUNCTIONALIZED OXADIAZOLES: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY | 61 |
| Nikoleta Ripinskaitė, Mantas Marčinskas. SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF ORGANIC SEMICONDUCTORS FORMING SAMs FOR TIN-CONTAINING PEROVSKITE SOLAR CELLS | 62 |
| Rithick Ramachandran, Algirdas Šačkus, Eglė Arbačiauskienė. EFFICIENT ONE-POT SYNTHESIS OF TRIAZOLE/PYRAZOLE/BENZIMIDAZOLE HYBRIDS | 63 |
| Tadas Vasiliauskas, Ieva Žutautė. SYNTHESIS OF N-SUBSTITUTED 2-((4-(BENZIMIDAZO[2,1-B][1,3]THIAZIN-4-YL)PHENYL)(BOC)AMINO)ACETAMIDES FOR THE RESEARCH OF AMYLOID AGGREGATION MODULATORS | 64 |
| Roberta Kuneikytė, Alena Kadlecová, Algirdas Šačkus, Asta Žukauskaitė, Vida Malinauskienė. 5-INDOLIL-1,3,4-OXSADIAZOLO-2-TIOLIŲ SINTEZĖ IR MODIFIKAVIMAS | 65 |
| Aistė Starkauskaitė, Birutė Grybaitė, Vytautas Mickevičius. NAUJŲ NAFTALENO FRAGMENTŲ TURINČIŲ IMIDAZOL-2-TIOLIO DARINIŲ SINTEZĖ | 66 |
| Ugnė Ramanauskaitė, Simona Urnikaitė, Jurga Bagdzevičienė, Vytautas Getautis. CINKO KARBOKSILATŲ TYRIMAS IR CHARAKTERIZAVIMAS ALIEJINIŲ DAŽŲ SENĖJIMO PROCESU | 67 |
| Akvilė Jurkšaitė, Kristina Kantminienė, Ilona Jonuškienė, Ingrida Tumosienė. N-PAKEISTŲ 5-CHLORPIRIDINO HIDRAZONŲ SU PENKIANARIAIS HETEROCIKLINIAIS FRAGMENTAIS SINTEZĖ IR BIOLOGINIO AKTYVUMO TYRIMAS | 68 |
| Aistė Drūtytė, Vida Malinauskienė, Asta Žukauskaitė, Vilija Kederienė. PIRIDINO PAGRINDŲ TURINČIŲ DARINIŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAI | 69 |

| | |
|---|-----------|
| Andrius Stankus, Mantas Marčinskas, Tadas Malinauskas. AROMATINIŲ, FOSFORILO FRAGMENTŲ TURINČIŲ, ELEKTRONUS PERNEŠANČIŲ JUNGINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS | 70 |
| Arnas Kovševič, Asta Žukauskaitė, Vilija Kederienė. INDOLO DARINIŲ, TURINČIŲ DIAZEPINO ŽIEDĄ, SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAI | 71 |
| Augustė Vanagaitė, Inesa Zagorskytė, Algirdas Šačkus, Eglė Arbačiauskienė. 2,5-DIHIDROPIRAZOLO[4',3':5,6]PIRANO[4,3B]CHINOLINŲ SINTEZĖ IR CHARAKTERIZAVIMAS | 72 |
| Ema Andriuškaitė, Matas Steponaitis. AROMATINIŲ ORGANINIŲ RŪGŠČIŲ SINTEZĖ IR JŲ TYRIMAS PEROVSKITO PAVIRŠIAUS DEFektŲ PASVAVIMUI | 73 |
| Fausta Kairytė, Ieva Žutautė. (IMIDAZO[2,1- <i>b</i>][1,3]TIAZIN-4-IL)FENOLIŲ SINTEZĖ IR MODIFIKAVIMAS | 74 |
| Gabija Griškonytė, Ieva Žutautė, Algirdas Brukštus. IZOPROPILREZORCINOLIŲ SU ĮVAIRIAIS 2-TIOIMIDAZOLINIAIS PAKAITAIS SINTEZĖ | 75 |
| Gabija Linkaitė, Mantas Marčinskas, Tadas Malinauskas, Vytautas Getautis. DVIGUBĄ SAŲEIKĄ IR FUNKCIONALUMĄ PEROVSKITINIUIOSE SAULĖS ELEMENTUISE TURINČIŲ ORGANINIŲ SKYLĖMS SELEKTYVIŲ PUSLAIDININKIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS | 76 |
| Marijus Danisevičius, Martyna Paulauskaitė, Ieva Žutautė. ELEKTROFILAIS INICIJUOTOS 2-CINAMILTIOBENZIMIDAZOLO CIKLIZACIJOS REAKCIJOS TYRIMAS | 77 |
| Martyna Paulauskaitė, Ieva Žutautė. ELEKTROFILINĖS CIKLIZACIJOS JODO REAGENTAIS TAIKYMAS IMIDAZO[2,1- <i>b</i>][1,3]TIAZINO SISTEMŲ SINTEZEI | 78 |
| Milda Žitinevičiūtė, Matas Steponaitis, Vytautas Getautis. DVIGUBOS FUNKCIJOS SAVITVARKĮ MONOSLUOKSNĮ FORMUOJANČIOS MEDŽIAGOS SKIRTOS PEROVSKITINIŲ SAULĖS ELEMENTŲ EFEKTYVUMUI IR ILGALAIKIUI STABILUMUI PAGERINTI | 79 |
| Neimantė Šartutė, Joana Solovjova, Algirdas Šačkus, Asta Žukauskaitė. FENILETANO RŪGŠTIES DARINIŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIO AKTYVUMO TYRIMAS | 80 |
| Polina Pylskaja, Ieva Žutautė. 4-(IMIDAZO[2,1- <i>b</i>]TIAZIN-5-IL)ANILINO DARINIŲ SINTEZĖ | 81 |
| Simona Alesiūtė, Miglė Dagilienė, Aurimas Bieliauskas, Algirdas Šačkus. NAUJŲ BIPIRAZOLO IR PIRAZOL-PIRAZOLINO DARINIŲ SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAS | 82 |
| Simona Talačkaitė, Aida Šermukšnytė, Kristina Kantminienė, Ilona Jonuškienė, Ingrida Tumosienė. S-ALKILINTŲ 1,2,4-TRIAZOLŲ 2-AMINOPIRIDINO PAGRINDU ADMET SAVYBIŲ ANALIZĖ | 83 |

| | |
|--|-----------|
| Skirmantas Musteikis, Mantas Marčinskas, Tadas Malinauskas. FENOKSIZINO IR FENTIAZINO PUSLAIDININKIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS | 84 |
| Tomas Tutkus, Birutė Sapijaskaitė-Banevič. IMIDAZOL-2-TIOLIO DARINIŲ SINTEZĖ | 85 |
| Ugnė Babianskaitė, Asta Žukauskaitė, Vilija Kederienė. INDOLO FRAGMENTĄ TURINČIŲ CIKLINIŲ DARINIŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAI | 86 |
| Ugnius Popovas, Ieva Žutautė. TRETINIŲ AMINŲ PAGRINDO HSP90 SLOPIKLIŲ SU CHLORREZORCINOLIO FRAGMENTU SINTEZĖ | 87 |
| Polymer Chemistry and Technology / Polimerų chemija ir technologija | 88 |
| Aleena Ijaz, Edvinas Krugly. ALGINATE AND METHYL CELLULOSE BASED HYDROGEL INTEGRATION WITH POLYMERIC SCAFFOLDS FOR IN VITRO JOINT MODELING | 89 |
| Augustas Kristutis, Audrius Bučinskas, Oleksandr Bezikonnyi. EXPERIMENTAL VALIDATION OF THEORETICAL CHARACTERISTICS OF NOVEL METAL-FREE EMITTERS GENERATED USING RPA TECHNOLOGY | 90 |
| Bramos Murthy, Eidvyle Gasiulyte, Darius Ciužas, Ingrida Pauliukaityte, Edvinas Krugly. RESEARCH ZEIN FIBROUS SCAFFOLDS FOR FUTURE CULTURED MEAT APPLICATION | 91 |
| Aysu Nasiribouyony, Jolita Ostrauskaitė, Sigita Grauželienė. DEVELOPMENT AND INVESTIGATION OF VITRIMERS SYNTHESIZED FROM BIO-BASED MONOMERS | 92 |
| Artem Yerniiarov, Sarunas Zukauskas, Alma Rucinskiene, Arunas Ramanavicius. MOLECULARLY IMPRINTED NANOFILM POLYPYRROLE FOR THE DETECTION OF MACROMOLECULES | 93 |
| Danish Khalid, Ernestas Brazys, Vilma Ratautaitė, and Arūnas Ramanavičius. ADVANCING TETRACYCLINE DETECTION THROUGH POLYDOPAMINE-BASED MOLECULARLY IMPRINTED ELECTROCHEMICAL SENSORS | 94 |
| Ugnė Zasčiurinskaitė, Erika Adomavičiūtė, Virginija Jankauskaitė. DEVELOPMENT OF ELECTROSPUN COLLAGEN-BASED SYSTEM ENRICHED WITH BIOACTIVE COMPOUNDS | 95 |
| Shahbaz Khan, Šarūnas Žukauskas. INFLUENCE OF POLYANILINE ON CONDUCTIVITY AND DRUG RELEASE FROM ALGINATE-BASED HYDROGEL | 96 |
| Viktorija Juščenko, Tatjana Kavleiskaja. ENHANCED ANTIOXIDANT ACTIVITY OF CHITO-OLIGOSACCHARIDES VIA FORMATION OF SECONDARY PRODUCTS DURING ACIDIC HYDROLYSIS | 97 |

| | |
|---|------------|
| Rytis Biveinis, Deivis Plaušinitis. STUDY OF THIN 3D PRINTED POLYMER LAYER INTERACTIONS WITH SOLVENTS BY THE QCM AND ELECTROCHEMICAL METHODS | 98 |
| Samuel A. Kosoko, Ernestas Brazys, Vilma Ratautaite and Arūnas Ramanavičius. MOLECULARLY IMPRINTED CONDUCTING POLYMER–HYDROGEL COMPOSITES FOR TETRACYCLINE LOADING AND ELECTRO-RESPONSIVE DRUG DELIVERY | 99 |
| Laurynas Lukomskis, Rasa Šlinkšienė. TRAŠŲ TIRPUMUI REGULIUOTI SKIRTŲ DANGŲ GAVIMAS IR SAVYBĖS | 100 |
| Klaudija Čerkaitė, Joana Bendoraitienė. CELIULIOZINIO PLUOŠTO CHEMINIS MODIFIKAVIMAS | 101 |
| Environmental Chemistry and Technology / Aplinkos chemija ir technologija | 102 |
| Darius Bernotas, Gytis Eidukas. UPCYCLING PRECIOUS METAL RECOVERY SOLUTIONS: FROM BASE METAL ELECTROWINNING TO ELECTROCATALYSTS FOR GREEN HYDROGEN PRODUCTION | 103 |
| Iqra Perveen, Rasa Šlinkšienė. EXTRACTS FROM BIODEGRADABLE RAW MATERIALS AND THEIR PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES | 104 |
| Jones Mwenda Mutegi, Evaldas Šerelis, Ernestas Ivanauskas. E-WASTE GLASS POWDER UTILIZATION IN CONCRETE PAVING BLOCKS | 109 |
| Jurgita Čestauskaitė, Inga Stasiulaitienė, Ron Zevenhoven. COMPARATIVE LIFE CYCLE ASSESSMENT OF SERPENTINE AND PHLOGOPITE-BASED CO ₂ MINERAL CARBONATION ROUTES | 110 |
| Monika Eimutytė, Violeta Kaunelienė. DETERMINATION OF THE QUANTITY AND PROPERTIES OF MICROPLASTICS IN SETTLED INDOOR DUST | 111 |
| Sampson Kennie Wayoe, Rebecca Dedeyo Wayoe DATA-DRIVEN APPROACH FOR PREDICTING AOF AND PERFORMANCE OF OFFSHORE HYDROCARBON WELLS | 112 |
| Vykintė Trakšelytė, Erika Adomavičiūtė. COMPARATIVE ANALYSIS OF PROPERTIES AND MICROPLASTIC RELEASE FROM RAW AND RECYCLED POLYESTER WEFT KNITTED FABRICS | 113 |
| Vilius Jokūbas Šlikas, Linas Miknius. STUDY OF THE EFFECT OF ADDITIVES ON THE PROPERTIES OF MODIFIED BITUMEN | 114 |
| Emilija Mockutė, Povilas Reškevičius, Inga Urniežaitė. ASSESSING THE EFFICIENCY OF PHTHALATES ELIMINATION VIA QUATERNARY STAGE WASTEWATER TREATMENT | 119 |
| Olha Sokolova, Martynas Tichonovas, Simas Račkauskas. ZnO TETRAPOD-BASED CHEMORESISTIVE SENSORS FUNCTIONALISED WITH GRAPHITIC CARBON NITRIDE | 120 |

| | |
|--|------------|
| Umme Aimon, Md. Mahedi Habib Chowdhury. COMPARATIVE LIFE-CYCLE ASSESSMENT OF TIMBER AND BRICK RESIDENTIAL BUILDINGS IN NORWAY: AN EVALUATION OF ENVIRONMENTAL IMPACTS | 121 |
| Adrija Marija Paknytė, Tadas Dambrauskas. ĮSITERPUSIŲ Co ²⁺ JONŲ ĮTAKA GIROLITO TERMINIAM STABILUMUI | 122 |
| Justina Kukelkaitė, Dainius Martuzevičius, Darius Čiužas, Martynas Tichonovas, Simas Račkauskas. PLUOŠTINIŲ FILTRAVIMO MEDŽIAGŲ ANTIMIKROBINIS FUNKCIONALIZAVIMAS NANODALĖMIS | 123 |
| Karina Kuzborskaja, Kristina Jančaitienė. ORGANINIŲ ŽALIAVŲ EKSTRAKTŲ PANAUDOJIMAS TRĄŠŲ KŪRIMUI | 124 |
| Monika Bakierskytė, Tadas Dambrauskas. ĮSITERPUSIŲ SN(IV) JONŲ ĮTAKA GIROLITO TERMINIAM STABILUMUI | 125 |
| Patricija Kirvelaitytė, Justinas Masionis, Martynas Tichonovas, Dainius Martuzevičius. MIKROBIOLOGINIO ORO UŽTERŠTUMO MAŽINIMAS JONIZACINĖMIS TECHNOLOGIJOMIS | 126 |
| Ugnė Mamonaitė, Rasa Šlinkšienė, Renata Žvirdauskienė. MIKROSKOPINIŲ GRYBŲ <i>TRICHODERMA VIRIDE</i> GYVYBINGUMO TYRIMAS KOMBINUOJANT JUOS SU SKIRTINGŲ RŪŠIŲ MINERALINĖMIS TRĄŠOMIS | 127 |
| Food Technology / Maisto technologija | 128 |
| Akila Ramesh, Loreta Bašinskienė, Dawn CP Ambrose. OPTIMIZATION OF IVY GOURD (<i>COCCINIA GRANDIS</i> L.) DRYING AND PRETREATMENT PARAMETERS FOR DEVELOPMENT OF AN INSTANT SOUP MIX | 129 |
| Armanda Uselytė, Milda Keršienė, Renata Baranauskienė. EXTRACTION OF ESSENTIAL OIL FROM <i>ZANTHOXYLUM ARMATUM</i> BY HYDRODISTILLATION AND QUALITATIVE ANALYSIS OF VOLATILE COMPOUNDS | 130 |
| Uladzislau Stuharau, Dalia Urbonavičienė, Marina Sidorenko, Saulius Mickevičius. THE DETERMINATION OF PHENOLIC COMPOUNDS AND CAROTENOIDS IN EXTRACTS FROM DIFFERENT COLOR CARROT (<i>DAUCUS CAROTA</i> L.) ROOT | 131 |
| Greta Tverskytė, Marius Užupis, Michail Syrpas, Petras Rimantas Venskutonis, Vaida Kitrytė-Syrpa. PHYTOCHEMICAL COMPOSITION AND FUNCTIONAL PROPERTIES OF <i>SIDERITIS SCARDICA</i> AND <i>SIDERITIS SYRIACA</i> EXTRACTS OBTAINED BY PRESSURIZED LIQUID EXTRACTION | 132 |
| Radvilė Bagdonavičiūtė, Daiva Žadeikė. CUKRINIŲ RUNKELIŲ IŠSPAUDŲ PANAUDOJIMAS BIOETANOLIO GAMYBAI | 133 |
| Biochemistry and Biotechnology / Biochemija ir biotechnologija | 134 |

| | |
|--|------------|
| Hamidreza Sahaleh, Dr. Jolita Stabrauskienė, Prof. dr. Jurga Bernatoniene. ADDRESSING DRUG DELIVERY CHALLENGES OF ASTAXANTHIN THROUGH LIPOSOMAL TECHNIQUES FOR ORAL ANTICANCER THERAPY | 135 |
| Maja Bogusz, Anna Katarzyna Puszek. SYNTHESIS OF α -KETOAMIDE PSEUDOPEPTIDES TO INHIBIT HTRA ENZYME OF <i>HELICOBACTER PYLORI</i> | 136 |
| Nicolás Gutiérrez Franco, Ilona Jonuškiene. ALGINATE PRODUCTION FROM AZOTOBACTER VINELANDII | 137 |
| Klaudija Jasiulionytė, Ilona Jonuškienė, Kristina Kantminienė, Ingrida Tumosienė. NAUJI PIRIDINO-(1,2,4-TRIAZOL-3-TION)HIDRAZONO DARINIAI: SINTEZĖ IR AKTYVUMO ĮVERTINIMAS | 138 |
| Laura Marija Račytė, Evelina Šidlovska, Margarita Montrimaitė, Gediminas Januška, Rūta Čiurlienė, Eglė Žalytė. TAIKINIŲ TERAPIJOS JUNGINIŲ POVEIKIO ENDOMETRIUMO VĖŽIO 2D IR 3D MODELIAUS ANALIZĖ | 139 |
| Tomas Vaičiulis, Ilona Jonuškienė. ANGLIES ŠALTINIŲ ĮTAKA BAKTERINIO KSANTANO SUSIDARYMUI IR PRODUKTO ANTIOKSIDACINĖMS SAVYBĖMS | 140 |
| Nikolas Žumbakis, Radvilė Gailiūnaitė, Aistė Jekabsone, Deimantė Puzinová. VIRUSINIAIS VEIKSNIAIS STIMULIUOTŲ KVĖPAVIMO TAKŲ UŽLĄSTELINIŲ PŪSLELIŲ POVEIKIS SMEGENŲ KAPILIARŲ ENDOTELIO LĄSTELIŲ BARJERINEI FUNKCIJAI IR UŽDEGIMINIAM ATSAKUI | 141 |

Neorganinė chemija ir technologija

Inorganic Chemistry and Technology

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND APPLICATION OF CARBONATED HYDROXYAPATITE

Agnė Stravinskaitė^{*}, Aivaras Kareiva, Inga Grigoravičiūtė

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

^{*} agne.stravinskaite@chgf.stud.vu.lt

Calcium phosphate (CP) ceramics have been extensively investigated owing to their structural resemblance to the mineral phase of mammalian hard tissues and their ability to promote bone regeneration through bioactive surface properties. Among these materials, synthetic carbonated hydroxyapatite (CHAP) has gained particular interest as a promising alternative to conventional CP ceramics, as several studies have demonstrated improved osteogenic responses and accelerated bone healing. Carbonated apatite, a naturally occurring mineral and a principal component of bone, has served as the basis for the development of synthetic analogues with significant promise in biomaterial applications. Incorporation of carbonate ions (CO_3^{2-}) into the apatite structure decreases crystallinity, which in turn enhances biodegradability under both in vitro and in vivo conditions [1-3].

In addition, inorganic phosphate-based frameworks offer intrinsic lattice stability under highly acidic conditions and enable tunable surface coordination chemistry, making them highly promising candidates for the remediation of air, water, and soil pollution. Moreover, CPs have been successfully applied for the removal of various metal ions from aqueous solutions, highlighting the wider applicability of phosphate-based materials beyond biomedicine [4].

In this study, CHAP powders were synthesized via a low-temperature (60 °C and 80 °C) dissolution-precipitation process using gypsum heated at 100 °C and 120 °C as a precursor. The phase compositions of the synthesized materials were characterized using X-ray diffraction (XRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), and inductively coupled plasma optical emission spectrometry (ICP-OES). Additionally, scanning electron microscopy (SEM) and Brunauer-Emmett-Teller (BET) analysis were employed to assess the surface properties of the samples.

References:

1. M. Kawsar, M. Sahadat Hossain, M. K. Alam, N. M. Bahadur, M. A. A. Shaikh, S. Ahmed. *J. Mater. Chem. B*, **2024** 12(14), p. 3376–3391.
2. T. Lu, S. Yan, H. Shi, J. Ye. *ACS Biomater. Sci. Eng.*, **2023** 9(2), p. 918–931.
3. D. G. Adekanmi, C. R. Garcia, C. M. Lopez-Badillo. *Engineering Chemistry*, **2024** 7, p. 1–24.
4. M. He, Z. Zhang, M. Wang, C. Liang, H. Wang, C. Cheng, Y. Li, Y. Wang, Z. Zhang. *J. Hazard. Mater.*, **2025** 481(136525).

SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF GRAPHENE OXIDE AND POLY(ANILINE-ANTHRANILIC ACID) COPOLYMER COMPOSITES

Greta Melkūnaitė^{*}, Justina Gaidukevič

Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius university, Vilnius, Lithuania

* greta.melkunaite@chgf.stud.vu.lt

Carbon-based nanomaterials have attracted significant attention in sensor technology due to their unique physicochemical properties. Among them, graphene oxide (GO) stands out for its oxygen-containing functional groups (hydroxyl, epoxy, carboxyl), enabling strong interactions with other materials and making it highly promising for electrochemical sensing applications. Conducting polymers, such as polyaniline (PANI), offer tunable electrical properties and structural versatility. Incorporation of anthranilic acid (AA) further enhances these polymers by improving solubility and introducing functional groups for interactions with biomolecules. These materials have recently been widely explored for the sensitive and selective detection of biologically relevant compounds, including neurotransmitters such as serotonin [1]. Serotonin (5-HT) is a crucial neurotransmitter involved in regulating numerous physiological processes, including mood, behavior, appetite, and gastrointestinal function. Abnormal 5-HT levels are associated with various disorders, such as depression, anxiety, diabetes, and neurodegenerative diseases [2]. Therefore, accurate determination of 5-HT concentration is important. Electrochemical sensing offers a promising approach due to its high sensitivity, selectivity, low cost, and suitability for analysis in biological fluids. The aim of this study was to synthesize GO and poly(aniline-anthranilic acid) copolymer composites (GO/PANI-AA) and to perform their structural characterization.

GO was synthesized using a modified Hummers method with graphite as the starting material. Graphite oxidation was carried out using sulfuric acid, potassium persulfate and phosphorus (V) oxide. The resulting intermediate GO product was further oxidized by adding sodium nitrate and potassium permanganate. GO/PANI-AA composites were prepared in hydrochloric acid by dissolving GO, aniline (ANI), anthranilic acid (AA), and ammonium persulfate. The weight ratio of GO to ANI+AA was 1:1, while the molar ratio of ANI to AA in the composite was varied. The results demonstrated that the modification of GO with different PANI-AA copolymers significantly influenced the structural, morphological, and electrochemical properties of the resulting composites. SEM analysis revealed that the formation of the copolymer layer on the GO sheets led to a more homogeneous surface morphology compared to the pristine GO, indicating a uniform coating of the polymer matrix. XPS and Raman spectroscopies' results confirmed the successful formation of the composite. Electrochemical measurements revealed that the composite with an ANI to AA molar ratio of 1:3 exhibited the best electrochemical performance for electrode modification. The results suggest that GO/PANI-AA composites can be effectively used for electrode modification in electrochemical applications. The identified optimal composition provides a basis for further development of conducting polymer materials.

References:

1. I. Ahmad, *et al. Clinica Chimica Acta*, **2025**, 569.
2. D. Dascalescu, C. Apetrei. *Chemosensors*, **2021** 9(1), 14.

OPTIMIZATION OF ANTIMONY SELENIDE (Sb_2Se_3) ABSORBER LAYERS VIA VAPOR TRANSPORT DEPOSITION (VTD)

Amina Elkady^{*}, Arnas Naujokaitis, Vidas Pakštas

Center for Physical Sciences and Technology, Department of Characterization of Materials Structure, Vilnius, Lithuania

^{*} amina.elkady@ftmc.lt

Antimony selenide (Sb_2Se_3) has emerged as a promising absorber for thin-film photovoltaics due to its optimal bandgap (1.1-1.2 eV), high absorption coefficient ($>10^5 \text{ cm}^{-1}$), low toxicity, and earth-abundant constituents [1,2]. However, device performance is strongly governed by the orientation of its quasi-one-dimensional [Sb_4Se_6] ribbons: charge transport is efficient along the ribbons but hindered across the van der Waals gaps between them [3]. Preferential growth of ribbons perpendicular to the substrate is therefore essential for efficient carrier extraction [4].

In previous work, Sb_2Se_3 films were deposited by thermal evaporation (PVD) onto FTO-coated soda-lime glass (SLG) with different buffer layers (SnO_2 , CdS, TiO_2). XRD and SEM analyses showed that, regardless of the buffer or annealing conditions, the films consistently exhibited a dominant horizontal ribbon orientation. Since effective reorientation requires elevated substrate temperatures during growth [5] - a condition not accessible in the PVD setup used - vapor transport deposition (VTD) was adopted, as it enables independent control of source and substrate temperatures [5].

In this study, Sb_2Se_3 absorber layers are grown by VTD onto FTO/SLG substrates coated with a buffer layer and systematically optimized with respect to the source-substrate distance, deposition temperature, and hole-transport layer (HTL). The resulting films and complete solar cell devices are characterized to assess the impact of VTD parameters on crystallinity, ribbon orientation, morphology, and photovoltaic performance, and the best results obtained under optimized conditions are presented.

References:

1. A. Mavlonov et al. *Solar Energy*, **2020**, 201, p. 227–246.
2. A. Bosio et al. *Energies*, **2023** (19), 16, 6862.
3. Y. Zhou et al. *Nature Photonics*, **2015**, 9, p. 409–415.
4. M. Liu et al. *Journal of Alloys and Compounds*, **2023**, 932, p. 167676.
5. X. Wen et al. *Nature Communications*, **2018**, 9, 2179.

ANNEALING EFFECTS IN Sb_2S_3 THIN FILMS

Evelina Kasparavičiūtė^{*}, Remigijus Ivanauskas, Skirma Žalėnienė

Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

* evelina.kasparaviciute@ktu.edu

The rapidly expanding solar energy sector represents a promising pathway toward reducing reliance on fossil fuels, whose extensive use is a major driver of climate change. Consequently, significant research efforts are focused on identifying efficient, resource-saving, and environmentally benign materials suitable for next-generation photovoltaic technologies. Antimony-based chalcogenide compounds have emerged as attractive alternatives to conventional solar cell materials containing toxic elements such as lead, cadmium, or mercury. Among them, antimony sulfide (Sb_2S_3) has attracted significant scientific attention in recent years as a promising functional material for energy and optoelectronic applications. Owing to its favorable direct bandgap in the range of 1.6–2.46 eV, high absorption coefficient in the visible spectral range (approximately 400–700 nm), and p-type semiconductor character, Sb_2S_3 is particularly well suited for use in solar cells, photodetectors, and other light-sensitive devices. Furthermore, antimony is relatively abundant in the Earth's crust, making Sb_2S_3 a more sustainable alternative to conventional photovoltaic materials containing toxic elements such as lead, cadmium, or mercury. For these reasons, antimony sulfide is regarded as one of the most promising candidates for next-generation environmentally friendly solar energy technologies. In addition to its excellent optoelectronic properties, Sb_2S_3 offers several practical advantages, including chemical stability, non-toxicity, resistance to temperature fluctuations, and good long-term durability. It is well known that the morphology, crystal structure, defect concentration and thickness of metal chalcogenide thin films have a decisive effect on their optical and electrical properties [1]. A number of studies have confirmed that annealing of thin films of metal chalcogenides on the surface of various substrates significantly affects the phase composition, morphology, microstructure and optical properties of these films [2, 3]. Considering these data, the main objective of this study was to first form Sb_2S_3 thin films on FTO substrates and then anneal them and evaluate how this operation affects the phase composition, crystallinity, morphological and optical properties of these films. In this work, Sb_2S_3 thin films were formed on the surface of fluorinated tin oxide (FTO) slides by chemical bath deposition (CBD). The Sb_2S_3 film before and after annealing was characterized by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) and atomic force microscopy (AFM). The influence of the annealing effect on the optical properties of thin Sb_2S_3 films was studied using UV-visible spectroscopy.

Acknowledgements. This work was supported by the Research Council of Lithuania.

References:

1. R. Ivanauskas, A. Kunciuė, I. Ancutiene, M. Andrulevicius, M. Mikolajunas. Impact of surface morphology and thickness of tin selenide thin films on their optical properties. *Surfaces and Interfaces*, **2022**, Vol. 28, p. 101675.
2. A. Melnikas, R. Ivanauskas, S. Zalenkiene, M. Mikolajunas. Bismuth(III). Bismuth(III) Sulfide Films by Chemical Bath Deposition Method Using L-Cysteine as a Novel Sulfur Source. *Crystals*, **2025**, Vol. 15, no. 6.
3. R. G. S. Marquina, A. Cerdán-Pasarán, R. G. A. García, V. C. Karade, N. R. Mathews, and X. Mathew. Hydrothermally deposited Sb_2S_3 thin films: Effect of annealing conditions on the optoelectronic properties, the selenization, and photoelectrochemical performance. *Solar Energy*, **2025**, Vol. 301, p. 113942.

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, AND APPLICATION OF REDUCED GRAPHENE OXIDE/CALCIUM-DEFICIENT HYDROXYAPATITE COMPOSITES FOR ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF DOPAMINE

Dovilė Burakovaite^{1*}, Greta Linkaitė¹, Inga Grigoravičiūtė¹, Liudmila Bulko-Vitkauskienė¹, Justina Gaidukevič^{1,2}

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

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

* dovile.burakovaite@chgf.stud.vu.lt

Dopamine (DA) is a key catecholamine neurotransmitter that regulates cardiovascular and renal systems and is involved in reward and pleasure perception [1, 2]. DA concentrations in human blood and serum typically range from 10^{-6} to 10^{-9} mol/L, making its accurate determination particularly challenging [1]. Variations in DA levels are associated with numerous pathological conditions, emphasizing the need for sensitive and reliable analytical methods. Electrochemical sensing has attracted significant attention as an efficient alternative due to its rapid response, simplicity, and cost-effectiveness [3]. The performance of electrochemical sensors is closely related to processes at the electrode surface and the properties of the electrode material. Graphene-based composites combined with bioactive compounds are often used to enhance these properties. In this study, a composite of reduced graphene oxide (rGO) and calcium-deficient hydroxyapatite (CDHA) was investigated as an electrode modifier for the electrochemical detection of DA.

rGO/CDHA composites were synthesized via wet and hydrothermal synthesis methods. In the wet synthesis method, a mixture of gypsum and GO (ratio 2:1) and disodium hydrogen phosphate was heated at 80 °C for 28 hours to produce a rGO/CDHA_W composite. In the hydrothermal synthesis method, a similar mixture of gypsum and GO (ratio 2:1) and disodium hydrogen phosphate was heated in an autoclave at 180 °C for 12 hours to produce a rGO_CDHA_H composite. Structural and morphological analyses confirmed the successful synthesis of rGO/CDHA composites. Raman spectroscopy revealed the presence of phosphate (PO_4^{3-}) bands of CDHA and the characteristic D and G bands of GO. Furthermore, XRD and Raman spectroscopy results indicated that samples synthesized by the wet synthesis method exhibited lower crystallinity and higher amorphousness compared to those synthesized under hydrothermal conditions. FTIR and XPS analyses confirmed the presence of functional groups and elements characteristic of both CDHA and GO in the composites. Electrochemical measurements were conducted in a three-electrode cell using a phosphate buffer solution (pH 7.2). The GCE/rGO/CDHA_W sensor exhibited higher sensitivity ($11.11 \mu\text{A } \mu\text{M}^{-1} \text{cm}^{-2}$) and a lower limit of detection (100.35 nM) compared to the GCE/rGO/CDHA_H sensor. It also demonstrated good selectivity, with minimal changes in DA response in the presence of interfering analytes, high stability over 13 measurements, and good repeatability (RSD < 5%). Further improvements could focus on extending the linear detection range and reducing the LOD.

References:

1. A. Thamilselvan, P. Manivela, V. Rajagopala, N. Nesakumarb, V. Suryanarayananana, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 180, **2019**, 1–8.
2. J. Jackowska, P. Kryszynski, *Anal Bioanal Chem*, 405(11), **2013**, 3753–3771.
3. A. Karim, M. Yasser, A. Ahmad *et al. Journal of Electroanalytical Chemistry*, 959, **2024**, 118157

EFFECT OF OPERATING PARAMETERS ON ALKALINE ELECTROLYSIS PERFORMANCE

Henry Johnson Chiemeziem Omekara, Oluwaseun Deborah Aiyeola^{*}, Nieves Ganghe Pedros Chamorro, Andrius Jaskūnas

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

^{*} oluwaseun.aiyeola@ktu.edu

Hydrogen production through alkaline electrolysis is a key technology for sustainable energy systems. In this study, electrolyzer performance was analyzed using Aspen Plus V14 by evaluating 36 simulation cases with varying current (1000–5000 A), temperature (80–88 °C), and potassium hydroxide (KOH) concentration (20–30 wt.%). The model was developed using the ELECNRTL property method and a rigorous electrochemical framework to predict hydrogen production, specific energy consumption, efficiency, and electrical behavior. Hydrogen production increased proportionally with current (≈ 11.1 –55.6 kg/h), while energy-related variables exhibited nonlinear trends. Specific energy consumption increased from about 40–41 kWh/kg H₂ at 1000 A to above 90 kWh/kg H₂ at 5000 A, reaching up to 170 kWh/kg H₂ in extreme cases; cell voltage increased from approximately 1.5–1.7 V to above 6 V, while LHV efficiency decreased from about 82% to below 40%, indicating strong efficiency losses due to increased ohmic overpotential.

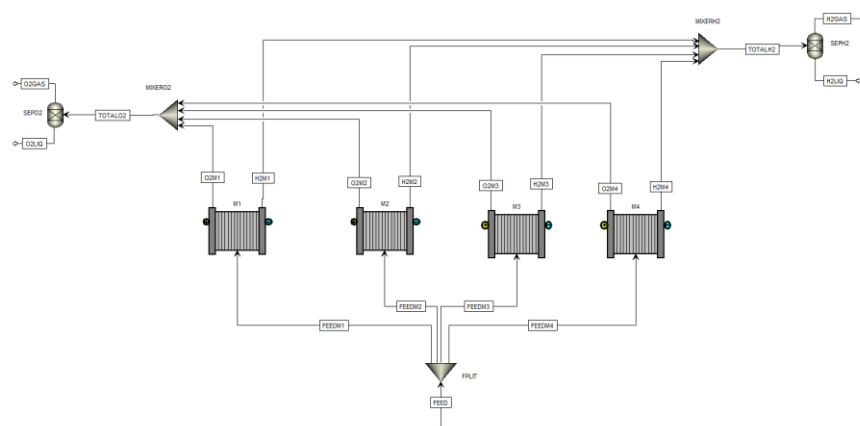


Fig. 1. Aspen Plus flowsheet of the alkaline electrolyzer system with four parallel modules.

Temperature and electrolyte concentration showed negligible influence, confirming that current is the dominant parameter governing performance. The optimal operating region was identified between 2000 A and 3000 A, where a balance between hydrogen production (≈ 22 –33 kg/h) and energy efficiency is achieved, with the most representative industrial condition at 88 °C, 30 wt.% KOH, and 2500–3000 A. At 5000 A, abrupt increases in voltage and energy consumption indicate non-physical behavior and model limitations. Overall, performance is strongly limited by electrical losses at high current densities, making operation at moderate conditions essential for efficient, stable, and industrially realistic electrolyzer operation. Furthermore, the strong coupling between cell voltage, ohmic overpotential, and specific energy consumption confirms that electrical losses are the primary limiting factor in alkaline electrolyzer performance.

IBUPROFEN DETECTION AT DIFFERENTLY TREATED CARBON ELECTRODES

Islam Hassan^{*}, Rasa Pauliukaitė

Department of Nanoengineering, Centre for Physical Sciences and Technology (FTMC), Vilnius, Lithuania

^{*} *islam.hassan@ftmc.lt*

Introduction

The increasing consumption of pharmaceutical compounds, such as ibuprofen (IBF), has raised concerns regarding their presence in environmental and biological systems [1], necessitating the development of sensitive and rapid analytical methods for their detection. Conventional analytical techniques, such as high-performance liquid chromatography (HPLC), gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS), and capillary electrophoresis, while highly accurate, often require complex instrumentation and are not always suitable for rapid or on-site analysis [2].

Electrochemical sensing has emerged as a promising alternative due to its simplicity, low cost, rapid response, and potential for miniaturization [3]. These techniques rely on the measurement of electrical signals generated by redox reactions at the electrode surface, making them particularly suitable for detecting electroactive compounds such as IBF. However, the performance of electrochemical sensors is strongly dependent on the properties of the working electrode. Although glassy carbon electrode (GCE) offers excellent chemical stability and a wide potential window, its analytical performance is often limited by moderate electron-transfer kinetics and low electrochemical surface activity.

In this study, strategies to enhance the performance of GCE were explored through voltametric or anodic activation and surface modification [4–6]. To address the limitations of conventional GCE, strategies based on electrochemical activation and surface modification were investigated. Chronoamperometric anodic activation was employed to enhance the surface properties of the electrode, while further improvement was pursued through the application of a graphene-chitosan (Gr-Chit) composite coating. These approaches aim to increase the electroactive surface area, improve electron-transfer kinetics, and reduce surface fouling, thereby enhancing the analytical performance for IBF detection. Cyclic voltammetry (CV) and differential pulse voltammetry (DPV) were used to evaluate the electrochemical behavior and sensing capabilities of the developed electrodes.

Overall, this work highlights that simple and cost-effective electrode modification strategies can significantly improve the sensitivity of electrochemical sensors, offering a practical approach for the detection of pharmaceutical compounds.

Experimental

Reagents and materials. IBF ($\geq 98\%$), graphene (Gr) nanoplatelets of few-layer with average lateral size of 8 μm , chitosan (Chit) of low molecular weight and the degree of deacetylation is $\geq 75\%$, potassium hexacyanoferrate(III) ($\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$), potassium hexacyanoferrate(II) trihydrate ($\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$), sodium chloride (NaCl), potassium chloride (KCl), ethanol 99%,

phosphoric acid (H_3PO_4), sodium phosphate dibasic (Na_2HPO_4), and boric acid (H_3BO_3), were purchased from Sigma-Aldrich and used as received without further purification.

Chit solutions (0.5%, w/v) were prepared by dissolving in 1% (v/v) acetic acid under continuous stirring until complete dissolution. Gr-Chit dispersions were prepared by adding 1.5 mg of Gr nanoplatelets into 1 mL of the Chit solution, followed by ultrasonication to obtain a homogeneous suspension. Phosphate buffer solution (PBS, 0.1 M, pH 7.5) was prepared using appropriate amounts of H_3PO_4 and NaOH. A borate-phosphate buffer (BPB) solution (0.1M, pH 9.0) was prepared using boric acid and phosphate salts and was used during the anodic activation process. All aqueous solutions were prepared using deionized water with a resistivity of not less than $18.2 \text{ M}\Omega\cdot\text{cm}$.

Electrode Preparation and Modification. A GCE (3 mm diameter, geometric area 0.071 cm^2) was mechanically polished using alumina slurry with particle sizes of 1.0, 0.3, and $0.05 \mu\text{m}$ in a sequential manner on a polishing pad. After polishing, the electrode was sonicated in deionized water for 1 min each to remove residual alumina particles and surface contaminants, and then was thoroughly rinsed with deionized water and ethanol. Prior to each measurement, the bare GCE was electrochemically cleaned by performing 20 consecutive CV cycles in 0.1 M KCl solution over the potential range from -1.0 to +1.0 V at a scan rate of 100 mV s^{-1} .

Anodic activation was carried out by chronoamperometry (CA) in a 0.1 M BPB solution, pH 9.0, by applying a constant potential of +2.0 V for 60 s. This treatment resulted in increased surface roughness and the formation of oxygen-containing functional groups, thereby enhancing the electrochemical activity of the electrode.

For the preparation of the Gr-Chit/GCE, $5 \mu\text{L}$ of the Gr-Chit dispersion was dropped-cast onto the surface of the pretreated GCE and allowed to dry at room temperature overnight. The modified electrode was then gently rinsed with deionized water prior to use to remove loosely bound material.

Electrochemical Measurements. All measurements were performed at room temperature using a three-electrode electrochemical cell, consisting of a working electrode (CV-activated, anodically activated, or Gr-Chit-modified), an Ag/AgCl (3 M KCl) electrode as the reference electrode, and a platinum wire as the counter electrode. CV and DPV for IBF detection were carried out in 0.1 M PBS (pH 7.5). Electrochemical characterization using the $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}/4^-$ redox probe was performed in 0.1 M NaCl as the supporting electrolyte.

CV was conducted to investigate the electrochemical behaviour of IBF and for electrode characterization.

DPV was employed for quantitative analysis due to its higher sensitivity and improved resolution. The DPV parameters were optimized to obtain well-defined oxidation peaks and reliable calibration curves. Each measurement was performed at least in triplicate.

Results and Discussion

Electrode characterization. To investigate the electrochemical behavior of the bare and modified electrodes, CV was performed using 1 mM $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}/4^-$ redox probe in 0.1 M NaCl.

As shown in Fig. 1a,b, scan-rate-dependent CVs (10–200 mV s⁻¹) were recorded at the bare GCE and Gr-Chit/GCE, respectively, over the potential range -0.15 to +1.0 V vs. Ag/AgCl.

The CVs exhibit a quasi-reversible electrochemical redox process, which is diffusion-controlled, where the peak current increases linearly with the square root of scan rate, in agreement with the Randles–Ševčík relationship (insets of Figs. 1a,b).

A direct comparison of the CV responses at 50 mV s⁻¹ is presented in Fig. 1c, clearly showing a significant enhancement of both anodic and cathodic peak currents at the Gr-Chit/GCE relative to the bare electrode. This confirms improved electron-transfer kinetics and increased electroactive surface area due to the Gr-Chit modification.

The electroactive surface area (ECSA) was estimated using the Randles–Ševčík equation (Eq. 1) for a reversible diffusion-controlled process at 25 °C [4], based on the slope of the linear dependence of I_p on $v^{1/2}$. The ECSA values were determined to be 0.048 cm² for the bare GCE and 0.205 cm² for the Gr-Chit/GCE. This corresponds to roughness factors of 0.68 and 2.89, respectively, indicating a 4.2-fold increase in electroactive surface area after modification.

$$I_p = 2.69 \times 10^5 n^{3/2} AD^{1/2} C v^{1/2} \quad (1),$$

where I_p is the peak current (A), n is the number of electrons transferred ($n = 1$ for [Fe(CN)₆]^{3-/4-}), A is the electroactive surface area (cm²), D is the diffusion coefficient (7.6 × 10⁻⁶ cm² s⁻¹ [7]), C is the bulk concentration (mol cm⁻³), and v is the scan rate (V s⁻¹).

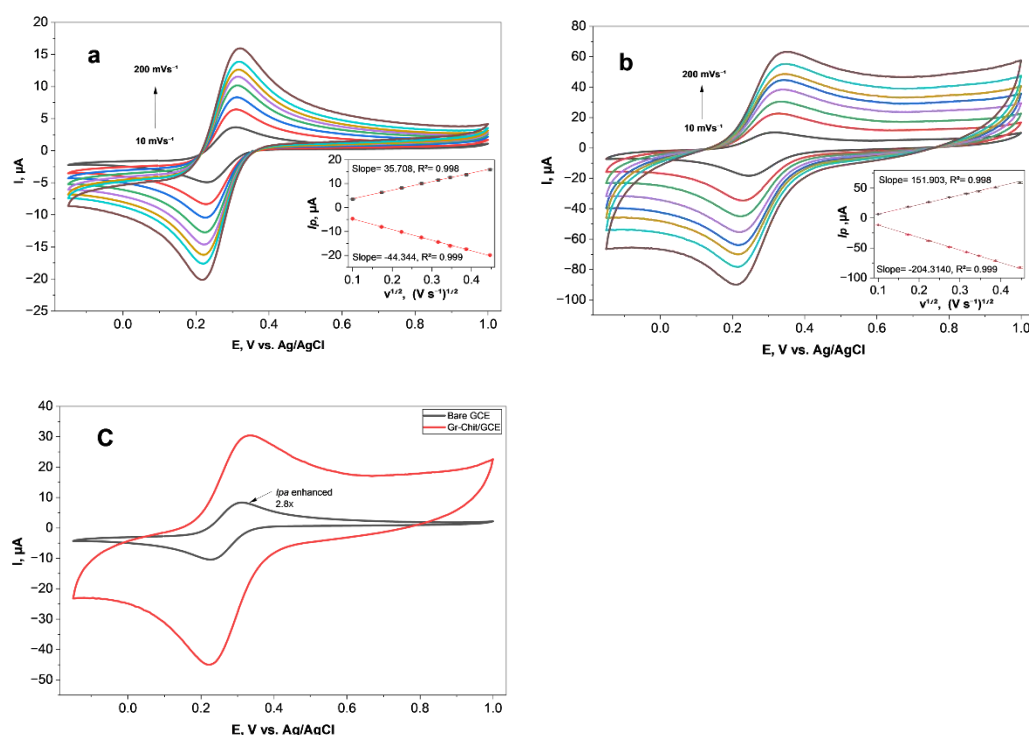


Fig. 1. CV responses of 1 mM [Fe(CN)₆]^{3-/4-} in 0.1 M NaCl recorded over a scan rate range of 10–200 mV s⁻¹ at (a) bare GCE and (b) Gr-Chit/GCE, demonstrating diffusion-controlled conditions. (c) Direct comparison of CV responses at 50 mV s⁻¹ for GCE and Gr-Chit/GCE.

Following the electrochemical characterization, the analytical performance of the electrodes toward IBF detection was evaluated. As shown in Fig. 2a-c, DPV responses were recorded at

the CV, anodically activated, or Gr-Chit modified GCE over IBF concentration ranges of 952-2609 μM , 247-1395 μM , and 100-488 μM , respectively. A well-defined oxidation peak corresponding to IBF was observed for all electrodes in the potential range of approximately +1.16 to +1.28 V vs. Ag/AgCl, with the Gr-Chit/GCE exhibiting a slight shift toward lower potentials, indicating improved electron-transfer properties, with peak currents rising progressively with increasing concentration. The response current followed the order: Gr-Chit/GCE > anodically activated GCE > CV activated GCE, confirming the enhanced electrochemical performance of the modified electrodes.

At higher IBF concentrations, the CV-activated GCE exhibited noticeable signal deterioration, which is consistent with typical surface fouling behaviour of carbon electrodes, arising from the adsorption of oxidation products and subsequent blockage of active sites. In the case of the anodically activated GCE, this effect was further exacerbated, likely due to the increased density of oxygen-containing functional groups on the electrode surface, which enhances the adsorption of IBF and its oxidation intermediates, leading to faster surface passivation.

In contrast, the Gr-Chit/GCE demonstrated improved resistance to fouling, maintaining stable and well-defined signals across the investigated concentration range. This behaviour can be attributed to the synergistic effect of Gr and Chit, which promotes efficient electron transfer while limiting the accumulation of passivating species at the electrode surface.

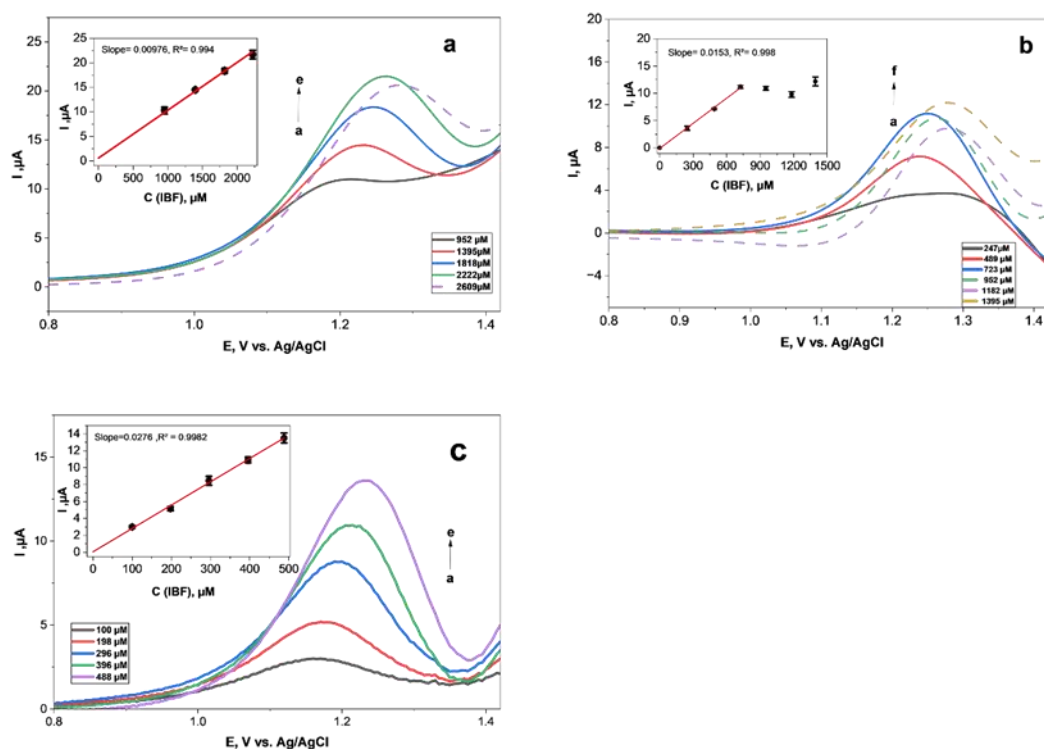


Fig. 2. DPVs of IBF recorded at (a) CV activated GCE in 0.1 M PBS (pH 7.5), (b) anodically activated GCE in 0.1 M BPB (pH 9.0), and (c) Gr-Chit/GCE in 0.1 M PBS (pH 7.5), after baseline subtraction. Insets show the corresponding calibration curves.

Calibration plots constructed from DPV peak currents exhibited good linearity in the range of 100–488 μM , with $R^2 = 0.9982$, enabling quantitative determination of IBF. The corresponding analytical parameters are summarized in Table 1. A significant performance improvement was observed upon electrode modification, with the LOD decreasing from 186.83 μM for the CV-activated GCE to 39.43 μM for the anodically activated GCE, and further to 18.48 μM for the Gr-Chit/GCE. This enhancement reflects the combined effect of increased electroactive surface area, improved electron-transfer kinetics, and reduced surface passivation.

Table 1. Analytical performance parameters for IBF detection at CV, anodically activated, and Gr-Chit modified GCE, including LOD, linear range, and sensitivity.

| Electrode | Linear range (μM) | Sensitivity ($\mu\text{A } \mu\text{M}^{-1}$) | LOD (μM) |
|--------------------------|--------------------------------|---|-----------------------|
| Bare GCE | 952-2609 | 0.00976 | 168.51 |
| Anodically Activated GCE | 247-723 | 0.01535 | 39.43 |
| Gr-Chit/GCE | 100-488 | 0.0276 | 18.48 |

The analytical performance of the proposed Gr-Chit/GCE (LOD = 18.48 μM) is comparable to previously reported IBF sensors, including a short-dimension multi-walled carbon nanotube-modified GCE (SD-MWCNTs/GCE, LOD = 1.9 μM) [8] and a disposable screen-printed graphite electrode (SPGE, LOD = 6.3 μM). [9], demonstrating competitive performance among carbon-based electrochemical sensing platforms.

Conclusions

1. Anodic activation of the GCE improves the electrochemical response toward IBF; however, it also promotes active site blockage at higher concentrations due to enhanced adsorption of oxidation products on oxygen-functionalized sites.
2. The Gr-Chit/GCE demonstrates markedly improved analytical performance, including higher sensitivity, lower detection limit, and greater signal stability and antifouling capability.
3. The developed sensing platform shows strong potential for practical electrochemical analysis of pharmaceutical compounds. Although the LOD is higher than that of some nanostructured sensors, the simplicity and low cost of the modification make it attractive for practical applications. Further validation in real samples is required to confirm its practical applicability.

References:

1. G.A. Ogunwole et al. *Heliyon*, **2024** Vol.10(11), p. e31880.
2. C. Laghlimi et al. *ADMET DMPK*, **2023** Vol. 11(2), p. 151–173.
3. L. L. Faulkner and A. J. Bard. *Electrochemical methods and applications*. Wiley & Sons, New York, 2001 p. 1–792.
4. E. Chiavazza et al. *Electrochim. Acta*, **2016** Vol. 192, p. 139–147.
5. L. Naidoo, G. E. Uwaya, and K. Bisetty. *Adv Materials Inter.*, **2025** Vol. 12(8), 2400780.
6. A. V. Bounegru and I. Bounegru. *Polymers*, **2023** Vol. 15(17), p. 3539.
7. E. Šrámková, T. Bystron, and K. Bouzek. *Electrochim. Acta*, **2021** Vol. 379, p. 138177.
8. R. H. O. Montes et al. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **2016** Vol.775, p. 342–349.
9. Amin et al. *Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management*, **2014** Vol.1–2, p. 8–13.

STUDY OF THE IMPACT OF THE CZOCHRALSKI METHOD PARAMETERS ON THE QUALITY OF LITHIUM FLUORIDE SINGLE CRYSTAL

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

¹ Department of Inorganic Chemistry, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

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

* migle.minalgaitė@chgf.stud.vu.lt

A single crystal features an ordered three-dimensional arrangement of atoms, ions or molecules repeating throughout its entire volume. Lithium fluoride (LiF), an inorganic compound that crystallises in the face-centred cubic Fm-3m space group [1], exhibits broad transmission (0.120–7 μm) [2] and forms colour centres under radiation [3]. This makes LiF single crystals essential for laser systems, optoelectronics, X-ray monochromators and spectroscopic equipment [4].

The Czochralski method revolutionised crystal growth by enabling the production of high-quality single crystals [5]. In this technique, the precursor is melted in a crucible, and a seed is immersed in the molten material, slowly rotated, and pulled upward. The melt solidifies at the liquid-solid interface, forming the growing crystal boule as it is withdrawn from the crucible. Successful growth requires precise control of temperature distribution, cooling rate, pulling speed, rotation speed, and impurity concentration in the melt. Optimisation of these parameters is essential, as they directly influence defect formation, internal stress, and final crystal quality.

The aim of this work was to investigate how sample preparation and Czochralski method parameters (temperature, pulling speed, and crucible diameter) influence single crystal quality (boule shape, size, and UV-IR transmission). LiF crystals were grown from the melt in a glassy carbon crucible under a nitrogen (N₂) atmosphere by adjusting the latter parameters. The grown crystals were analysed using X-ray diffraction, X-ray Laue diffraction, Raman spectroscopy, VUV/UV, and FT-IR spectroscopy. The results showed that crystal boule size was most influenced by temperature and pulling speed, while crucible diameter affected its shape. UV-IR transmission was mostly affected by precursor purity, sample preparation (cutting/polishing), and storage conditions.

Acknowledgements. Authors would like to express their gratitude to LIGHT CONVERSION and OPTOGAMA companies for their help with samples processing.

References:

1. Mei, L., Cai, X., Jiang, D., Chen, J., Guo, W., & Xiong, W. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 2013 50(4), p. 419–42.
2. Vincenti, M. A. *Nuovo Cimento C Geophysics Space Physics C*, 2017 40(2), p. 93.
3. Coronato L., et.al. *Opt. Express*, 2004 12, p. 288-293
4. Baldacchini, G. *Journal of Luminescence*, 2002 100(1–4), p. 333–343.
5. Brandle, C. *Journal of Crystal Growth*, 2004 264(4), p. 593–604.

SYNTHESIS AND PHOTOCHROMIC PROPERTIES OF BARIUM CHLORAPATITE CERAMICS

Simona Bendziute^{1*}, Jonas Stadulis¹, Guna Kriekė^{1,2}, Guna Doke^{1,2}, Andris Antuzevics², Aleksej Zarkov¹

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

² Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia

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

Photochromic materials are substances that undergo a reversible color change upon exposure to light, typically within the ultraviolet (UV) or visible spectrum. These materials are advantageous for the enhancement of information storage, anticounterfeiting and dosimetry [1]. Recently, a lot of attention was drawn by apatite-type photochromic compounds since they display a high defect tolerance, which makes them a perfect tool for constructing various color centers as well as efficiently performing coloration-decoloration reversibility [2]. One such particular compound is barium chlorapatite ($\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$), which, when exposed to X-ray or UV radiation, exhibits a color change that persists for a certain period.

This study focuses on the investigation of undoped $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ and its photochromic characteristics. For this purpose, $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ powders were synthesized by the molten salt method. Afterward, the powders were pressed into pellets, and the final ceramics were prepared under varying conditions, which include different temperatures and sintering atmospheres. The phase purity and crystal structure of the synthesis products were analyzed using X-ray diffraction (XRD) analysis. Morphological properties were studied using scanning electron microscopy (SEM). Effectiveness of photochromic phenomenon and color reversibility was proved by measuring reflectance spectra before and after irradiation as well as after bleaching.

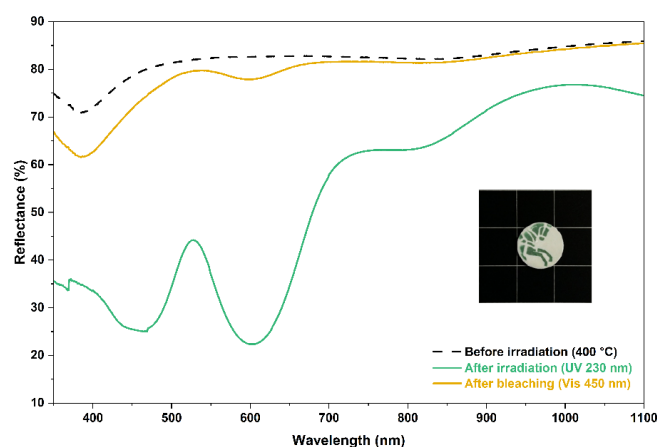


Fig. 1. Reflectance spectra of $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ before irradiation, after UV radiation, and after bleaching.

Acknowledgements. This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement no. S-MIP-25-26.

References:

1. G. Kriekė, A. Antuzevics, G. Doke, A. Kareiva, A. Zarkov. *Applied Optical Materials*, **2025** 3(9), p. 2173-2183.
2. W. Hu, et al. *Inorganic Chemistry*, **2024** 63(38), p. 17740-17746.

SPACE-TIME OF NON-EQUILIBRIUM SYSTEMS: CHEMICAL POTENTIAL DURING PHASE TRANSITIONS α -Fe, γ -Fe, δ -Fe AND LIQUID

Virgis Baltakys^{*}, Aldas Marcinkus, Matas Sajatauskas, Titas Pijoraitis, Audrius Jutas

Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania,

^{*} *virgis.baltakys@ktu.edu*

Here, we discuss Fermi quantities and chemical potential of Iron (Fe^{+2}), which arise from the change of angular momentum and the occupied states number N of a microstructural system. This work presents that even in the thermodynamically stable macro state, electrons act as electrostatic oscillators of the wave function. The theory Space-time of non-equilibrium system has been created to study the regularities of the operation of microsystems (mechanical, thermal, chemical, electrical, magnetic) in certain residence spaces and time intervals of particle systems, which are responsible for the change in chemical potential μ of Iron during its phase transition from α -Fe to the liquid.

The aim of this study is to define quantitatively the conditions and assumptions used in developing numerical calculations of chemical potential at the appropriate length and time scales. In the study, chemical potential emerges as a key parameter in describing the behavior of particles and their occupied states in a system.

The function that relates the relationship between distance and time changes begins with the creation of a physical model of the wave function that allows one to approach or move away from the Fermi quantities, which helps to connect free (valence) electrons in physical chemistry problems. A non-equilibrium system is considered a system that can be forced to change over time when it constantly or periodically experiences changes in its structure and in the energy or heat flows to and from other systems. Equilibrium states, evaluated at the macro level, may not reflect the high sensitivity of microsystems to external conditions that can dictate changes in those microstates.

Based on this paradigmatic provision, we argue that in certain microsystems, if the Fermi level is chosen as the equilibrium criterion, thermodynamic equilibrium may be unstable even in the presence of small external perturbations. The thermodynamic definition and analysis of non-equilibrium systems require more rigorous paradigms and experimentally reliable postulates. This requirement is one of the essential ones that allows for a stricter description of the essence of a non-equilibrium thermodynamic system in crystalline matters. The set of phenomena observed over a given measured time interval is a complex problem, the epicenter of which is some perturbation of the system, which allows the law of a given duration to operate even in the presence of non-zero macroscopic fluxes entering and leaving the system which are detected on a larger scale and can also be measured as such.

THE INFLUENCE OF CO-MILLING AAC WASTE WITH QUARTZ SAND: EFFECTS ON MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES

Vytautas Taurele*, Raimundas Siauciunas

Department of Silicate Technology, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

* vytautas.taurele@ktu.edu

The integration of Autoclaved Aerated Concrete (AAC) waste back into the primary production cycle is a global priority for sustainable construction [1]. The objective of this research is to evaluate the co-milling process at UAB Bauroc, where internally generated AAC production waste is mixed with raw quartz sand to produce a stabilized slurry, testing waste concentrations from 0% up to 14% of the total solid volume.

Consistent with recent studies, two primary technical challenges were identified [2]. Physically, the high porosity of recycled AAC causes rapid water absorption, increasing slurry viscosity. Chemically, the recycled material acts as a supplementary cementitious material, introducing variable amounts of active calcium oxide (CaO) and altering the mixture's stoichiometric balance [3]. To compensate for this, binder dosages (milled lime and ordinary Portland cement) were empirically adjusted for each substitution level through systematic industrial trials. This approach successfully maintained a constant target of 24% total CaO based on the solid mass.

The physical and mechanical properties of the specimens were evaluated according to EN 772-13 and EN 772-1 standards. Industrial testing results demonstrated that at the maximum 14% substitution rate, the sand slurry density was successfully stabilized at 1680 kg/m³. Furthermore, quantitative X-ray diffraction (QXRD, “Rigaku MiniFlex600-C”) analysis confirmed that the recycled particles promoted secondary crystallization, increasing the crystalline 1.13 nm tobermorite content significantly from 28% (control) to 38%, aligning with scientific literature [1]. Crucially, the final product maintained a dry density of 400 kg/m³ and achieved an average compressive strength of 2.4 MPa, successfully exceeding the 2.2 MPa technical specification declared for the Bauroc Roclite product line and EU standards.

Ultimately, this research bridges the gap between theoretical circular economy models and practical industrial application, while providing UAB Bauroc with a validated, scalable pathway to significantly minimize its environmental footprint and raw material costs.

References:

1. Rafiza, A. R., et al. The Physical and Mechanical Properties of Autoclaved Aerated Concrete (AAC) with Recycled AAC as a Partial Replacement for Sand. *Buildings*, 12(1), **2022**, 60.
2. Wang, S., et al. A scientific review of recycling practices and challenges for autoclaved aerated concrete in sustainable construction. *Buildings*, 15(14), **2025**, 2453.
3. Yang, X., Zhu, R., & Xu, B. Rehydration activity of High-Temperature calcined recycled sand autoclaved aerated concrete. *Processes*, 11(2), **2023**, 422.

STRUCTURAL CHANGES OF YAG:PR INDUCED BY TITANIUM DOPING

Tautvydas Pudžmys*, Greta Inkrataitė

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

* tautvydas.pudzmys@chgf.stud.vu.lt

Yttrium aluminium garnet (YAG) is an important oxide material that has become a standard host lattice for rare-earth ions because of its exceptional structural stability and favourable optical properties [1, 2]. YAG:Pr has been investigated as a potential scintillator, and for its uses in both lighting and laser technologies due to its luminescence in UV and visible region [3-5]. Additional dopants, particularly transition metals, modify both structural and functional properties of YAG doped with rare-earth ions [6, 7]. Considering that titanium can easily substitute for aluminium in various oxide structures due to its comparable ionic radius, it has been demonstrated that it can be incorporated into YAG [8]. Titanium can also exist in multiple oxidation states, primarily Ti^{+3} and Ti^{+4} , and the coexistence of these oxidation states requires charge-compensation mechanisms within the lattice, which can affect the structural ordering of the material. These effects are expected to become particularly noticeable after thermal treatment, as calcination during YAG synthesis promotes the crystallisation of the garnet phase and often leads to a reduction in defect concentrations [9]. Moreover, titanium compounds have demonstrated significant antibacterial activity due to their photocatalytic ability to generate reactive oxygen species upon exposure to UV radiation [10]. And as YAG:Pr does emit UV radiation after excitation, a YAG:(Pr,Ti) material could potentially combine the two antibacterial properties into something even more efficient.

In this study, yttrium aluminium garnet materials, containing varying concentrations of Pr^{3+} and Ti^{4+} ions, were synthesised using an aqueous sol-gel technique and the effects of titanium incorporation in YAG:Pr have been examined. The crystalline phases of the obtained samples were analysed by X-ray diffraction, revealing the formation of an additional phase ($Y_2Ti_2O_7$) when the titanium concentration reached 10 %. The morphology of the synthesised powders was evaluated using scanning electron microscopy, which showed that the particle morphology changed depending on the amount of titanium introduced into the material. Furthermore, the photoluminescence properties of the samples were examined, focusing on how titanium incorporation affects the absorption characteristics and emission peaks of the YAG:Pr materials.

References:

1. S. Murai, K. Fujita, K. Iwata, K. Tanaka. *Optical materials*, **2010** 33(2), p. 123-127.
2. L. Pavasarytė. *Investigation of luminescent and structural properties of lanthanide aluminium garnets synthesized by sol-gel method*, **2018**.
3. K. Sreebunpeng, W. Chewpraditkul, V. Babin, M. Nikl, K. Nejezchleb. *Radiation measurements*, **2013** 56, p. 94-97.
4. H. Lu et al. *Optical materials*, **2021** 121.
5. S. Fujita, H. Tanaka, F. Kannari. *Applied Optics*, **2020** 59, p. 5124-5130.
6. X. Wu, Z. Zhang, F. Meng, X. Liu, X. Niu, J. Meng. *Thin Solid Films*, **2016** 603, p. 353-358.
7. H. Yagi, T. Yanagitani, H. Yoshida, M. Nakatsuka, K. Ueda. *Optics & Laser Technology*, **2007** 39(6), p. 1295-1300.
8. R. D. Shannon. *Acta Crystallographica Section A*, **1976** 32(5), p. 751-767.
9. T. Huang et al. *Journal of Alloys and Compounds*, **2009** 478(1).
10. V. Lazić, V. Nikšić, J. M. Nedeljković. *International Journal of Molecular Sciences*, **2025** 26(21).

CONSTRUCTION AND ANALYSIS OF MACHINE LEARNING FORCE FIELDS FOR AQUEOUS PHOSPHORIC ACID SYSTEMS

Gabrielius Mockus^{*}, Linas Vilčiauskas

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

^{*} *gabrielius.mockus@ftmc.lt*

Density Functional Theory (DFT) and other established methods are of great importance in computational chemistry (CC), as prominent CC software like the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) is built for it. However, even for relatively tiny systems, quantum-mechanical methods display exponential scaling and can quickly exhaust available computational resources, thus hindering research speed. Recent advances in machine learning (ML) methods, such as Machine Learning Force Fields (MLFFs), have the potential to close this gap.[1]

For the purposes of our research, the most relevant approaches are Empirical Force Fields (EFFs) and DFT. EFFs are computationally fast, although severely limited by the lack of accuracy when compared to DFT methods. DFT methods generally give more accurate results (particularly for reactive systems), but are slow and computationally expensive. MLFFs can allow us to close the gap between the two methods by offering lower-cost (computationally faster) simulations with similar accuracy to DFT methods. The aim of our research was to construct an MLFF for aqueous orthophosphoric acid systems from scratch. The reasoning for this is that orthophosphoric acid is one of the best-known hydrogen ion conductors. Analyzing the mechanism behind proton conduction in $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_3\text{PO}_4$ systems using computational methods could lead to new innovations in phosphoric acid fuel cells, as well as offer new insights with regards to the role of proton conduction in organisms.[2]

As such, we have successfully carried out our own ab initio computations and trained an MLFF. The results are analyzed in terms of structural (RDF) and dynamical properties (diffusion coefficients). After interpreting the results, it is reasonable to suggest that MLFFs are a viable option for molecular dynamics (MD) simulations. MLFFs scale linearly and are computationally cheaper than DFT methods, while maintaining comparable accuracy (i. e., being reactive).

References:

1. R. Jinnouchi. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2022** 24(25), p. 15522-15531.
2. L. Vilčiauskas, M. Tuckerman, G. Bester, S. J. Paddison, K.-D. Kreuer. *Nature Chemistry*, **2012** 4(6), p. 461–466

THE INFLUENCE OF SPENT COFFEE GROUND BIOCHAR ON THE PROPERTIES OF BUILDING GYPSUM COMPOSITES

Vydmantė Astrauskaitė*, Nora Kybartienė

Faculty of Chemical Technology, Kaunas University of Technology, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, Lithuania

* vydmante.astrauskaite@ktu.edu

The construction materials industry is increasingly aiming to reduce environmental impact, improve resource efficiency, and implement circular economy principles. Large quantities of spent coffee grounds are generated daily and are typically treated as waste [1]. Through thermal treatment processes these residues can be converted into valuable products, including biofuels, while coffee ground biochar is obtained as a solid by-product [2]. Due to its abundance and low cost, the reuse of this by-product in construction materials represents a promising approach for sustainable material development. While numerous studies have investigated the use of coffee-derived ash or biochar in cement-based materials [3-5], there is a lack of research on its application in gypsum binders, making this topic particularly relevant and scientifically significant. The aim of this study was to evaluate the influence of coffee ground biochar on the physical and mechanical properties of building gypsum composites.

β -hemihydrate gypsum and coffee ground biochar were used as the main materials. Spent coffee grounds were collected from a café, dried at 80°C temperature. Biochar was obtained when spent coffee grounds were thermally treated under controlled conditions. It was added into gypsum mixtures at 5%, 10%, and 15% by weight. The mixtures were homogenized, then cast into cubic specimens (20×20×20 mm) and cured under ambient laboratory conditions.

The composition of materials and samples was analyzed using X-ray diffraction (XRD), X-ray fluorescence (XRF), Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR), simultaneous thermal analysis (STA), water-to-gypsum ratio (W/G), setting time, density and compressive strength of gypsum composites after 2 h, 1, 3, 7, and 28 days were determined.

The results showed that increasing biochar content affected both fresh and hardened properties. W/G ratio increased by approximately 5–15%, indicating higher water demand, initial and final setting times were increased by about 10–25%, reflecting slower hydration and crystal growth. Density decreased by approximately 3–10%, confirming the formation of a more porous structure. Compressive strength increased with increasing curing time but decreased by approximately 10–40% with increasing biochar content, with the largest reduction observed at the highest dosage. Despite these changes, all samples satisfied the requirements of EN 13279-2.

References:

1. M. T. Pigozzi, F. R. Passos, F. Q. Mendes. *Journal of Food Quality*, 2018, Vol. 2018(1), p. 5908463.
2. R. Ktori, P. Kamaterou, A. Zabaniotou. *Materials Today: Proceedings*, 2018, Vol. 5(14), p. 27582–27588.
3. A. Gedefaw, B. Worku Yifru, S. A. Endale, B. T. Habtegebreal, M. D. Yehualaw. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2022, Vol. 2022(1), p. 4175460.
4. S. Na, S. Lee, S. Youn. *Symmetry*, 2021, Vol. 13(4), p. 619.
5. R. Roychand, S. Kilmartin-Lynch, M. Saberian, J. Li, G. Zhang, C. Q. Li. *Journal of Cleaner Production*, 2023, Vol. 419, p. 138205

BIOKURO PELENŲ NAUDOJIMO GALIMYBĖS MIŠKININKYSTĖJE IR ŽEMĖS ŪKYJE

Viltė Razmanavičiūtė*, Rasa Šlinkšienė

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

* vilte.razmanaviciute@ktu.edu

Pelenų cheminės sudėties analizė bei jų panaudojimo galimybės miškininkystėje ir žemės ūkyje jau kuris laikas yra aktuali tema, dėl augančios biokuro paklausos ir didėjančių pelenų kiekių. Pelenai susidaro deginimo metu, kaip šalutinis produktas, todėl yra laikomi atlieka. Įvertinus tai, kad kaip biokuras naudojama įvairios prigimties mediena, daug dėmesio skiriama jų cheminės sudėties analizei ir panaudojimo galimybėms, ypač dirvožemio gerinimui ir tvariai žemdirbystei. Pelenų tvarkymas ir antrinis panaudojimas svarbi aplinkosaugos problema, nes jų šalinimas sąvartynuose nėra tvarus sprendimas [1]. Biomasės pelenai pasižymi didele augalams svarbių maisto medžiagų koncentracija. Juose randama kalcio, kalio, magnio ir fosforo, kurie yra svarbūs dirvožemio derlingumui ir augalų mitybai. Dėl šios priežasties pelenai gali būti naudojami kaip alternatyvios trąšos arba dirvožemio rūgštingumo mažinimo priemonė [2].

Šiame darbe buvo analizuojami aštuoni skirtingi biomasės pelenų mėginiai, gauti iš įvairių Lietuvos kuro deginimo įmonių, kurių savybės ir cheminė sudėtis pateikta 1 lentelėje.

1 lentelė. Biokuro pelenų cheminė sudėtis ir fizikinės savybės

| Tyrimų parametras | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|
| pH | 12,8 | 12,7 | 12,8 | 12,8 | 12,5 | 12,5 | 12,5 | 12,6 |
| Sausa medžiaga % | 99,95 | 99,97 | 99,94 | 99,92 | 99,86 | 58,01 | 98,72 | 99,97 |
| Drėgmė % | 0,05 | 0,03 | 0,06 | 0,08 | 0,14 | 41,99 | 1,28 | 0,03 |
| Organinė medžiaga % | 0,24 | 0,86 | 0,26 | 0,35 | 0,51 | 9,83 | 7,18 | 0,09 |
| Sausoje medžiagoje | | | | | | | | |
| Organinė anglis % | 0,52 | 0,92 | 0,48 | 0,63 | 0,39 | 5,88 | 3,47 | 0,43 |
| Fosforas (P), % | 1,26 | 1,29 | 1,11 | 1,49 | 1,66 | 0,77 | 0,77 | 0,89 |
| Kalis (K), % | 13,32 | 7,63 | 5,83 | 8,25 | 8,99 | 2,56 | 2,43 | 3,04 |
| Kalcis (Ca), % | 17,89 | 16,78 | 18,35 | 18,70 | 22,33 | 9,63 | 8,34 | 13,98 |
| Magnis (Mg), % | 1,92 | 1,58 | 1,75 | 1,98 | 2,23 | 0,0007 | 7833 | 11750 |

Kartu su naudingais elementais pelenai dažnai turi ir nepageidaujamų priemaišų, tokių kaip sunkieji metalai, kurių kiekiai priklauso nuo biomasės kilmės ir deginimo sąlygų. Todėl labai svarbu yra išsamiai išanalizuoti ne tik fizikines biomasės pelenų savybes, bet ir jų cheminę sudėtį. Gauti rezultatai leidžia įvertinti jų panaudojimo galimybes, galimą naudą bei riziką žemės ūkyje ir miškininkystėje.

Literatūros sąrašas:

1. G. Zajac *et al.* *Energies*, 11, **2018**, p. 2885.
2. R. Shi *et al.* *Journal of Environmental Sciences*, 55, **2017**, p. 294–302.

SAMARIO IR GADOLINIO OKSIDAIS MODIFIKUOTŲ CERIO OKSIDO NANOMILTELIŲ, SUSINTETINTŲ IŠDEGINIMO IR NUSODINIMO IŠ TIRPALŲ METODAIS, SAVYBIŲ ANALIZĖ

Augustinas Zinkus^{1,2*}, Mantas Sriubas^{1,2}, Brigita Abakevičienė^{1,2}

¹ Fizikos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

² Medžiagų mokslo institutas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

* augustinas.zinkus@ktu.lt

Ceris (Ce) yra retasis žemės elementas, galintis egzistuoti tiek +3, tiek +4 oksidacijos būsenose. Dėl šios savybės cerio oksido (CeO₂) kristalinėje gardelėje susiformuoja deguonies jonų vakansijos, o tai nulemia geras medžiagos katalizines ir deguonies jonų laidumo savybes [1]. Ištirta, kad cerio oksidą papildomai legiruojant kitais retaisiais žemės elementais (pavyzdžiui, samariu ar gadoliniu), deguonies vakansijų kiekis stipriai išauga, o tai padidina ir deguonies jonų laidumą [2]. Dėl šios priežasties, cerio oksido pagrindu pagamintos keramikos gali būti pritaikomos kietojo oksido kuro elementuose (KOKE). Sm³⁺ ir Gd³⁺ priemaišų įterpimas į cerio oksido kristalinę gardelę, padeda plėsti kuro elementų taikymo sritis, nes sumažinama KOKE veikimo darbinė temperatūra, išlaikant aukštą efektyvumą [3].

Samariu ir gadoliniu legiruoto cerio oksido (SGDC) savybėms didelę įtaką daro tinkamas sintezės metodo pasirinkimas. Sintezės būdas nulemia galutinės keramikos stechiometrijos tikslumą, terminį stabilumą, mikrostruktūrinį vienalytiškumą [4]. Siekiant ištirti šiuos skirtumus, Ce_{0.825}Sm_{0.0875}Gd_{0.0875}O_{2-δ} nanomilteliai buvo susintetinti naudojant glicino nitrato išdeginimo (angl. *Combustion*) ir oksalato pirmtako nusodinimo iš tirpalų (angl. *Coprecipitation*) sintezės metodus.

Gautų SGDC nanomiltelių savybės buvo analizuojamos rentgeno spindulių difrakcija (XRD), skenuojančia ir peršviečiamąja elektroninėmis mikroskopijomis (SEM ir TEM) bei termine gravimetrine analize (TGA). Rezultatai atskleidė, kad sintezių metu vyksta skirtingi kristalų augimo ir formavimosi mechanizmai, todėl pagaminti nanomilteliai pasižymi nevienodomis savybėmis.

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (LMT) projekto Nr. S-MIP-24-8/2025 lėšomis.

Literatūros sąrašas:

1. C. Walkey, S. Das, S. Seal, J. Erlichman, K. Heckman, L. Ghibelli, E. Traversa, J. F. McGinnis, W. T. Self. Catalytic properties and biomedical applications of cerium oxide nanoparticles, **2015** (2), 1, p. 33-53.
2. S. Omar, E. D. Wachsman, J. C. Nino. A co-doping approach towards enhanced ionic conductivity in fluorite-based electrolytes, **2006** (177), 35, p. 3199-3203.
3. P. Arunkumar, M. Meena, K. Suresh Babu. A review on cerium oxide-based electrolytes for ITSOFC, **2012** (1), 5, p. 288-305.
4. A. Dhall, W. Self. Cerium oxide nanoparticles: a brief review of their synthesis methods and biomedical applications, **2018** (7), 8, p. 97.

$Gd_3Ga_{5-2x}Mg_xZr_xO_{12}:Cr^{3+}$ ir $Gd_3Ga_{5-2x}Zn_xZr_xO_{12}:Cr^{3+}$ PAKEISTŲ GRANATŲ SINTEZĖ IR LIUMINESCENCINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS

Austėja Šernaitė^{1,2*}, Monika Skruodienė^{2,3}, Meldra Kemere³, Ramūnas Skaudžius¹

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

² Cheminės inžinerijos ir technologijų skyrius, Fizinių ir technologijos mokslų centras, Vilnius, Lietuva

³ Kieto kūno fizikos institutas, Latvijos universitetas, Rīga, Latvija

* *austeja.sernaite@chgf.stud.vu.lt*

Pastaruoju metu, šviesos diodai (LED), skleidžiantys artimą infraraudonajai spinduliuotei (NIR) šviesą, įgijo didelį mokslininkų susidomėjimą. Nustatyta, jog ši spinduliuotė gali būti pasitelkta augalų augimo skatinimui, medicinoje, maisto kokybės nustatymui bei gali rasti pritaikymą naktinio matymo technologijose, tačiau pritaikymą pramonėje riboja žemas medžiagų efektyvumas ir ribotas terminis stabilumas [1-5].

Gadolinio galio granatas ($Gd_3Ga_5O_{12}$, GGG) yra vienas iš populiariausių sintetinių granatų. Šis junginys pasižymi magneto optinėmis savybėmis, kietumu, cheminiu ir terminiu stabilumu [6]. Taip pat, GGG kristalinė gardelė tinkama legiravimui. Dėl minėtų priežasčių GGG randa pritaikymą tiek pramonėje, tiek mokslinėje srityje. GGG legiravus Cr^{3+} jonais, junginys įgyja liuminescencines NIR spinduliuotės savybes, todėl ši medžiaga galėtų būti panaudojama NIR LED technologijose.

Cr^{3+} jono liuminescencija priklauso nuo matricos kristalinio lauko stiprumo, kuris gali būti keičiamas, keičiant matricos elementinę sudėtį. Atliktų tyrimų tikslas buvo ištirti, kokią įtaką liuminescencijai turi Ga^{3+} jonų pakeitimas Mg^{2+} ir Zr^{4+} bei Zn^{2+} ir Zr^{4+} jonais, GGG, legiruotame Cr^{3+} jonais. Tirti granatai buvo sintetinti zolių – gelių ir lydytų druskų metodų kombinacija. Medžiagų fazinis grynumas ištirtas pasitelkiant Rentgeno spindulių difrakciją (XRD), fotoluminescencija analizuota lyginant susintetintų granatų emisijos ir sužadavimo spektrus, medžiagų morfologija apibūdinta pasitelkus skenuojančią elektronų mikroskopiją (SEM).

Literatūros sąrašas:

1. Y. Su et al., *Ceramics International*, 2021 (47), 16, p. 23558–23563.
2. A. Dalle Zotte et al., *Food Research International*, 2014 (60), p. 180–188.
3. X. Zou et al., *Chemical Engineering Journal*, 2022 (428), p. 132003.
4. A. Guelpa et al., *Food Control*, 2017 (73), p. 1388–1396.
5. Y. Wang et al., *Advanced Optical Materials*, 2022 (10), 11, p. 2200415.
6. E. F. Baxter et al., *Elements*, 2013 (9), 6, p. 415–419.

MAISTO PRAMONĖS ATLIEKOS GRANULIUOTOMS TRĄŠOMS GAUTI

Dominykas Sapeliauskas, Kristina Jančaitienė

Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas,
Kaunas, Lietuva

* dominykas.sapeliauskas@ktu.lt

Kava, vienas populiariausių gėrimų visame pasaulyje, gamybos metu sukuria daug atliekų, įskaitant kavos lukštus. Kasmet visame pasaulyje susidaro apie 10 milijonų tonų kavos lukštų atliekų, kurios yra kavos pramonės šalutinis produktas. Kavos lukštų atliekų panaudojimas žemės ūkyje didina dirvožemio derlingumą ir skatina tvarią ūkininkavimo praktiką. Nepaisant savo potencialo, kavos lukštai dažnai nepakankamai įvertinami. Dėl savo organinės prigimties jie idealiai tinka natūralioms trąšoms ir kompostui, prisidedant prie dirvožemio praturtinimo ir augalų augimo [1]. Grikių lukštų pelenai yra maistinių medžiagų turtingas, tvarus grikių perdirbimo šalutinis produktas, kuriame gausu kalio, fosforo, kalcio ir magnio, todėl tai puikus organinių trąšų komponentas. Jie dažnai granuliuojami su neapdorotais lukštais ir riškiais, kad sumažėtų dulkių kiekis ir būtų lengviau juos tvarkyti [2].

Šiame tyrime buvo naudotos organinės žaliavos: kavos pupų lukštai, grikių lukštų pelenai ir molis. Nustatant augalų maisto medžiagas buvo naudotas ekstrahavimo metodas. Buvo nustatytos augalams prieinamų makroelementų koncentracijos – azoto (N), fosforo (P₂O₅) ir kalio (K₂O). Taip pat naudojant būgninį granuliatorių buvo atliktas granuliavimas, siekiant gauti tinkamos prekinės frakcijos granules. Granuliavimui atlikti buvo naudotas grikių lukštų pelenų, kavos pupų lukštų ir molio mišinys.



1 pav. Granulės gautos naudojant grikių lukštų pelenis (85%), kavos pupų lukštus (10%) ir molį (5%)

Atlikus granuliavimą buvo gautos vidutinės kokybės granulės (1 pav.), kurių stipris atitinkamai lygus 20 – 40 N/gran. Taip pat buvo nustatytos gautų granulių savybės, tokios kaip: pH, piltinis tankis, drėgmė granulėse ir kt.

Literatūros sąrašas:

1. K. Tamilselvan, S. Sundarajan, S. Ramakrishna, A.A. Amirul, S. Vigneswari. *Food and Bioproducts Processing*, **2024** 145, p. 187-202.
2. O. Pocienė, R. Šlinkšienė. Studies on Possibilities of Processing Buckwheat Husks and Ash in the Production of Environmentally Friendly Fertilizers. Kauno technologijos universitetas. **2022**.

PLONŲ INDŽIO SULFIDO SLUOKSNIŲ NUSODINIMAS ANT POLIAMIDO 6 PAGRINDO IR UV TYRIMAI

Emą Juočinskýtė*, Skirma Źalenkienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

* ema.juocinskyte@ktu.edu

Indžio sulfidas (In_2S_3) yra viena iš perspektyvių medžiagų UV šviesos fotodetektoriams dėl savo plataus draustinės energijos juostos pločio (band gap). Šio junginio draustinės energijos juostos plotis priklauso nuo vyraujančios kristalinės formos, sintezės metodo, bet dažniausiai varijuoja 2,1-2,3 eV intervale. Be to, In_2S_3 pasižymi dideliu cheminiu stabilumu, dideliu fotolaidumu ir netoksiškumu, todėl jo plonos plėvelės ir nanostruktūros plačiai taikomos kaip buferiniai sluoksniai kadmio neturinčiuose CIGS saulės elementuose, taip pat regimosios šviesos aktyviuose fotokatalizatoriuose, fotodetektoriuose ir dujų jutikliuose [1–2].

In_2S_3 dangos gali būti formuojamos įvairiais metodais, tokiais kaip cheminės vonelės metodas (CBD), ultragarso purškiamoji pirolizė, terminis garinimas vakuume, atominio sluoksnio nusodinimas (ALD) ir kt. Vis dėlto, CBD ir ultragarso purškiamosios pirolizės metodai yra labiausiai paplitę dėl savo paprastumo, mažos kainos ir galimybės išplėsti iki pramoninio lygio. CBD metodas leidžia kontroliuoti plėvelės storį, stochiometrinę sudėtį ir yra tinkamas didelio ploto dangoms formuoti esant žemai temperatūrai [2].

Šiame tyrime, In_2S_3 plonasluoksnės dangos sodinamos taikant cheminės vonelės nusodinimo (CBD) metodą ant lankstaus poliamido 6 (PA 6) pagrindo. Prieš nusodinimą PA6 bandiniai paruošiami verdant distiliuotame vandenyje 2 val. ir džiovinami eksikatoriuje virš silikagelio. Indžio dangų nusodinimas atliktas keičiant temperatūrą (70 °C ir 80 °C) bei indžio druskos ($\text{In}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) koncentraciją (0,025M – 0,1M). Sieros pirmtaku naudotas tioacetamidas ($\text{C}_2\text{H}_5\text{NS}$), kurio koncentracija atitinkamai indžio druskai parinkta 10 kartų didesnė. Bandiniai tirpale laikyti 10 – 70 min., tuomet nuplauti distiliuotu vandeniu ir palikti išdžiūti eksikatoriuje virš silikagelio.

Gautų indžio sulfido (In_2S_3) dangų ant poliamido 6 (PA 6) optinės absorbcijos tyrimai buvo atlikti 200–800 nm bangos ilgių diapazone, naudojant „Spectronic Genesys 8 UV–Vis“ spektrofotometrą. Remiantis gautais spektriniais duomenimis, buvo apskaičiuotas draustinės energijos juostos plotis ir palygintas su literatūroje pateiktomis vertėmis.

Literatūros sąrašas:

1. Alagarasan, D., Hegde, S. S., Kumar ir kt.. (2023). Influence of La³⁺ doping on nebulizer spray pyrolysed In_2S_3 thin film for enhanced photodetector performance. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 444.
2. Ledesma-Juárez, A., Quintero-Guerrero, J. F., & Fernández, A. M. (2025). Structural, Morphological and Optical Comparison of In-S Films Deposited by CBD and Ultrasonic Pyrolytic Spraying, as a Buffer Layer in CIGS So-Iar Cells. *Chalcogenide Letters*, 22(12), 1009–1018.

pH REGULIATORIAUS RECEPTŪROS KŪRIMAS

Ema Mišeikytė^{1*}, Edita Paluckienė¹, Eglė Baušienė²

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

² UAB „Nando“, Kaunas, Lietuva

* *e.miseikyte@ktu.edu*

pH reguliatoriai – tai produktai, kurie naudojami tirpalo pH vertei pakeisti. Jie naudojami įvairiose srityse, tokiose kaip kosmetikos, farmacijos ir maisto pramonėje, vandens valyme ir kitur. Šiose srityse svarbi pH kontrolė siekiant užtikrinti produktų saugumą, efektyvumą, stabilumą ir galiojimo laiką. Ypač didelė svarba pH reguliatorių yra žemės ūkyje, kurie naudojami purškiamų tirpalų (vandens su pesticidais ar trąšomis) pH vertės reguliavimui [1]. Netinkama vandens, naudojamo pesticidų ir trąšų tirpalų ruošimui, pH vertė gali paveikti pesticidų stabilumą ir efektyvumą. Pesticidai, kurių veikliosios medžiagos yra jautrios šarminei pH vertei, stabilūs išlieka tik tada, kai būna sumaišyti su silpnai rūgščiu arba neutraliu vandeniu, kurio pH vertė svyruoja nuo 5,0 iki 6,5. Tačiau purškiamo tirpalo pH vertė priklauso ne tik nuo naudojamo vandens, bet ir nuo kitų mišinio komponentų. Pavyzdžiui, boro trąšos gali padidinti tirpalo pH vertę iki 9, o tokią pH vertę sumažinti įprastiniais pH reguliatoriais yra sudėtinga. Dėl to, jei pesticidai, kurių veikliosios medžiagos jautrios šarminei pH vertei, sumaišomi su šarminiu tirpalu ar vandeniu, jie gali hidrolizuotis. Hidrolizė sumažina pesticidų efektyvumą, todėl padidėja pesticidų sąnaudos bei sumažėja kenkėjų kontrolė. Norint išgauti pilną pesticidų efektyvumą, prireikia pakartotinių purškimų [2].

Todėl mano darbo tikslas buvo sukurti pH reguliatorių, kuris užtikrins tinkamą pesticidų veiksmingumą ir stabilumą purškimo tirpaluose. Buvo sukurta pH reguliatoriaus receptūra, kurios charakteristikos pateiktos 1 lentelėje.

1 lentelė. pH reguliatoriaus charakteristikos

| Charakteristika | Reikšmė |
|--|-------------------------|
| Tankis | 1,456 g/cm ³ |
| 1% pH vertė | 1,63 |
| Statinis paviršiaus įtempimas 0,1% | 41,3 mN/m |
| Lašo (50 µL) pasiskleidimo skersmuo po 1 min. 0,1% | 13 mm |
| Spalva | Raudona |

Literatūros sąrašas:

1. E. Ling, R. Parson, D. Frank ir kt. Solving Spray Water Problems, Virginia Tech, 2024, p. 1-3.
2. University of New Hampshire. Water pH&Pesticide Mixing: A Quick Reference for New Hampshire Applicators, New Hampshire, 2025, p. 1.

ŽALIAVŲ DALELIŲ DYDŽIO ĮTAKA GRANULIŲ FIZINĖMS IR MECHANINĖMS SAVYBĖMS

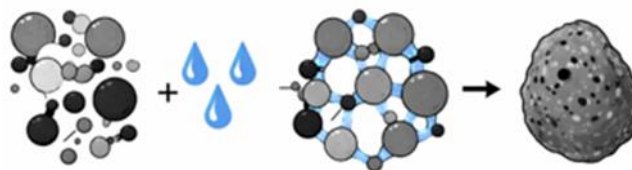
Gabija Aleksaitytė*, Rasa Šlinkšienė

Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Kauno Technologijos Universitetas, Kaunas, Lietuva

* gabija.aleksaityte@ktu.edu

Granuliavimas yra procesas, kurio metu miltelių pavidalo dalelės, pridėdant granuliuojančio (rišamojo) skysčio, agreguojasi arba sulimpa ir sudaro mažiau ar daugiau taisyklingos sferinės formos darinius, vadinamus granulėmis. Milteliai dažniausiai granuliuojami, siekiant pagerinti jų fizines ir mechanines savybes bei išvengti segregacijos, kuri gali atsirasti dėl dydžio ar tankio skirtumų saugojimo ar transportavimo metu [1, 2].

Mineralinės kilmės medžiagos (įvairios druskos), pasižyminčios plastinės deformacijos savybėmis granuliuojamos lengviau, o neplastiškos medžiagos (organinės augalinės kilmės žaliavos) aglomeruojasi sunkiai. Šlapio granuliavimo būdas yra naudojamas norint suformuoti sferinės formos granules (1 pav.), tačiau gauto produkto granuliu savybės būna skirtingos, nes priklauso nuo daugybės parametru (žaliavų prigimties, granuliavimo sąlygų ir kt.).



1 pav. Granulės formavimasis iš skirtingo dydžio žaliavų dalelių

Dalelių dydis ir jų pasiskirstymas pagal skersmenį žaliavų mišinyje yra vieni iš daugybės parametru, į kuriuos reikia atsižvelgti, norint užtikrinti sukibimo stiprumą ir sumažinti polinkį sutrupėti dėl mechaninio poveikio. Paprastai iš mažesnių žaliavų dalelių, dėl padidėjusio paviršiaus ploto ir stipresnių sąveikos jėgų, susidaro stipresnės ir tankesnės granulės [3, 4].

Kadangi pramonėje neprekinės frakcijos granulės (returas) grąžinamos į technologinę liniją ir pakartotinai granuliuojamos, siekiant pagerinti produkto išėigą, labai svarbu nustatyti optimalų returo kiekį bendroje miltelinių žaliavų masėje. Šiame darbe buvo tiriama ir vertinama žaliavų mišinio frakcinės sudėties įtaka skirtingos kilmės (mineralinių ir organinių) biriųjų trąšų granuliu savybėms: granulimetrinei sudėčiai, granuliu stipriui, granuliu piltiniam tankiui, granuliu drėgniui.

Literatūros sąrašas:

1. R. Maharjan, S. H. Jeong. Powder Technology, **2020**, 366, p. 667–688.
2. A. Jain, M. J. Metzger, B. J. Glasser. Powder Technology, **2013**, 237, p. 543–553.
3. K. E. Steffens, K. G. Wagner. Powder Technology, **2020**, 347, p. 430–442.
4. N. Rahmanian, M. Ghadiri, Y. Ding, X. Jia. AIP Conference Proceedings, **2009**, 1145, p. 255–260.

MAISTO ATLIEKOS SKYSTŪJŲ TRĄŠŲ GAMYBOJE

Ieva Krivaitė^{*}, Kristina Jančaitienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

^{*} *ieva.krivaite@ktu.edu*

Maisto pramonėje žaliavų apdorojimo metu susidaro daug atliekų. 2023 m., vien tik Europos Sąjungoje buvo išmesta 58 mln. tonų maisto, iš jų 11 mln. tonų sudarė maisto perdirbimo ir gamybos metu susidariusios atliekos [1]. Maisto atliekos, tokios kaip žievės, kevalai, lukštai, išspaudos ir kt., savo sudėtyje turi įvairių junginių, tarp jų – azoto, fosforo bei kalio, reikalingų trąšoms gaminti [2]. Be to, tai yra pigi ir dideliais kiekiais gaunama žaliava, tad gali būti pritaikyta kaip alternatyvi biomasė išgauti didesnę vertę turinčius produktus. Deja, didžioji dalis jų vis dar yra paprasčiausiai išmetamos į sąvartynus, o tai ne tik gilina aplinkosaugines problemas, bet taip pat sąlygoja medžiagų ir energijos praradimus [2].

Maisto atliekų potencialui skystųjų trąšų gamyboje įvertinti buvo pasirinktos dvi maisto atliekos: obuolių žievelės ir kavos pupelių lukštai – po pupelių skrudimo atsiskiriantis šalutinis produktas. Buvo paruoštos šių atliekų vandeninės ir 0,1 N HCl ištraukos bei įvertintos juose esančių amoniakinio azoto (NH_4^+), fosforo (P_2O_5) ir kalio (K_2O) koncentracijos.

Didžiausia amoniakinio azoto (NH_4^+) koncentracija buvo nustatyta obuolių žievelės vandeninėse ištraukose (0,193 %), fosforo (P_2O_5) – obuolių žievelės vandeninėse (0,078 %) ir kavos pupelių lukštų 0,1 N HCl (0,079 %) ištraukose, kalio (K_2O) – kavos pupelių lukštų 0,1 N HCl ištraukose (0,212 %). Efektyviausias tirpiklis NH_4^+ išgauti buvo vanduo, tuo tarpu P_2O_5 ir K_2O – 0,1 N HCl. Lyginant su kavos pupelių lukštais, obuolių žievės pasižymėjo didesne amoniakinio azoto, panašia fosforo ir mažesne kalio koncentracija.

Šio tyrimo rezultatai parodė, jog maisto atliekos gali būti perspektyvios žaliavos skystųjų trąšų gamyboje. Taikant žiedinės ekonomikos principus, atliekos nėra išmetamos, o jose esančios vertę turinčios medžiagos yra sugrąžinamos į gamybos ciklą, taip sumažinant naujų žaliavų poreikį.

Literatūros sąrašas:

1. Eurostat. Generation of waste excluding major mineral wastes by waste category. **2023**, env_wasfw. doi:10.2908/ENV_WASFW.
2. G. Spigno. International Journal of Food Science. John Wiley & Sons Ltd, JAV, **2025**, 1551054.

DAUGIAKOMPONENTĖS MIKROELEMENTINĖS SUSPENSINĖS TRĄŠOS IR JŲ GAVIMO BŪDAS

Jonas Piepalius*, Rasa Šlinkšienė

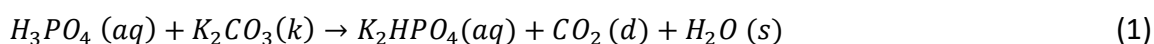
Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

* jonas.piepalius@ktu.edu

Kasmet didėjanti pasaulinė žmonių populiacija bei dirbamos žemės urbanizacija ir degradacija išryškino didelę ir trąšų vartotojams, ir gamintojams aktualią problemą – kaip tinkamai aprūpinti augalus visomis (pagrindinėmis ir mikroelementinėmis) maisto medžiagomis [1]. Vienas iš potencialių šios problemos sprendimo būdų – suspensinės trąšos (suspensijos). Skirtingai nuo įprastai naudojamų tirpalinių skystųjų trąšų, suspensijose maisto medžiagos būna ištirpusios tik dalinai arba visiškai neištirpusios, todėl galima pasiekti žymiai didesnes maisto medžiagų koncentracijas, nei tirpalinėse skystosiose trąšose. Be to, suspensijos yra pigesnės, kadangi joms gaminti galima naudoti mažesnio grynumo ir mažai tirpias (pvz. iškastines) žaliavas [2]. Kaip žinoma, suspensiją sudaro heterogeninė dvifazė sistema, kurios gavimo ir stabilumo užtikrinimas yra mokslinių tyrimų sritis.

Šiame darbe aptariami stabilios daugiakomponentės mikroelementinės suspensinės sistemos (6–12–16+5Zn+5Cu) gavimo aspektai. Mikroelementinės suspensinės trąšos buvo gaminamos kaip maisto medžiagų žaliavas naudojant: ekstraktinę 72 % fosforo rūgštį, kalio karbonatą, karbamidą, cinko oksidą bei vario (I) oksidą. Kaip suspensijos kokybę gerinantys priedai buvo naudojama: Ksantano derva, monoetilenglikolis, C12–C14 grandinės alkoholių etoksilatai bei natrio polinaftalenformaldehido sulfonatas.

Suspensija gauta vykdant reakciją:



Suspensinių trąšų gamybos procesą sudaro kelios nuoseklios stadijos: kalio karbonato ištirpinimas vandenyje; ekstraktinės fosforo rūgšties reakcija su kalio karbonatu; gauto tirpalo atvėsinimas; karbamido ištirpinimas vandenyje; gauto 0–12–16 tirpalo koncentravimas pridėdant karbamido tirpalo; mikroelementų (cinko oksido, vario (I) oksido) pridėjimas į pagamintą NPK tirpalą; suspensinių trąšų standartizavimas-stabilizavimas pridėdant papildomus suspensijai reikalingus priedus ir gautos produkcijos fasavimas ir išvežimas.

Literatūros sąrašas:

1. P.A. Khambalkar. Applied Food Research, **2025**, 5(2), 101087.
2. P. Bogusz, P. Rusek, M. S. Brodowska. Agriculture, **2021**, 11(10), 1008.

MIKROBANGINĖ CINKO JONAIŠ MODIFIKUOTO HIDROKSIAPATITO SINTEZĖ

Kamilė Dargytė, Tadas Dambrauskas

Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Silikatų technologijos katedra, Kaunas, Lietuva

* kamile.dargyte@ktu.edu

Hidroksiapatitas ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) yra vienas plačiausiai tiriamų kalcio fosfatų dėl savo cheminio ir struktūrinio panašumo į natūralų kaulinį audinį. Ši medžiaga pasižymi aukštu biologiniu suderinamumu, bioaktyvumu ir osteokonduktyvumu, todėl yra plačiai taikoma kaulų pakaituose, implantų dangose bei audinių inžinerijoje [1]. Hidroksiapatitas sudaro didžiąją dalį neorganinės kaulo ir dantų struktūros, todėl lengvai integruojasi į organizmą ir sudaro palankią terpę ląstelių adhezijai bei proliferacijai, skatindamas kaulinio audinio regeneraciją [1]. Siekiant pagerinti hidroksiapatito biologines ir funkcines savybes, jis dažnai modifikuojamas įterpiant cinko jonus (Zn^{2+}) [2]. Naujais tyrimais rodo, kad hidroksiapatitas su įsiterpusiais cinko jonais pasižymi geresniu bioaktyvumu, nes cinkas skatina osteoblastų diferenciaciją ir kaulinio audinio formavimąsi, tuo pačiu slopindamas osteoklastų aktyvumą [2]. Be to, Zn^{2+} suteikia medžiagai antimikrobinę savybę, kurios yra svarbios mažinant pooperacinių infekcijų riziką. Tokios savybės daro hidroksiapatitą su įsiterpusiais cinko jonais perspektyvia medžiaga pažangiems implantams ir kaulų regeneracijos sistemoms [2]. Deja mokslinėje literatūroje pasigendama duomenų apie cinko jonais modifikuoto hidroksiapatito sintezę mikrobanginės sintezės būdu. Todėl, šio darbo tikslas nustatyti cinko jonų įtaką hidroksiapatito susidarymui mikrobanginės sintezės būdu.

Hidroksiapatito sintezei paruošta CaCO_3 (1 g), H_3PO_4 (0,41 mL) ir $\text{Zn}(\text{NO}_2)_3$ (0,13 g) vandeninė suspensija, kurioje Ca:P:Zn molinis santykis buvo 10:6:0,5. Suspensijoje skystosios terpės ir kietų dalelių santykis – 10. Suspensija vykdyta 30 mL borosilikatinio stiklo mėgintuvėliuose patalpintuose į „Monowave 300“ (Anton Paar) reaktorių. Sintezės temperatūra (100–200 °C) pasiekta per 3 min., o visos reakcijos metu mišinys buvo maišomas 200 aps./min. greičiu.

Nustatyta, kad cinko jonai esantys skystojoje terpėje skatina monetito (CaHPO_4) o ne hidroksiapatito susidarymą, nes monetitas vyrauja sintezės produktuose nepriklausomai nuo sintezės temperatūros. Siekiant susintetinti hidroksiapatitą su įsiterpusiais cinko jonais sintezė turi būti vykdoma dviem etapais, t.y. pirmajame etape turi būti susintetintas hidroksiapatitas (2 h, 160 °C), o antrajame – įdėtas cinko priedas, bei papildomai apdorota 200 °C temperatūros aplinkoje 2 h. Gauti rezultatai buvo patvirtinti rentgeno spindulių difrakcijos, FT-IR, skenuojančiosios elektroninės mikroskopijos ir kitais metodais.

Literatūros sąrašas:

1. Acta Z. Bal, T. Kaito, F. Korkusuz, H. Yoshikawa. Bone regeneration with hydroxyapatite-based biomaterials, **2020** (3), 4, p. 521–544.
2. C. Verma, S.-Y. Lee, J. Gautam, S. Dubey, P. Singh, K. Y. Rhee, E. E. Ebense, A. Alfantazi, S.-J. Park. Hydroxyapatite-based coatings for corrosion resistance and self-healing in biomedical and industrial applications, **2025** (206), p. 1–42.

KAVOS PARUOŠIMO SĄLYGŲ ĮTAKA KAVOS TIRŠČIŲ SUDĖČIAI IR JŲ POVEIKIUI β-PUSHIDRAČIO GIPSO SAVYBĖMS

Neringa Matutytė^{1*}, Rita Kazernavičiūtė², Arūnas Burlingis³, Nora Kybartienė¹

¹ Silikatų technologijos katedra, cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

² Maisto mokslo ir technologijos katedra, cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

³ Architektūros ir statybos institutas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva
*neringa.matutyte@ktu.edu

Tvarių bei aplinkai draugiškų statybinių medžiagų kūrimas, atsižvelgiant į žiedinės ekonomikos principus ir Jungtinių Tautų darnaus vystymosi tikslus, yra viena iš greičiausiai besivystančių šiuolaikinių mokslinių tyrimų kryptių [1]. Sparti infrastruktūros plėtra bei kasdienis intensyvus neatsinaujinančių žaliavų naudojimas statybų pramonėje lemia vis didėjančias šiltnamio efektą sukeliančių dujų emisijas, reikšmingai prisidedančias prie įvairių klimato kaitos procesų [2]. Aktualia problema išlieka ir gausiai susidarantys bei nebepanaudojami organinių atliekų kiekiai. Vieni tokių – po kavos gamybos liekantys kavos tirščiai, kurių, manoma, per metus susidaro daugiau nei 6 milijonai tonų visame pasaulyje [3]. Dėl plataus prieinamumo, ekonomiškumo bei potencialo modifikuoti tradicinių statybinių medžiagų savybes, organinės atliekos, kaip priedas, tampa perspektyvia žaliava aukštesnės pridėtinės vertės medžiagoms gauti [4].

Šio tyrimo tikslas – palyginti skirtingomis kavos paruošimo sąlygomis gautų kavos tirščių sudėtį bei įvertinti jų poveikį β-pushidračio gipso savybėms.

Tyrimui atlikti buvo naudotas „Knauf Baugips“ β-pushidratis gipsas bei po karšto vandens ekstrakcijos ir garų ekstrakcijos būdais ruoštos kavos likę kavos tirščiai, išdžiovinti 80±2 °C temperatūroje bei apdoroti karštu vandeniu arba acetono tirpikliu. Tolimesniems tyrimams naudotos kavos tirščių dalelės buvo mažesnės nei 0,5 mm. Kavos tirščių priedo kiekis gipso mišiniuose buvo 5 %. Tiek pradinės, tiek po eksperimento gautos medžiagos buvo tiriamos taikant rentgeno spinduliuotės difrakcinės bei fluorescencinės analizės, vienalaikės terminės analizės, Furjė infraraudonųjų spindulių spektrinės analizės metodus. Buvo nustatytas tirtų β-pushidračio gipso kompozitų vandens ir kietos medžiagos (V/K) santykis, rišimosi trukmė ir stipris gniuždant, atsižvelgiant į EN 13279-2 standarto reikalavimus. Taip pat buvo įvertintas bandinių šiluminis laidumas naudojant greitą nestatinį kaitinimo metodą bei prieš ir po apdorojimo kavos tirščiuose esantis bendras fenolinių junginių kiekis (TPC) taikant Folin-Ciocalteu metodiką.

Literatūros sąrašas:

1. A. A. Firoozi *et al.* Emerging trends in sustainable building materials: Technological innovations, enhanced performance, and future directions, **2024** (24), 103521.
2. L. Chen *et al.* Conversion of waste into sustainable construction materials: A review of recent developments and prospects, **2024** (27), 100930.
3. H. Ahmed *et al.* Toward Circular Economy: Potentials of Spent Coffee Grounds in Bioproducts and Chemical Production, **2024** (4), 2, p. 286-312.
4. A. H. Khan, M. N. Akhtar ir K. A. Bani-Hani. Recent Developments and Innovations in the Sustainable Production of Concrete. Woodhead Publishing, **2025**, p. 3-24.

NUO HETEROMETALINIO KOMPLEKSO IKI $ZnIn_2S_4$ DANGŲ: SINTEZĖS STRATEGIJA IR SAVYBIŲ TYRIMAS

Nida Vileniškytė^{*}, Ingrida Ancutienė, Asta Bronušienė

Fizikinės ir nerogalinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

^{*}nida.vileniskyte@ktu.edu

Cinko indžio sulfidas ($ZnIn_2S_4$) yra trinaris, puslaidininkinis junginys, pasižymintis unikalia kristaline struktūra, kuriai būdingos kubinės ir heksagoninės gardelės. Dėl optimalaus draustinės juostos pločio dydžio ir cheminio stabilumo, ši medžiaga susilaukia mokslininkų susidomėjimo. Šiame darbe $ZnIn_2S_4$ dangų formavimui buvo pasirinktas cheminės vonelės nusodinimo metodas (angl. *Chemical Bath Deposition*, CBD), pagrįstas metalo-organinių kompleksų susidarymu ir vėlesniu sluoksnių nusodinimu ant padėklo [1].

Viena iš esminių šio proceso etapų - heterometalinio komplekso formavimas iš Zn(II) ir In(III) jonų, išlaikant griežtą stochiometrinį santykį 1:2. Komplexas buvo formuojamas naudojant plačiai ištirtą ir aplinkai draugišką tartaro rūgštį. Darbo metu sėkmingai suformuoto komplekso susidarymą pavyko patvirtinti atlikus FTIR analizę. Gautas kompleksas panaudotas dangų formavimui kaip katijonų prekursorius, o sieros anijonų šaltiniu pasirinktas tioacetamidas [2-3].

Siekiant ištirti nusodinimo trukmės įtaką junginio savybėms, dangos buvo formuojamos trimis skirtingais laiko intervalais. Gautų dangų struktūrinė analizė buvo atlikta naudojantis rentgeno spindulių difrakcija (XRD), skenuojančia elektronine mikroskopija (SEM) bei Ramano spektroskopija. Šios analizės patvirtini, jog visais atvejais buvo suformuotas kristalinis cinko indžio sulfidas.

Apibendrinant rezultatus galima teigti, kad iš Zn(II) ir In(III) jonų, esant 1:2 santykiui, susiformavęs metalo-organinis kompleksas veikia kaip efektyvus katijonų šaltinis. Šis kompleksas buvo sėkmingai pritaikytas cinko indžio sulfido dangų formavimui cheminės vonelės metodu, o atlikta struktūrinė analizė patvirtino gautų sluoksnių kristalinę sudėtį.

Literatūros sąrašas:

1. G. Zhang, H. Wu, D. Chen, N. Li, Q. Xu, H. Li, J. He, J. Lu. A mini-review on $ZnIn_2S_4$ -Based photocatalysts for energy and environmental application, **2022** (7), 2, p. 173-204.
2. C. Zhao, Y. Sun, Q. Ji, J. Xu, Y. Liu, S. Yang, D. Sun. Recent Advances of Bimetallic Sulfides-Based Nanomaterials for Photocatalytic Hydrogen Production, **2024** (12), 8.
3. P. Kulkarni, S. K. Nataraj, R. G. Balakrishna, D. H. Nagaraju, M. V. Reddy. Nanostructured binary and ternary metal sulfides: Synthesis methods and their application in energy conversion and storage devices, **2017** (5), p. 22040-22094.

MAGNIO JONŲ ĮTAKA KARBONIZUOTO HIDROKSIAPATITO SUSIDARYMUI MIKROBANGINĖS SINTEZĖS METU

Ugnė Malinauskaitė, Tadas Dambrauskas

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva
**ugnmal2@ktu.lt*

Viena iš pagrindinių vyresnio amžiaus žmonių problemų yra susijusi su judėjimo mažėjimu, kurį lemia kaulinio audinio silpnėjimas (tampa trapesnis, lengviau lūžta). Dėl šios priežasties mokslininkai kuria naujas medžiagas skirtas kaulinio audinio regeneravimui, stiprinimui ir gydymui [3]. Viena iš tokių medžiagų yra hidroksiapatitas [HAp, $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$], kuris yra pagrindinė mineralinė kaulinio audinio sudedamoji dalis [4]. HAp pasižymi puikiu biosuderinamumu, bioaktyvumu ir skatinti naujo kaulo augimą [1, 2]. Siekiant pagerinti HAp savybes ir funkcionalumą jis yra modifikuojamas įvairiais jonais [5]. Deja mokslinėje literatūroje pasigendama platesnių duomenų apie magnio ar karbonato jonų įterpimą ir įtaką HAp susidarymui mikrobanginės sintezės metu. Todėl šio darbo tikslas nustatyti magnio jonų pirmtako įtaką karbonizuoto hidroksiapatito susidarymui mikrobanginės sintezės metu.

Hidroksiapatito sintezė atlikta naudojant kalcio karbonato ir fosforo rūgšties vandeninę suspensiją. Pradiniame mišinyje molinis Ca/P santykis atitiko stechiometrinį HAp santykį 1,66. Sintezė vykdyta 30 mL borosilikatinio stiklo indeliuose patalpintuose mikrobangų reaktoriuje Monowave 300 kintant temperatūrai nuo 100°C iki 200°C ir išlaikant 2 valandas. Sintezės metu mišiniai maišyti 600 aps/min greičiu. Siekiant nustatyti Mg jonų įtaką HAp susidarymui atliktos sintezės į pradinį mišinį papildomai įdedant $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ir $4\text{MgCO}_3 \cdot \text{Mg}(\text{OH})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ priedus. Gautų mišinių su priedais molinis Ca:P:Mg santykis buvo 10:6:1. Gauti produktai po sintezės praskalauti nedideliu kiekiu distiliuoto vandens (10 mL) ir išdžiovinti 50°C temperatūros aplinkoje.

Nustatyta, kad grynoje sistemoje nepriklausomai nuo sintezės temperatūros vyrauja karbonizuotas hidroksiapatitas. Taip pat produktuose identifikuotas nesureagavęs kalcio karbonatas ir kitų kalcio fosfatų priemaišos. Tuo tarpu naudojant bazinio magnio karbonato priedą, sintezės produktuose vyksta vitlokito [$\text{Ca}_{2,76}\text{Mg}_{0,24}(\text{PO}_4)_2$] kristalizacija. Sistemoje su magnio nitratu, magnio jonai yra linkę terptis į hidroksiapatito struktūrą.

Tyrimą rėmė tarpinstitucinis projektas BioGel, finansuotas Kauno technologijos universiteto ir Lietuvos sveikatos mokslų universiteto fondų lėšomis.

Literatūros sąrašas:

1. AIT SAID, H. ir kt. International journal of biological macromolecules, **2023** (243), 125150.
2. CORREA-PIÑA, Brandon A.; CASTILLO-PAZ, Angelica M.; GARCÍA-SERVÍN, Martín ir RODRIGUEZ-GARCIA, Mario E. Ceramics International, **2025** (51), 30.
3. SABOURI, Zahra ir kt. Materials Today Bio, **2026** (36).
4. SURESH, Nandita ir kt. Ceramics International, **2026** (52), 2.
5. USKOKOVIĆ, Vuk. Ceramics International, **2020** (46), 8.

CINKO SULFIDO SINTEZĖ IR RENTGENO SPINDULIŲ DIFRAKCIINĖ ANALIZĖ

Vaiva Ubavičiūtė^{*}, Miglė Nareckaitė, Sima Laukaitytė, Skirma Žalenkienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

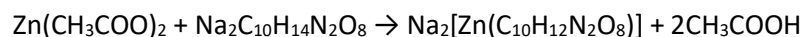
^{*}vaiva.ubaviciute@ktu.edu

Metalų sulfidai, pasižymi didele elektrinių, optinių ir magnetinių savybių įvairove. Jie yra plačiai tiriami ir naudojami saulės elementų, ličio baterijų, sensorių gamyboje, kaip katalizatoriai, pigmentai, dangos. Cinko sulfidas plačiai paplitęs gamtoje, randamas sfalerito mineralo pavidalu. Tai yra puslaidininkinė medžiaga, pasižyminti fosforencinėmis savybėmis. Plačiai naudojama ekranų, lazerių ir šviesos diodų gamyboje, kaip pigmentas dažams gaminti ir plastikams bei gumoms dažyti.

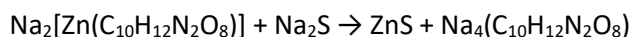
Šio darbo tikslas yra trimis skirtingais būdais susintetinti cinko sulfidą, atlikti rentgeno spindulių difrakcinę analizę (RSDA).

Cinko sulfido sintezės metodai buvo pasirinkti pagal mokslinėje literatūroje rastus straipsnius: [1-3].

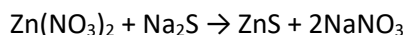
I. Į 0,005 mol/L cinko acetato ($Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$) tirpalą, nuolat maišant sulašinamas dinatrio EDTA ($Na_2C_{10}H_{14}N_2O_8$) tirpalas.



Susidariusio tirpalo pH=7. Vykstant nuolatiniam maišymui į tirpalą lėtai lašinamas natrio sulfidas (Na_2S).

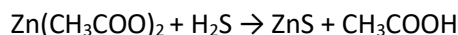


II. Į cinko nitrato ($Zn(NO_3)_2$) tirpalą lėtai sulašintas natrio sulfido (Na_2S) tirpalas ir mišinys lėtai maišomas magnetine maišykle 15 valandų.



Kitą dieną į mišinį lėtai sulašinama 10 mL 0,6 mol/L gliukozės tirpalo ir dar 6 valandas lėtai maišomas 75 °C temperatūroje.

III. Natrio sulfidui reaguojant su koncentruota sieros rūgštimi susidaręs vandenilio sulfidas leidžiamas į cinko acetato ($Zn(CH_3COO)_2$) tirpalą.



Gautos cinko sulfido nuosėdos buvo nucentrifuguotos arba nufiltruotos ir išdžiovintos. Rentgeno spindulių difrakcinė analizė buvo atlikta naudojant ADVANCE D8 rentgeno difraktometrą. Šia analize nustatėme susidariusio junginio molekulinę ir kristalinę struktūras.

Literatūros sąrašas:

1. P. Patnaik. Handbook of Inorganic Chemicals. McGraw-Hill, JAV, **2002**, p. 1032.
2. Sangeeta, IJRAR, 2019 m. gegužės mėn. 2019 m. IJRAR 2019 balandžio mėn., 6, 2, p.2.
3. Lalita Rani, R.P. Chauhan, ScienceDirect, **2022** spalio mėn., 6, 102306, p.2.

BIOSKAIDŽIŲ TRĄŠŲ DANGŲ KOMPOZICIJŲ TYRIMAI

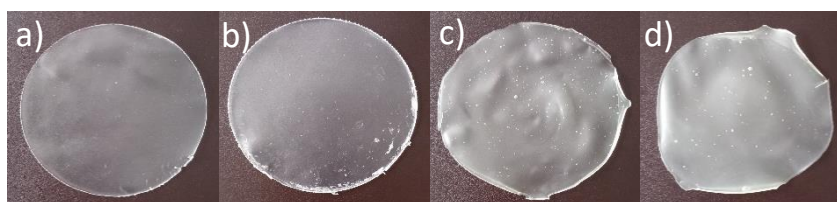
Vanesa Čereškaitė, Eglė Maslauskaitė, Rasa Paleckienė

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

Pasaulyje sparčiai augant gyventojų skaičiui, kyla poreikis išauginti kuo didesnį produkcijos kiekį iš tų pačių žemės plotų. Tam žemės ūkyje naudojama daugybė chemikalų, tokių kaip trąšos, pesticidai, herbicidai. Intensyvios žemdirbystės sąlygomis, naudojant didelius trąšų kiekius, aktuali problema yra maistinių medžiagų išsiplovimas. Įprastinių trąšų naudojimo efektyvumas yra gana žemas. Didžiausi nuotoliai yra būdingi azotui, jo prarandama apie 50 % [1-3].

Plėtojantis moderniai žemdirbystei, didėjant trąšų poreikiui bei siekiant užtikrinti maisto medžiagų naudojimo efektyvumą ir sumažinti jų nuostolius, vis daugiau dėmesio skiriama tvariems sprendimams. Vienas jų – lėto veikimo trąšos, gaunamos tradicines trąšas dengiant tirpumą mažinančiomis dangomis. Dengimui naudojami sintetiniai polimerai žemėje išlieka ilgą laiką. Alternatyva – įvairių mikroorganizmų suskaidomos dangos, kurios gali būti gaminamos gamtinių polimerų (bulvių, kukurūzų krakmolo) pagrindu. Visgi, biopolimerinės dangos turi trūkumų – mažas patvarumas, jautrumas mikroorganizmams ir hidrolizės reakcijoms. Siekiant kompensuoti trūkumus, natūralūs polimerai derinami su sintetiniais. Be to, naudojami priedai, tokie kaip plastifikatoriai, siekiant pagerinti dangų galutines savybes [4].

Mūsų tyrimų tikslas – sukurti dirvožemyje suyrančias polimerines plėveles, lėtinančias maistinių medžiagų atpalaidavimą dirvožemyje. Bioskaidžių polimerinių trąšų dangų tyrimai ir kompozicijų parinkimas atliekamas KTU mokslo grupėje „Daugiakomponentės heterogeninės sistemos ir jų taikymo technologijos“. Parenkant dangos komponentus, remtasi anksčiau atliktais tyrimais [4]. Bioskaldios krakmolo plėveles ruošiamos kaip užpildą naudojant H₂SO₄ gamyboje (AB „Lifosa“) susidarantį sieros šlamą, vabzdžių auginimo atliekas (pvz., frass) ir kitus priedus.



1 pav. Bulvių krakmolo (a, b) bei kukurūzų krakmolo (c, d) polimerinės plėvelės

Trąšų dangos (plėvelės) gavimui naudojamos įvairios žaliavos: bulvių arba kukurūzų krakmolas, vanduo, glicerolis, polivinilo alkoholis, druskos rūgštis, natrio šarmas. Cheminė žaliavų ir produktų analizė atliekama taikant žinomus trąšų srities metodus [5]. Darbe siekiama nustatyti optimalias trąšų dangų gavimo sąlygas, ištirti jų tirpumą vandenyje bei trąšų tirpaluose, įvertinti bioskaidumą dirvožemyje.

Literatūros sąrašas:

1. Nor Sakinah Mohd Said ir kt. Journal of Cleaner Production. **2025** (vol. 513), 145731.
2. Afrinal Firmanda ir kt. Journal of Environmental Chemical Engineering. **2024** (vol. 12), 2, 112177.
3. Mehri Salimi ir kt. Carbohydrate Polymers. **2023** (vol. 322), 121326.
4. J. Mikuckytė; R. Paleckienė // Chemistry and chemical technology: proceedings of international scientific conference, Kaunas, **2022**. p. 98.
5. R. Paleckienė, R. Šlinkšienė // Trąšos. Gavimas ir analizė. Kaunas, **2018**.

Organic Chemistry and Technology

Organinė chemija ir technologija

SYNTHESIS OF NEW N-SUBSTITUTED 6-AMINO BENZO[B]THIOPHENE-1,1-DIOXIDES

Arvydas Kalėda^{1*}, Vida Malinauskienė¹, Patrik Olekšak², Kamil Musilek²

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

²Faculty of Science, University of Hradec Králové, Hradec Králové, Czech Republic

* *arvka1@ktu.lt*

Mitosis inhibitors have been among the most important forms of chemotherapy for several decades. They can target different stages of the cell division process through various mechanisms. However, these compounds can have severe adverse side effects. To increase the specificity of these agents and reduce side effects, certain functional groups are introduced [1].

Various modified benzo[b]thiophene-1,1-dioxide derivatives have been studied for some time due to their antimitotic properties [2]. One of these compounds is 6-[(4-methoxybenzyl) amino]benzo[b]thiophene-1,1-dioxide. It has been observed that this compound exhibits antimitotic properties and can cross the blood-brain barrier [3].

The aim of this work was to synthesize N-substituted 6-aminobenzo[b]thiophene-1,1-dioxide analogs that could exhibit antimitotic activity and specific permeability to cross the blood-brain barrier. The synthesis of these compounds also aimed at expanding the compound library by introducing specific functional groups. This work was carried out at the University of Hradec Králové in the research group of Prof. Kamil Musilek, under the supervision of group member Patrik Olekšak.

The synthesis of the starting compound, 6-aminobenzo[b]thiophene-1,1-dioxide, was carried out in three steps: oxidation of benzo[b]thiophene, followed by nitration of the resulting 6-aminobenzo[b]thiophene-1,1-dioxide, and then reduction of the nitro group. This compound was then used in a reductive amination reaction with various aldehydes. The structures of the resulting products were confirmed by NMR spectroscopy and LC-MS analysis.

References:

1. Chamikara MAP, Chen YPP. MedFused: A framework to discover the relationships between drug chemical functional group impacts and side effects. *Computers in Biology and Medicine*. **2021**
2. ZHANG, W. et al. Antagonizing STAT3 activation with benzo[b]thiophene 1, 1-dioxide based small molecules. In *European journal of medicinal chemistry*. **2017**. Vol. 125, p. 538–550.
3. OLEKSAK, P. et al. Discovery of a 6-Aminobenzo[b]thiophene 1,1-Dioxide Derivative (K2071) with a Signal Transducer and Activator of Transcription 3 Inhibitory, Antimitotic, and Senotherapeutic Activities. In *ACS Pharmacology and Translational Science*. **2024**.

HETEROGENEOUS EPOXIDATION OF ALKENES USING BIOMASS-BASED CATALYST

Eivydas Trioška^{1*}, Carl Johan Wallentin², Edvinas Orentas¹

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

² Faculty of Science and Technology, Gothenburg University, Gothenburg, Sweden

* Eivydas.trioska@chgf.stud.vu.lt

Epoxides (also known as oxiranes) are cyclic three-membered ethers, that, due to significant ring strain, are more reactive than their non-cyclic counterparts. Phytic acid (PA) is an achiral meso-compound (*myo*-stereoisomer) with six phosphate ester groups that contain 12 acidic hydrogen atoms. Phytic acid is most often extracted from various seeds, nuts and grains [1] and, due to its abundance, research into new uses for PA has been of great interest [2,3]. In contrast to vanadyl (IV) acetylacetonate, the use of vanadyl (IV) phytate (VP) in organic reactions is poorly researched. In this study, the heterocatalytic reaction, consisting of dispersed VP catalyst in petroleum ether together with tert-butyl hydroperoxide (TBHP) and the substrate was investigated. The reaction was performed by using Biotage[®] Initiator microwave reactor at 60-80 °C for 5-10 min with yields up to 100 %. High selectivity for cinnamyl alcohol (α -methyl cinnamyl alcohol) and cyclohexenone (3-methylcyclohexenone) derivatives was observed.

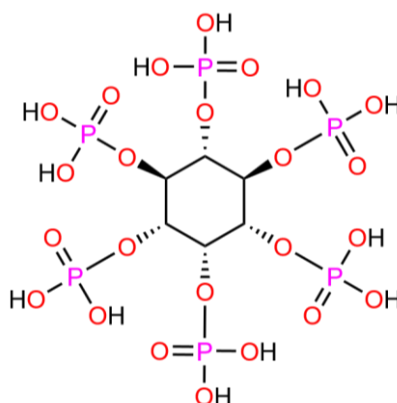


Fig. 1. Phytic acid (PA) structure.

References:

1. J. N. A. Lott, I. Ockenden, V. Raboy, G. D. Batten, Phytic acid and phosphorus in crop seeds and fruits: a global estimate, *Seed Science Research*, **2000** 10(1), 11–33.
2. Q. Zhang et al. "Phytic acid: a biogenic organocatalyst for one-pot Biginelli reactions to 3,4-dihydropyrimidin-2(1H)-ones/thiones", *RSC Adv.*, **2014** 4(38), 19710–19715.
3. V.-C. Pham, W. Chavasiri, L. Radtanajiravong. Naturally occurring phytic acid: an advanced Brønsted acid catalyst for direct amination reactions of allylic alcohols, *Organic & Biomolecular Chemistry*, 2024 22(11), 2307–2312

TETRAPHENYLETHYLENYL- AND FLUORENYL-FUNCTIONALIZED OXADIAZOLES: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY

Meda Antanaitytė^{1*}, Mariia Stanitska^{1,2}, Alena Kimpel¹, Dmytro Volyniuk¹,
Juozas Vidas Gražulevičius¹

¹ Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania,

² Centre for Physical and Technological Sciences, Vilnius, Lithuania,

* meda.antanaityte@ktu.lt

Oxadiazole is a five-membered electron-deficient heterocycle featuring two nitrogen and one oxygen atom. Since the dawn of organic optoelectronics, its derivatives have been widely implemented as various functional layers of organic light-emitting diodes (OLEDs), including charge-transporting, host-free and host-based emissive layers. The wide applicability of the derivatives of oxadiazole are caused by the specific peculiarities of its structure: abundance of electron-deficient heteroatoms ensure good electron-transporting properties; the high value of the first triplet energy level makes oxadiazoles excellent hosts for blue iridium complexes and allows the development of efficient ultraviolet, blue and green emitters, exhibiting either conventional fluorescence or thermally activated delayed fluorescence (TADF)[1-3].

Herein, we report the six novel symmetrical and unsymmetrical derivatives of oxadiazole, functionalized with tetraphenylethelene, dimethylfluorene and spirofluorene fragments. The compounds were obtained in high yields via microwave-assisted palladium-catalyzed Buchwald-Hartwig cross-coupling reaction. As established by the cyclic voltammetry, all the derivatives were electrochemically stable, exhibiting reversible oxidation processes. The values of ionization potential, determined from ultraviolet photoemission spectra, were in the range from 5.36 to 5.55 eV, which makes the compounds great candidates for the fabrication of OLEDs without adjacent hole-transporting layers. All the compounds were found to emit in the blue-greenish spectral region. The photophysical processes, taking place upon photoexcitation of the solutions of compounds, are adequately explained through quantum chemical calculations, implementing PBE0 functional.

References:

1. Lee, J. et al. Oxadiazole- and triazole-based highly-efficient thermally activated delayed fluorescence emitters for organic light-emitting diodes. *J. Mater. Chem. C*, 2013,1, 4599-4604.
2. Li, Z. et al. 1,3,4-Oxadiazole-based Deep Blue Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitters for Organic Light Emitting Diodes. *J. of Physical Chem. C*, 2019 123 (40), 24772-24785.
3. Chu, L. et al. Multifunctional oxadiazole-based ultraviolet-emitting materials used as hosts for multicolor phosphorescence. *Chem. Sci.*, 2025,16, 5252-5259.

SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF ORGANIC SEMICONDUCTORS FORMING SAMs FOR TIN-CONTAINING PEROVSKITE SOLAR CELLS

Nikoleta Ripinskaitė*, Mantas Marčinskas

Kaunas University of Technology, Faculty of Chemical Technology, Radvilėnų pl. 19, Kaunas 50254, Lithuania

* nikoleta.ripinskaite@ktu.edu

Perovskites are known as a family of materials that have shown potential for high photovoltaic performance and low production cost in solar cells. Its structure is often depicted by general formula ABX_3 and it allows the incorporation of a wide range of chemical elements or small organic molecules with different compositions, thereby resulting in strikingly different physico-chemical properties and potential applications [1]. Very recently, the best performing perovskite solar cells (PSCs) have reached an efficiency of 27.3% [2]. However, perovskite solar cells typically contain lead, which is toxic and can be harmful to humans and environment [3]. Therefore, lead-free PSCs have been widely investigated with the purpose to reduce the amount of lead used in devices [4]. Tin is considered as an attractive and cheap alternative for perovskite composition, due to similar electronic properties to lead. Yet, the complete or partial replacement of lead with tin is one of the most promising research directions in photovoltaic technology [5]. Tin is not an ideal substitute due to the rapid oxidation of Sn(II) to Sn(IV) [6]. Tin perovskite solar cells commonly use poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrenesulfonate (PEDOT:PSS) as a hole transporting material (HTM) due to its excellent optoelectronic properties [7]. Unfortunately, PEDOT:PSS exhibits lower conductivity compared to the other HTMs, while its hygroscopic nature compromises both the longevity and operational reliability of tin solar cells [8]. With the aim of overcoming such challenges, self-assembled monolayer (SAM)-forming compounds, containing additional heteroatoms that could passivate the perovskite at the layer junction, have been introduced. The first SAM-based tin perovskite solar cells to outperform PEDOT-based devices were achieved using {2-[3,7-di(thiophen-3-yl)-10*H*-phenothiazin-10-yl]ethyl}phosphonic acid (Th-2EPT). It forms an exceptionally well-passivated buried interface that minimizes recombination losses, establishing Th-2EPT as a promising candidate for next-generation SAM architectures and proving that further SAM design can unlock advanced performance in tin perovskite photovoltaics [9]. Therefore, the synthesis and investigation of new compounds of this type is a promising strategy for further improving these solar cells.

In this work, heteroatom-containing organic semiconductors along with phosphonic acid anchoring group were synthesized and investigated for possible application in tin-containing perovskite solar cells.

References:

1. Mei, X., Jia D. *nanotoday*, **2022**, 46, 101449.
2. Best Research-Cell Efficiency Chart : <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency> [Accessed April 17, 2026]
3. Wu, T., Liu, X. *Joule*, **2021**, 5, 863-886.
4. Magdalin, A. E., Nixon, P. D. *Results in Engineering*, **2023**, 20, 101438.
5. Fu, H. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **2019**, 193, 107-132.
6. Zhao, J., Zhang, Z. *Advanced energy materials*, **2023**, 13, 2204233.
7. Sun, Q., Li, Z. *The journal of Physical Chemistry Letters*, **2025**, 16, 2348–2356.
8. Redondo-Obispo, C., Ripolles, T. S. *Materials & Design*, 2020, 191, 108587.
9. Stacchini, V., Rastgoo, M. *Advanced Energy Materials*, **2025**, 15, 2500841

EFFICIENT ONE-POT SYNTHESIS OF TRIAZOLE/PYRAZOLE/BENZIMIDAZOLE HYBRIDS

Rithick Ramachandran*, Algirdas Šačkus, Eglė Arbačiauskienė

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

* rithick.ramachandran@ktu.edu

Azoles are five-membered heterocyclic aromatic compounds containing at least one nitrogen atom along with another heteroatom such as N, O, or S [1]. Among azoles, benzimidazole, pyrazole, and 1,2,3-triazole derivatives have gained significance in drug development due to their wide range of biological activities. A number of pyrazole-benzimidazole derivatives have shown significant activities such as antimicrobial, antidiabetic, anticancer, antitubercular, and neuroprotective effects. Similarly, benzimidazole–triazole and pyrazole–triazole hybrids have demonstrated a broad spectrum of pharmacological activities, including antitubercular, antifungal, antibacterial, antidiabetic, and antitumor effects [2,3].

We report the synthesis of novel pyrazole-based benzimidazole–triazole hybrids starting from readily available 1-phenyl-1*H*-pyrazol-3-ol. The key intermediate, 1-phenyl-3-hydroxy-1*H*-pyrazole-4-carbaldehyde, was prepared via *O*-alkylation and Vilsmeier–Haack formylation sequence [4]. Further, a one-pot reaction protocol was developed to obtain triazole-pyrazole-benzimidazole hybrids. The aldehyde group was converted to a benzimidazole moiety via condensation-cyclization-oxidation reactions with the benzene-1,2-diamines, while the propargyloxy group successfully underwent a Cu(I) catalysed click reaction with benzylazide to form a triazole core. The structures of the synthesized compounds were confirmed and characterized by NMR, IR, and LC–MS data. These hybrid structures may serve as promising scaffolds for the development of novel pharmacologically active compounds and warrant further biological evaluation.

References:

1. T. Sunitha, P.V. Dixit, A. Naaz, *et al.* Biochemical & Cellular Archives, 24(1), 2024.
2. S. Punia, V. Verma, D. Kumar, *et al.* Journal of Molecular Structure, 1262, 2022, 133060.
3. S. Poyraz, M. Yildirim, M. Ersatir. Medicinal Chemistry Research, 33(6), 2024, 839–868.
4. E. Arbačiauskienė, V. Martynaitis, S. Krikštolaitytė, *et al.* Arkivoc, 2011(11), 2011, 1–21.

SYNTHESIS OF *N*-SUBSTITUTED 2-((4-(BENZIMIDAZO[2,1-*B*][1,3]THIAZIN-4- YL)PHENYL)(BOC)AMINO)ACETAMIDES FOR THE RESEARCH OF AMYLOID AGGREGATION MODULATORS

Tadas Vasiliauskas*, Ieva Žutautė

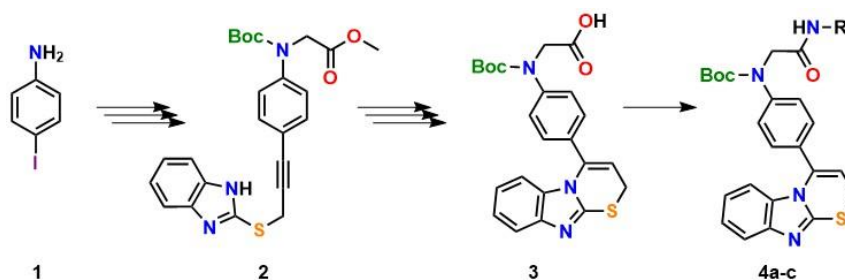
Vilnius university, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius, Lithuania

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

In Parkinson's disease a small neuronal protein called α -synuclein adopts a β -sheet conformation and forms oligomers and amyloid fibrils. [1] The accumulation of these fibrils is related to dysfunctions. One of the ways to treating the disease is searching for compounds that can potentially modulate α -synuclein aggregation. In a case of small-molecular-weight compound group, there is research done in analyzing the potential imidazo[2,1-*b*][1,3]thiazines. [2]

The aim of this work is to synthesize differently modified imidazo[2,1-*b*][1,3]thiazines and analyze their effectiveness in modulating amyloid aggregation. In the beginning, 4-iodoaniline is treated with di-*tert*-butyldicarbonate to introduce the *tert*-butoxycarbonyl (Boc) group. The nitrogen atom of the obtained product is alkylated with ethylbromoacetate. Then iodine is replaced with propargyl alcohol using the Sonogashira method, and the resulting product is brominated to replace the hydroxy group. During nucleophilic substitution, bromine is replaced with thiobenzimidazole. In the next step of cyclization, imidazo[2,1-*b*][1,3]thiazine is formed. Then the obtained product is modified with three different amines, yielding amides.

This research resulted in the synthesis of three *N*-substituted 2-((4-(benzimidazo[2,1-*b*][1,3]thiazin-4-yl)phenyl)(Boc)amino)acetamides. These products will be analyzed in order to determine their properties in amyloid aggregation modulating.



Scheme 1. Synthesis pathway for compounds 4a-c.

References:

1. P. Calabresi, A. Mechelli, G. Natale, L. Volpicelli- Daley, G. Di Lazzaro, V. Ghiglieri *Cell Death & Disease*, 14(3), **2023**, p. 1-16.
2. I. Misiūnaitė, K. Mikalauskaitė, M. Paulauskaitė, R. Sniečkutė, V. Smirnovas, A. Brukštus, M. Žiaunys, I. Žutautė. *ACS Chemical Neuroscience*, 15(24), **2024**, p. 4418-4430.

5-INDOLIL-1,3,4-OXSADIAZOLO-2-TIOLIŲ SINTEZĖ IR MODIFIKAVIMAS

Roberta Kuneikytė^{1*}, Alena Kadlecová², Algirdas Šačkus¹, Asta Žukauskaitė³,
Vida Malinauskienė¹

¹ Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

² Eksperimentinės biologijos katedra, Palackio universitetas, Čekija

³ Cheminės biologijos katedra, Palackio universitetas, Čekija

* roberta.kuneikyte@ktu.edu

Naujų heterociklinių junginių sintezė ir tyrimai išlieka aktualia sritimi, mokslininkams siekiant didinti vaistinių medžiagų efektyvumą ir tikslumą. Nors teorinės kompiuterinės programos vis dažniau naudojamos vaistų poveikiui prognozuoti, jos negali pilnai pakeisti laboratorinių tyrimų. Mokslininkai 1,3,4-oksadiazolą priskiria amidų ir esterių biozosterams, gebanties dalyvauti vandenilinių ryšių sąveikose su receptoriais. Šios sistemos plačiai naudojamos kuriant antibakterines [1], antituberkuliozines[3], analgetines ir priešūždegimines[4], bei antivirusines[5] medžiagas.

Bendradarbiaujant su Palackio universiteto mokslininkais, buvo sukurta teorinė 2-(heteroaril)-5-(alkiltio)-1,3,4-oksadiazolo darinių biblioteka. Atlikus teorinį *in silico* jų sąveikos su SDH fermentu tyrimą, atrinkti ir susintetinti selektyviausi junginiai. Tęsiant tyrimus ir plečiant junginių biblioteką buvo nuspręsta atlikti įvairių 5-indolil-1,3,4-oksadiazol-2-tiolų sintezę ir modifikaciją.

Tikslinių produktų sintezė vykdoma trimis etapais. Pirmajame etape alkil-indolilkarboskilatas paveikiamas hidrazino hidratu ($\text{NH}_2\text{NH}_2 \times \text{H}_2\text{O}$), siekiant gauti atitinkamus hidrazidus. Antrajame etape gauti hidrazidai bazinėmis sąlygomis veikiami anglies disulfidu (CS_2), ir, *in situ* parūgštintus reakcijos mišinį, buvo gauti atitinkami oksadiazoltioliai. Paskutinis etapas – tiolio grupės alkilimas.

Gautų junginių struktūros patvirtintos IR, BMR bei LC-MS analizės metodais. Visi biologiniams tyrimams paruošti junginiai buvo išgryninti iki ne mažesnio kaip 97 % grynumo.

Literatūros sąrašas:

1. E. Yarmohammadi, H. Beyzaei, R. Aryan, A. Moradi // *Mol Divers.* **2020**, 25, 2367.
2. P. Pitasse-Santos, V. Sueth-Santiago, M. J. Lima // *Braz. Chem. Soc.* **2018**, 29, 435.
3. S.S. De, M.P. Khambete, M.S. Degani // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2019**, 29, 1999.
4. G. Chawla, B. Naaz, A.A. Siddiqui // *Mini-Reviews Med. Chem.* **2018**, 18, 216.
5. D. Kumar, V. Kumar, R. Marwaha, G.C. Singh // *Bioact. Compd.* **2019**, 15, 271.

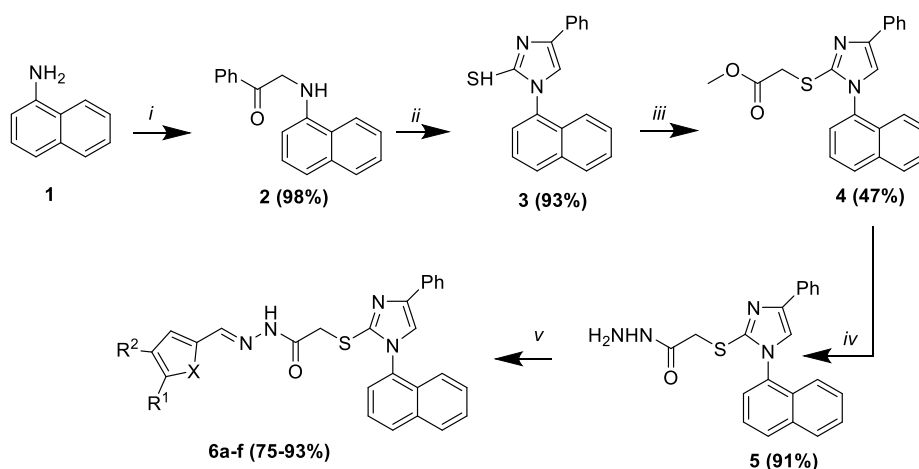
NAUJŲ NAFTALENO FRAGMENTŲ TURINČIŲ IMIDAZOL-2-TIOLIO DARINIŲ SINTEZĖ

Aistė Starkauskaitė*, Birutė Grybaitė, Vytautas Mickevičius

Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*aiste.starkauskaite@ktu.edu

Onkologiniai susirgimai išlieka viena pagrindinių mirtingumo priežasčių, todėl naujų priešvėžinių junginių paieška yra itin aktuali. Didelis dėmesys šiuo metu skiriamas heterocikliniams junginiams, ypač imidazolo dariniams, pasižymintiems reikšmingu biologiniu aktyvumu [1]. Atsižvelgiant į tai, šiame darbe buvo susintetinti nauji imidazolo dariniai.



Reakcijos sąlygos: (i) 2-bromacetofenonas, NaHCO₃, CH₃OH, 6 val., v.t.; (ii) KSCN, 10% HCl, 3 val., v.t.; (iii) metil-2-bromacetatas, K₂CO₃, CH₃OH, 1 val, v.t.; (iv) N₂H₄·H₂O, *i*-PrOH, 2 val, v.t.; (v) atitinkamas heterociklinis aldehidai, *i*-PrOH, 2 val., v.t.

6a X=S, R¹,R²=H; **6b** X=S, R¹=NO₂, R²=H; **6c** X=S, R¹=H, R²=Br; **6d** X=O, R¹,R²=H; **6e** X=O, R¹=NO₂, R²=H; **6f** X=O, R¹=H, R²=Br;

1 schema. Junginių 2-6 sintezė.

Pradžioje iš 1-naftilaminoi (1) ir 2-bromacetofenono susintetintas aminoketonas 2 reakciją atliekant metanolyje, mišinio virimo temperatūroje, ir esant jame natrio vandenilio karbonato. Kondensuojant aminoketoną 2 su kalio tiocianatu buvo gautas imidazol-2-tiolio darinys 3. Vykdamas junginio 3 alkilinimą metil-2-bromacetatu susintetintas esteris 4, kuris po to buvo panaudotas hidrazinolizės reakcijai norint gauti hidrazidą 5. Tuo tikslu esteris 4 buvo veikiamas hidrazinmonohodratu 2-propanolyje, mišinio virimo temperatūroje. Atliekant hidrazido 5 kondensacijos reakcijas su atitinkamais heterocikliniais aldehidais gauti tiofen-2-il- ir furil-2-il-fragmentus turintys hidrazonai 6a-f.

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (LMT) lėšomis sutarties Nr. S-ST-25-64.

Literatūros sąrašas:

1. K. P. M. ir kt. Advancement of imidazole derivatives as potential anticancer agents: Insight into struktūrai activity relationship (SAR) studies, **2025** (10), Nr. 46, p. 1–15.

CINKO KARBOKSILATŲ TYRIMAS IR CHARAKTERIZAVIMAS ALIEJINIŲ DAŽŲ SENĖJIMO PROCESĖ

Ugnė Ramanauskaitė^{1*}, Simona Urnikaitė¹, Jurga Bagdzevičienė², Vytautas Getautis¹

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

²Lietuvos nacionalinis dailės muziejus, Prano Gudyno restauravimo centras, Vilnius, Lietuva

*ugne.ramanauskaite@ktu.edu

Aliejinės tapybos istorijoje metalų karboksilatų susidarymas yra identifikuojamas kaip vienas svarbiausių dažų degradacijos procesų, kuris iki šiol aktyviai tiriamas. Šių junginių formavimasis lemia dažų plėvelės patvarumo sumažėjimą ir sukelia įvairius vizualiai nepageidaujamus reiškinius jos paviršiuje, todėl siekiama kuo išsamiau ištirti šių junginių susidarymo sąlygas ir rasti būdus jų išvengti [1].

Metalų karboksilatai – tai junginiai, susidarantys metalų jonams, esantiems pigmentuose, reaguojant su laisvosiomis riebalų rūgštimis, kurios yra dažų hidrolizės produktai. Bendroji šių junginių cheminė formulė yra $M(RCOO)_n$, kur M - metalo jonas, R - riebalų rūgšties molekulės angliavandenilinė grandinė, o n - metalo jono krūvis [2]. Džiūstant dažams vyksta trigliceridų esterinių ryšių hidrolizė, dėl kurios dažų sluoksnyje atsiranda laisvųjų riebalų rūgščių. Vėliau, metalų jonams migruojant į polimerinį tinklą, vyksta metalų karboksilatų susidarymo reakcijos. Šiame etape susidarę junginiai agreguojasi į amorfinius darinius ir palaipsniui migruoja dažų paviršiaus link [3]. Esant pakankamai didelei amorfinių metalų karboksilatų koncentracijai ir palankioms aplinkos sąlygoms, gali vykti jų kristalizacija [2].

Šio darbo metu buvo paruošti modeliniai tapybos bandiniai, naudojant komercinius bei laboratorijoje pagamintus cinko baltojo aliejinius dažus su metalų stearatų priedais ir be jų. Visi bandiniai buvo dirbtinai sendinami klimatinėje kameroje 1000 valandų, esant UV apšvietai, 25 °C temperatūrai ir 65 % santykiniam oro drėgnumui. Taikant optinę ir UV fluorescencinę mikroskopiją bei atitinkamus spektroskopijos metodus (FT-IR, SEM-EDX), bandiniai buvo tiriami skirtinguose etapuose: prieš dažams išdžiūstant, po 500 val. ir po 1000 val. Be to, analogiški tyrimai atlikti su Onušio (Rokiškio raj.) Šv. Arkangelo Mykolo bažnyčios sakyklos dažų mėginiais.

Tyrimo rezultatai parodė, kad cinko baltųjų aliejinių dažų senėjimo metu formuojasi amorfiniai cinko karboksilatai. Taip pat nustatyta, kad tirtuose komerciniuose dažuose esantys kitų metalų stearatų priedai, naudojami kaip disperguojančiosios medžiagos, laikui bėgant persitvarko ir taip pat sudaro amorfinius metalų karboksilatus.

Literatūros sąrašas:

1. G. J. A. M. Eumelen; E. Bosco; A. S. J. Suiker; J. J. Hermans. Chemo-mechanical model for degradation of oil paintings by amorphous and crystalline metal soaps. *European Journal of Mechanics – A/Solids*, **2023**, 97.
2. G. J. A. M. Eumelen; E. Bosco; A. S. J. Suiker; A. Van Loon, P. D. Iedema. A computational model for chemo-mechanical degradation of historical oil paintings due to metal soap formation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. **2019**, 132.
3. F. Casadio; K. Keune; P. Noble; A. Van Loon; E. Hendriks. *Metal Soaps in Art: Conservation and Research*. Springer International Publishing AG. **2019**.

N-PAKEISTŲ 5-CHLORPIRIDINO HIDRAZONŲ SU PENKIANARIAIS HETEROCIKLINIAIS FRAGMENTAIS SINTEZĖ IR BIOLOGINIO AKTYVUMO TYRIMAS

Akvilė Jurkšaitė^{1*}, Kristina Kantminienė², Ilona Jonuškienė¹, Ingrida Tumosienė¹

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

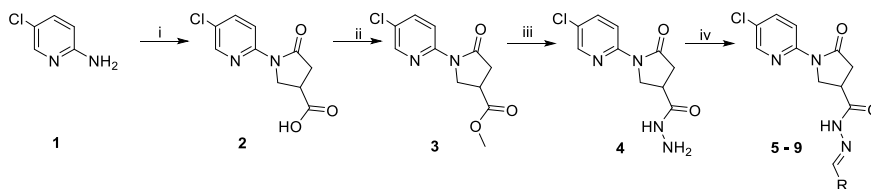
² Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*akvile.jurksaite@ktu.edu

Hidrazonai yra plačiai tiriami organiniai junginiai, svarbūs medicininėje chemijoje dėl jų įvairiapusio biologinio aktyvumo ir galimybių struktūriškai modifikuoti molekulę, siekiant pagerinti farmakologines savybes. Be to, šie junginiai pasižymi santykinai paprasta sinteze ir struktūrų įvairove, leidžiančia kryptingai keisti jų biologinį poveikį. Tokia struktūrinė įvairovė sudaro palankias sąlygas struktūros-aktyvumo ryšio (SAR) tyrimams, siekiant nustatyti ryšį tarp molekulės sandaros ir biologinio aktyvumo. SAR analizė yra svarbi optimizuojant junginių struktūras ir kuriant efektyvesnius bioaktyvius darinius. Dėl šių savybių hidrazonai laikomi perspektyviais junginiais naujų vaistinių medžiagų kūrime [1].

Darbo tikslas - susintetinti naujus *N*-pakeistus 5-chlorpiridino hidrazonus ir ištirti jų biologinį aktyvumą.

5-chlor-2-aminopiridiną **1** paveikus itakono rūgštimi virimo temperatūroje susidarė 1-(5-chlorpiridin-2-il)-5-oksopirolidin-3-karboksirūgštis **2**, kuri toliau esterifikuota iki metil 1-(5-chlorpiridin-2-il)-5-oksopirolidin-3-karboxilato **3**. Pastarąjį paveikus hidrazino hidrato pertekliumi, gautas hidrazidas **4**, o tikslinių hidrazonų **5–9** sintezė vykdyta kondensacijos reakcijomis tarp hidrazido **4** ir įvairių penkiažiedžių heterociklinių aldehidų.



1 Schema. Hidrazonų **5–9** sintezė. Reagentai ir sąlygos: (i) itakono rūgštis, H₂O, 18 h; (ii) MeOH, H₂SO₄, 24 h, 61%; (iii) N₂H₄·H₂O, EtOH, 2 h, 85%; (iv) ArCHO, MeOH, 2–8 h, 48–93%.

Atlikus hidrazonų sintezę, įvertintas jų antioksidacinis ir antibakterinis aktyvumas. Antioksidacinės savybės tirtos taikant skirtingus metodus, o rezultatai palyginti su askorbo rūgštimi kaip referenciniu junginiu. Nustatyta, kad susintetinti junginiai pasižymi kintamu biologiniu aktyvumu, priklausomai nuo jų struktūros. Gauti rezultatai patvirtina ryšį tarp junginių struktūros ir biologinio aktyvumo (SAR), o penkianariai heterocikliniai fragmentai daro reikšmingą įtaką tiriamų hidrazonų biologinėms savybėms.

Literatūros sąrašas:

1. 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), p.1592–1613.

PIRIDINO PAGRINDĄ TURINČIŲ DARINIŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAI

Aistė Drūtytė^{1*}, Vida Malinauskienė¹, Asta Žukauskaitė², Vilija Kederienė¹

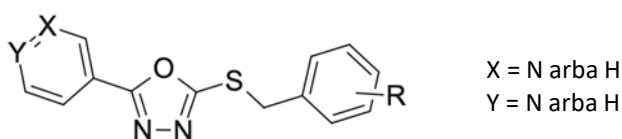
¹ Organinės chemijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Lietuva

² Faculty of Science, Palacký University Olomouc, Olomouc, Czech Republic

*aiste.drutyte@ktu.edu

Heterocikliniai junginiai yra laikomi vieni iš pagrindinių organinių junginių, kurių paklausa kiekvieną dieną auga, dėl jų plataus pritaikomumo [1]. Heterociklinės struktūros, pasižyminčios biologiniu aktyvumu, yra plačiai taikomos daugelio gyvūnams ir žmonėms skirtų vaistų gamyboje, o ūkio sektoriuje naudojami kaip insekticidai bei pesticidai [2, 3]. Daugiausia dėmesio šiose srityse sulaukia azotą turintys heterocikliniai junginiai, nes jie gali sąveikauti su įvairiomis molekulėmis sudarydami vandenilinius, joninius, nekovalentinius ryšius bei sukurti hidrofobinę sąveiką [4]. Piridinas ir jo struktūriniai organiniai junginiai itin svarbūs medicininėje chemijoje dėl plataus biologinio aktyvumo spektro, kadangi demonstruoja antimikrobinį, antivirusinį, antioksidacinį, antidiabetinį, antimaliarinį, priešūždegiminį ir psichofarmakologinį aktyvumus [5].

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



1 pav. Oksadiazolo ir piridino žiedus turintys junginiai

Tyrimo pradžioje, vykdant tarpines reakcijas pagal žinomas sintezės metodikas, susintetintas tikslinių junginių pirmtakas oksadiazoltiolis [6]. Kitame etape, atlikus geriausių alkilimo reakcijos sąlygų parinkimą, vykdytos S-alkilimo reakcijos, oksadiazoltiolį veikiant benzilhalogenidais. Susintetinti tiksliniai S-alkilinti oksadiazolo dariniai (1 pav.), pasižymintys geromis išėigomis. Detalių spektroskopinių tyrimų metu patvirtintos naujų junginių struktūros. Taip pat įvertintas susintetintų oksazolo darinių antioksidacinis ir antimikrobinis aktyvumai. Geriausiomis biologinėmis savybėmis pasižymėjo oksadiazoltiolis.

Literatūros sąrašas:

1. M. Aatif, et al. Potential Nitrogen-Based Heterocyclic Compounds for Treating Infectious Diseases: A Literature Review. *Antibiotics*, **2022** 11(12), p. 1750.
2. A. Almulla. A Review: Biological Importance of Heterocyclic Compounds. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, **2017** 9(6), p. 1–7.
3. G. Serban, et al. 2-Amino-1,3,4-thiadiazole as a potential scaffold for promising antimicrobial agents. *Drug Design, Development and Therapy*, **2018** 12, p. 1545–1566.
4. T. N. Tran. Synthesis and Applications of Nitrogen-Containing Heterocycles as Antiviral Agents. *Molecules*, **2022** 27(9), p. 2700.
5. P. Singh. Recent Developments in the Synthesis and Applications of Pyridines. Elsevier, Amsterdam, **2023** p. 1-200.
6. 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, p. 551-571.

AROMATINIŲ, FOSFORILO FRAGMENTŲ TURINČIŲ, ELEKTRONUS PERNEŠANČIŲ JUNGINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS

Andrius Stankus*, Mantas Marčinskas, Tadas Malinauskas

Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*andrius.stankus@ktu.edu

Fosforilo funkcinę grupę turintys junginiai – tai organofosforo dariniai, kuriuose penkiavalentis fosforo atomas yra sudaręs dvigubą ryšį su deguonies atomu bei tris viengubus ryšius su pakaitais ($R_3P=O$). Šie pakaitai gali būti alkilo, arilo grupės, įvairūs heteroatomai arba vandenilis. Šioje funkcinėje grupėje esantis $P=O$ ryšys tarp deguonies ir fosforo atomo yra stipriai polinis, pasižymintis ir elektronakceptorinėmis savybėmis. Tuo tarpu deguonies laisvosios elektronų poros leidžia šią funkcinę grupę turintiems junginiams veikti kaip Luiso bazės sudarant koordinacinius ryšius. Dėl šių priežasčių, fosforilo junginiai yra plačiai taikomi organometalinių katalizatorių sintezėje, OLED prietaisuose ir bei įvairiuose saulės elementuose [1, 2].

Fosforilo dariniai yra naudojami perovskitiniuose saulės elementuose kaip pasyvatoriai, kadangi vienas iš labiausiai šių prietaisų veikimą bloginančių defektų yra nesukoordinuoti Pb^{2+} jonai. $P=O$ fragmentą turintys junginiai gali sėkmingai sudaryti stabilus kompleksus su švino jonais, taip pagerindami saulės elementų efektyvumą, stabilumą ir atsparumą aplinkos poveikiui. Dažniausiai naudojami fosforilo pagrindu sukurti pasyvatoriai – trifenilfosfinoksidai (TPPO), trioktilfosfinoksidai (TOPO) ir tris(4 – morfolino)fosfinoksidai (TMPPO) [3].

Dėl stiprių elektronakceptorinių savybių fosforilo junginiai taip pat yra naudojami ir fosforescenciniuose organiniuose šviesos dioduose (PHOLED) emisinio sluoksnio sudėtyje kartu su emiteriu. Šiame sluoksnyje naudojami aromatiniai junginiai, turintys fosforilo funkcinę grupę, palengvina elektronų injekciją į emisinį sluoksnį, taip padidindami prietaisų efektyvumą ir įrodo šių junginių pritaikomumą krūvininkų pernašos procesuose [4].

Šiame darbe buvo sintetinti ir tirti aromatiniai junginiai, turintys fosforilo fragmentą, kurie pasižymėtų pasyvacijos savybėmis bei galėtų būti panaudoti kaip elektronus pernešančios medžiagos.

Literatūros sąrašas:

1. S. O. Jeon ir kt. Phosphine oxide derivatives for organic light emitting diodes. *Journal of Materials Chemistry*, **2012** (22), nr. 10, p. 4233–4243.
2. M. Li ir kt. Conductive Phosphine Oxide Passivator Enables Efficient Perovskite Light-Emitting Diodes. *Nano Letters*, **2022** (22), nr. 6, p. 2490-2496.
3. S. Lee ir kt. Substituent engineering in tertiary phosphine oxides for passivating defects of perovskite solar cells *Ecomat*, **2024** (6), nr. 7, p. e12470
4. C. Han ir kt. A Simple Phosphine–Oxide Host with a Multi-insulating Structure: High Triplet Energy Level for Efficient Blue Electrophosphorescence. *Chemistry – A European Journal*, **2011** (17), nr. 7, p. 5800-5803

INDOLO DARINIŲ, TURINČIŲ DIAZEPINO ŽIEDĄ, SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAI

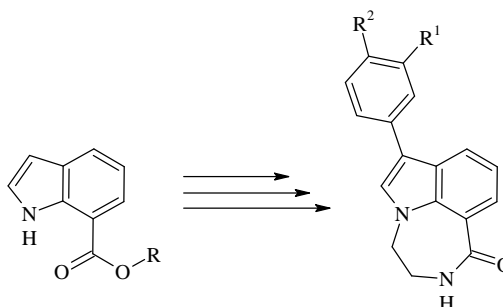
Arnas Kovševič^{1*}, Asta Žukauskaitė², Vilija Kederienė¹

¹ Organinės chemijos katedra, 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 yra svarbi aktyvių heterociklinių junginių klasė, turinti didelę reikšmę organinės ir medicininės chemijos srityse. Šie junginiai išsiskiria įvairiomis biologinėmis savybėmis, įskaitant priešvėžinį, antimikrobinį, antivirusinį, priešūždegiminį ir analgezinį poveikį [1-2]. Diazepino dariniai pastaruoju metu sulaukia vis didesnio dėmesio ne tik dėl jų poveikio centrinei nervų sistemai, bet ir dėl galimo pritaikymo onkologijoje. Naujausi tyrimai rodo, kad kai kurie benzodiazepino analogai gali aktyvinti GABA_A receptorius vėžinėse ląstelėse, sukeldami selektyvią ląstelių žūtį ir taip slopindami naviko augimą [3]. Kita vertus, nustatyta, kad indoldiazepino dariniai yra potencialūs fermento PARP-1 inhibitoriai, kurie blokuoja fermento veiklą ir gali prailginti priešvėžinių terapinių preparatų veikimą [4].

Šio darbo tikslas – susintetinti naujas, funkcionalizuotas indoldiazepino sistemas iš pradinių indolkarboksilatų.



1 schema. Indolo pagrindą turinčių diazepinų sintezė

Tiksliniai indoldiazepino dariniai buvo gauti atliekant klasikines ir modernias sintezės reakcijas. Optimizuotą naują sintezės kelią sudaro *N*-alkilinimo, ciklizacijos, halogeninimo ir paladžio katalizuojamos *Suzuki-Miyaura* kryžminio jungimo reakcijos. Tyrimo metu buvo detaliam išanalizuotos naujai susintetintų indoldiazepino sistemų struktūros.

Literatūros sąrašas:

1. S. Biswal, U. Sahoo, S. Sethy, H. K. S. Kumar, M. Banerjee. Indole: The molecule of diverse biological activities, **2012** (5), 1, p. 1–6.
2. P. Kumar, M. I. Ahma, S. Singh, M. R. F. Pratam, A. K. Mishra. Recent advancements on biological activity of indole and their derivatives: A review, **2022** (46), 3, p. 233–250.
3. D. Bhattacharya ir kt. GABA (A) Receptor Activation Drives GABARAP–Nix Mediated Autophagy to Radiation-Sensitize Primary and Brain-Metastatic Lung Adenocarcinoma Tumors, **2024** (16), 18, p. 3167.
4. N. A. Meanwell. Synopsis of some recent tactical application of bioisosteres in drug design, **2011** (54), 8, p. 2529–2591.

2,5-DIHDROPIRAZOLO[4',3':5,6]PIRANO[4,3B]CHINOLINŲ SINTEZĖ IR CHARAKTERIZAVIMAS

Augustė Vanagaitė*, Inesa Zagorskytė, Algirdas Šačkus, Eglė Arbačiauskienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos Universitetas, Lietuva

*auguste.vanagaitė@ktu.edu

Azoto turintys heterocikliniai junginiai yra neatsiejama šiuolaikinės medicininės chemijos dalis. Remiantis statistika, daugiau nei 85 % šiuolaikinėje medicinoje įvairių vaistinių preparatų struktūros pagrindą sudaro heterocikliniai junginiai, kurie pasižymi itin aukštu biologiniu aktyvumu [1]. Vienas iš svarbesnių heterociklinių junginių yra pirazolas. Tai penkianaris aromatinis heterociklas, kuris dėl plokščios struktūros pasižymi dideliu cheminiu stabilumu ir palankiomis sąveikomis su biologiniais taikniais. Taip pat pirano bei chinolino dariniai pasižymi įvairiomis farmakologinėmis savybėmis. Pirano dariniai turi neuroprotekcinį, priešvėžinį bei antimikrobinį poveikį [2], o chinolino dariniai taip pat antibakterinį, antivirusinį bei priešuždegiminį poveikį [3]. Visi trys heterociklai – laikomi reikšmingais farmakoforiniais elementais vaistų kūrime, todėl šiame darbe pasirinkome susintetinti naujus junginius turinčius pirazolo, pirano bei chinolino struktūras.

Šiame darbe iš 1-fenil-1*H*-pirazol-3-olio per keletą stadijų susintetintas 3-cinamiloksi-1-fenil-1*H*-pirazol-4-karbaldehidą, kuris toliau reagavo su įvairiais anililinais aza-Diels-Alder reakcijos sąlygomis ir gauti 2,5-dihidropirazolo[4',3':5,6]pirano[4,3b]chinolinai. Gautų junginių struktūros buvo nustatytos BMR ir IR spektroskopijos, MS spektrometrijos metodais.

Literatūros sąrašas:

1. J. Jampilek. Heterocycles in Medicinal Chemistry. *Molecules*, **2019** (24),21, 3839.
2. F. A. Almalki. An Overview of Structure-Based Activity Outcomes of Pyran Derivatives Against Alzheimer's Disease. *Saudi Pharmaceutical Journal*, **2023** (31), Nr. 6, p. 998–1018.
3. Listratova, R. S. Borisov, N. Y. Polovkov ir L. N. Kulikova. Synthesis and Biological Activity of Chromeno[3,2-c]Pyridines. *Molecules*, **2024** (29), 21, 4997.

AROMATINIŲ ORGANINIŲ RŪGŠČIŲ SINTEZĖ IR JŲ TYRIMAS PEROVSKITO PAVIRŠIAUS DEFECTŲ PASYVAVIMUI

Ema Andriuskaitė, Matas Steponaitis

*Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas,
Radvilėnų pl. 19, LT-50254 Kaunas, Lietuva
ema.andriuskaite@ktu.edu

Kadangi iškastinio kuro atsargos mažėja, klimato kaita intensyvėja, o pasaulinis energijos poreikis sparčiai auga, energiją taupančių ir atsinaujinančiais energijos šaltiniais paremtų technologijų kūrimas tapo vienu didžiausių šiuolaikinio mokslo iššūkių [1]. Saulės energija yra ypač perspektyvi – per vieną sekundę Saulė išspinduliuoja tiek energijos, kad teoriškai jos pakaktų patenkinti žmonijos poreikius beveik vienam milijonui metų. Šie faktai skatina tyrėjus kurti naujus įrenginius, gebančius efektyviai paversti saulės spinduliuotę elektros energija.

Per pastaruosius 15 metų, intensyvių mokslinių tyrimų dėka, perovskitų saulės elementai (PSC) pasiekė didesnį nei 27 % efektyvumą [2]. Nepaisant didelės pažangos, vis dar išlieka fundamentalių problemų, kurias būtina spręsti laboratorijose. Viena iš jų – perovskito paviršiaus defektai (pvz., nekoordinuotas švinas), kurie mažina įrenginių stabilumą ir riboja efektyvumą [3]. Paviršiaus defektai PSC dažnai pasyvuojami naudojant santykinai mažas organines molekules su polinėmis funkcinėmis grupėmis (pvz., karboksirūgštis, fosfoninės rūgštis, ketvirtinio amonio ir kt.), galinčiomis sudaryti ryšius su nekoordinuotais švino atomais [4]. Nors mokslinėje literatūroje pateikiama daug medžiagų, skirtų perovskitų paviršiaus defektams mažinti, vis dar trūksta aiškumo, kuri funkcinė grupė ir molekulinė struktūra užtikrina geriausius rezultatus.

Šiame darbe buvo susintetintos įvairios karbazolo karboksirūgštys, siekiant ištirti tokių veiksmų kaip karbazolo branduolio modifikacijos ir atstumas tarp rūgštinės funkcinės grupės bei karbazolo fragmento įtaką sąveikai tarp aromatinių rūgščių ir perovskitų paviršiaus defektų. Branduolinio magnetinio rezonanso (BMR) eksperimentai parodė, kad sąveika tarp PbI_2 ir karbazolo karboksirūgščių yra selektyvi ir priklauso nuo aromatinės rūgšties struktūros.

Literatūros sąrašas:

1. Wunderling, N., von der Heydt, A. *ESD*, 2024, 15, 41-74.
2. Xiong, Z.; Zhang, Q., et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 390, 638.
3. Khadka, D., Shirai, Y. *Nature Communications*, 2024, 15, 882.
4. Deng, Y., Li, X. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2021, 230, 111242.

(IMIDAZO[2,1-*b*][1,3]TIAZIN-4-IL)FENOLIŲ SINTEZĖ IR MODIFIKAVIMAS

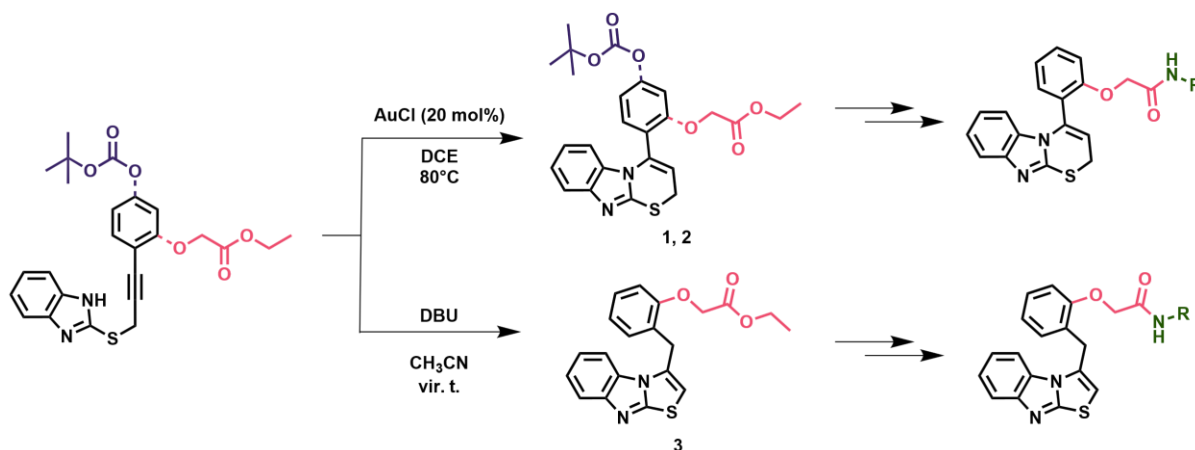
Fausta Kairytė*, Ieva Žutautė

Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus Universitetas, Vilnius, Lietuva

*fausta.kairyte@chgf.stud.vu.lt

β -fibrilinių darinių, vadinamų amiloidais, formavimasis glaudžiai susijęs su neurodegeneracinių ligų vystymusi. Tai baltymai, pradėję savo natūrią funkciją dėl netaisyklingo struktūros susilankstymo, kurie jungiasi tarpusavyje ir sudaro netirpias struktūras. Šios struktūros pasižymi itin dideliu atsparumu proteolitiniui fermentų skaidymui, todėl yra linkusios kauptis. Amiloidų agregatai kaupiasi smegenų audiniuose, tokiu būdu negrįžtamai pažeisdami neuronų ląsteles. Šis procesas siejamas su Alzheimerio, Parkinsono ligomis. Egzistuojantys vaistai slopina šių ligų simptomus, tad įvairūs moksliniai tyrimai siekia sukurti junginius, kurie gebėtų inhibuoti amiloidų agregatų susidarymą, taip visiškai sustabdyti ligos progresavimą. Mažamolekuliniai heterocikliniai junginiai vertinami kaip vieni perspektyviausių amiloidų agregatų moduliatorių [1, 2].

Siekiant praplėsti potencialių slopiklių imtį, atlikta tikslinė (imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazin-4-il)- ir (imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazol)fenolių sintezė. Pirmuose sintezės etapuose modifikuotos atitinkamų 2- ir 4-jodfenolių hidroksigrupės, po to sekė trigubojo ryšio įvedimas bei propargilbromido pakeitimas tiobenzimidazolo grupe. Pagrindinis heterociklinis fragmentas suformuotas pritaikant auksu katalizuojamą alkinilimidazolo ciklizacijos reakciją, gauti tiksliniai junginiai 1, 2 ir 3 (1 schema). Siekiant iširti funkcinių grupių įtaką biologiniam aktyvumui, gautų junginių esterinės grupės modifikuotos iki atitinkamų amidų. Gauta serija junginių, skirtų amiloidų agregacijos slopinimo aktyvumui įvertinti.



1 schema. Alkinilimidazolo ciklizacijos ir tolimesnio junginių modifikavimo schema

Literatūros sąrašas:

1. Misiūnaitė, K. Mikaluskaitė, M. Paulauskaitė, R. Sniečkutė, V. Smirnovas, A. Brukštus, M. Žiaunys, I. Žutautė, *ACS Chem. Neurosci.*, 2024, 15, 4337-4591.
2. E. Žerovnik, *Eur. J. Biochem.*, 2002, 269, 3362-3371.

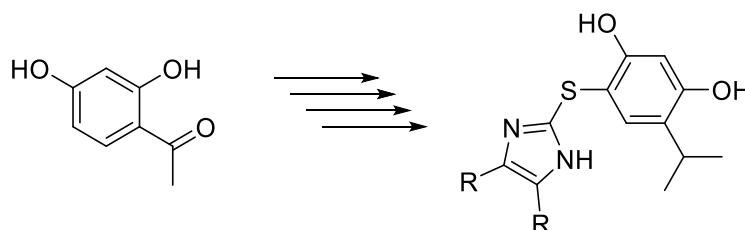
IZOPROPILREZORCINOLIŲ SU ĮVAIRIAIS 2-TIOIMIDAZOLINIAIS PAKAITAIS SINTEZĖ

Gabija Griškonytė*, Ieva Žutautė, Algirdas Brukštus

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

*gabija.griskonyte@chgf.stud.vu.lt

Kasmet vėžiniai susirgimai nusineša apie 10 milijonų gyvybių ir šis skaičius auga [1]. Viena iš vėžio gydymo krypčių yra šiluminio šoko baltymo Hsp90 slopinimas. Hsp90 gyvybiškai svarbus ląstelių ciklo reguliatorius, t. y. proliferacijos, transkripcijos ir signalo perdavimo [2]. Vėžio ląstelėse yra stresinė aplinka, dėl kurios pasireiškia perteklinė Hsp90 ekspresija [3]. Taip sukliamamas neteisingas klientinių baltymų susilankstymas ir kaupimasis. Šie veiksniai koreliuoja su vėžinių ląstelių sugebėjimu išgyventi. Hsp90 slopinimas sutrikdo ląstelių gyvybinį ciklą, jos nebeturi susilankstymo mechanizmo ir tada žūsta [4]. Nustatyta, kad baltymo veiklą galima stabdyti su rezorcinolio fragmentą turinčiais junginiais, kurie sąveikauja su Hsp90 N-galo domene esančia ATP kišene. Šio darbo tikslas ir yra susintetinti izopropilrezorcinolius su įvairiais pakaitais, kurie galėtų veikti kaip Hsp90 slopikliai ir prisidėtų prie vėžinių susirgimų gydymo.



1 Pav. Pradinio ir tikslinių junginių struktūros

Tikslinių junginių sintezei, pradine medžiaga pasirinktas 1-(2,4-dihidroksifenil)etan-1-onas. Hidroksigrupės apsaugotos jas pakeičiant metoksigrupėmis, taip siekiant išvengti pašalinių reakcijų. Izopropilgrupei suformuoti atlikta Wittigo reakcija su karbonilo grupe, o gautas dvigubasis ryšys suredukuotas. Tuomet į junginio penktąją padėtį įvestas jodas su N-jodsukcinimidu. Ullmano reakcijos pagalba jodas pakeičiamas sieros atomą turinčiais junginiais. Paskutinė sintezės stadija buvo hidroksigrupių deblokavimas ir galutinių izopropilrezorcinolių su tioimidazoliniais pakaitais išskyrimas.

Literatūros sąrašas:

1. F. Bray. Global cancer statistics 2022: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries, **2024** (74), 3, p. 229-263.
2. L. Li. Heat Shock Protein 90 Inhibitors: An Update on Achievements, Challenges, and Future Directions, **2020** (63), 5, p. 1798-1822.
3. X. Liang. Targeting HSP90 for Cancer Therapy: Current Progress and Emerging Prospects, **2024** (67), 18, p. 15968-15995.
4. Y. Li. Small molecule inhibitors targeting heat shock protein 90: An updated review, **2024** (275), p. 116562.

DVIGUBĄ SĄVEIKĄ IR FUNKCIONALUMĄ PEROVSKITINIULOSE SAULĖS ELEMENTUOSE TURINČIŲ ORGANINIŲ SKYLĖMS SELEKTYVIŲ PUSLAIDININKIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS

Gabija Linkaitė*, Mantas Marčinskas, Tadas Malinauskas, Vytautas Getautis

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

*gabija.linkaite@ktu.edu

Švino halogenidiniai perovskitai pastaraisiais metais iškilo kaip išskirtinė puslaidininkė medžiaga, naudojama saulės elementuose ir įvairiose optoelektronikos srityse. Vis dėl to, praktinio perovskitinių saulės elementų (angl. *PSC – perovskite solar cells*) pritaikymo srityje išlieka didelių iššūkių, vienas iš jų – tokiuose perovskituose esančio švino toksiškumas. Siekiant sukurti aplinkai draugiškesnius, bešvinius PSC, viena iš galimų strategijų yra šviną visiškai arba dalinai pakeisti alavu. Dėl savo atominio skaičiaus, alavo pagrindu sukurti perovskitai gali pasižymėti optoelektroninėmis savybėmis, artimomis švino pagrindu sukurtiems analogams. Vis dėlto Sn^{2+} jonų įtraukimas į perovskitų kristalinę gardelę lemia tam tikrus nepageidaujamus reiškinius: sumažėjęs šviesos sugerties koeficientas dėl sumažėjusio švino kiekio, nevienalytė plonųjų sluoksnių morfologija dėl spartaus Sn^{2+} kristalizacijos proceso, didelė defektų koncentracija ir trumpas krūvininkų gyvavimo laikas, kurį lemia lengvas Sn^{2+} oksidavimasis į Sn^{4+} [1]. Iš daugelio alavo turinčių perovskitų sudėčių, kol kas tik Sn–Pb (1:1) perovskitas parodė perspektyvius rezultatus, artimus švino pagrindo sistemų efektyvumui [2].

Invertuotos architektūros PSC, kurioje skylėms selektyvus sluoksnis yra suformuojamas prieš perovskito sluoksnį, vietoje įprastinių skylių pernešančių medžiagų buvo pristatytos savitvarkį monosluoksnį formuojančios medžiagos (angl. *SAM – self-assembled monolayer*). SAM pasižymi geromis skylių ištraukimo savybėmis, didesniu efektyvumu ir stabilumu. Tačiau SAM, kurie rodo aukštus rezultatus švino pagrindo PSC, neatkartoja tokių rezultatų alavo turinčiuose PSC. Neseniai buvo susintetinta karbazolo pagrindo SAM medžiaga $\text{BrNH}_3\text{-4PACz}$, turinti dvigubą funkcionalumą: karbazolo funkcinė grupė prijungta prie inkarinės fosfonrūgšties grupės, sukuria tinkamą dipolio momentą ITO elektrodo paviršiuje užtikrinant palankų energijos išsidėstymą ir efektyvų skylių ištraukimą iš siaurosios draustinės juostos perovskito sluoksnio; joninė amino bromido funkcinė grupė pasyvuoja perovskito defektus paviršių sandūroje ir reguliuoja jo kristalizaciją [3]. Dėl šios dvigubos sąveikos šis junginys parodė ypač gerą efektyvumą Pb–Sn perovskitiniuose saulės elementuose ir netrukus po to buvo komercializuotas (Tokyo Chemical Industry), taip pademonstruojant tokių joninių junginių aktualumą.

Šio tyrimo metu buvo sintetinami SAM formuojantys joniniai junginiai, turintys dvigubą sąveiką ir funkcionalumą, kurie gali būti naudojami konstruojant alavo turinčius PSC.

Literatūros sąrašas:

1. W. Gao, et al. *Advanced Materials*, **2026**, 38(9), p. e21789.
2. H. Lee, et al. *Nano Convergence*, **2023**, 10(1), p. 27.
3. S. Zhumagali, et al. *Advanced Energy Materials*. **2025**, 15(18).

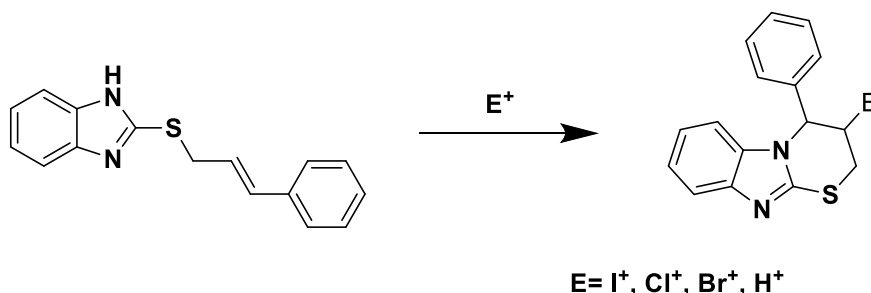
ELEKTROFILAIS INICIJUOTOS 2-CINAMILTIOBENZIMIDAZOLO CIKLIZACIJOS REAKCIJOS TYRIMAS

Marijus Danisevičius*, Martyna Paulauskaitė, Ieva Žutautė

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

**marijus.danisevicius@chgf.stud.vu.lt*

Intramolekulinės ciklizacijos reakcijos yra vienas iš pagrindinių procesų nagrinėjamų ir taikomų pastarojo amžiaus reakcijų, įgalinančių kurti įvairaus dydžio karbociklines bei heterociklines sistemas. Nors trigubasis ryšys šiose reakcijose yra visapusiškai nagrinėjamas, mokslininkų žvilgsnis po truputį krypta ir į dvigubą ryšio sistemas. Šiuo metu tyrinėjama pagrindinė ciklizacijų varomoji jėga yra elektrofilai. Vienos iš pirmųjų tyrinėtoms terminalinėms alilsistemos, kurios prijungtos prie 1,2,4-triazolo-3-tolio [1], 1,2,3-triazolo-3-tiono [2], ar tiobenzimidazolo [3] veikiant halogenais buvo panaudotos kuriant tiazino bei tiazolo struktūras. 1-pakeisti alildariniai buvo panaudoti tik vieną kartą reakciją inicijuojant seleno elektrofilu [4]. Todėl šio darbo tikslas – ištirti 2-cinamiltiobenzimidazolo ciklizacijos reakcijas per dvigubąjį ryšį naudojant skirtingus elektrofilus.



1 schema. 2-cinamiltiobenzimidazolo ciklizacijos reakcija inicijuojant elektrofilais.

2-Cinamiltiobenzimidazolo sintezė buvo pradėta nuo 3-fenilpropargilalkoholio trigubąjį ryšio redukcijos naudojant $LiAlH_4$. Paskui hidroksigrupė buvo keičiama į $-Br$ naudojant fosforo tribromidą. Kadangi 1-fenilalilbromidas nėra labai stabilus, po greito reakcijos apdirbimo, junginys buvo panaudotas pakeitimo reakcijoje su 2-merkaptobenzimidazolu išskiriant galutinį produktą.

Vėliau buvo tiriamos gauto junginio ciklizacijos reakcijos naudojant keturių tipų elektrofilus, bei optimizuotos šių reakcijų sąlygos. Elektrofilų šaltiniais pasirinkti N-halosukcinimidai NIS, NBS ir NCS, bei sieros ir triflatinė rūgštys. Nustatyta, kad ciklizacija geromis išėgomis vyksta naudojant I^+ , Br^+ bei H^+ elektrofilus.

Literatūros sąrašas:

1. Elena S. Il'inykh, Dmitry G. Kim, Mikhail I. Kodess, Evgeniya G. Matochkina, Pavel A. Slepukhin, J. Fluor. Chem., 2013, **149**, p. 24-29
2. Shmygarev, V.I., Kim, D.G. Chem. Heterocycl. Compd., 2004, **40**, 8, p. 1077–1082
3. Il'inykh E.S., Kim D.G. Bull. South Ural State Univ., Ser. Chem., 2015, **7**, 3, p. 19-24
4. A. Halder, K. Mahanty, D. Maiti, S. De Sarkar, Chem. Asian J., 2021, **16**, 23, p 3895-3899

ELEKTROFILINĖS CIKLIZACIJOS JODO REAGENTAIS TAIKYMAS IMIDAZO[2,1-*b*][1,3]TIAZINO SISTEMŲ SINTEZEI

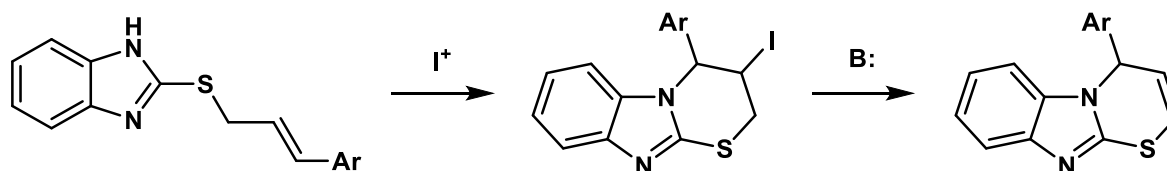
Martyna Paulauskaitė*, Ieva Žutautė

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

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

Junginiai, turintys imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino fragmentą, yra svarbi heterociklinių sistemų grupė, plačiai tiriama organinėje ir vaistų chemijoje. Šios struktūros gali būti lengvai modifikuojamos, o tai leidžia kryptingai keisti junginių chemines bei biologines savybes. Dėl struktūrinės įvairovės ir gebėjimo selektyviai sąveikauti su biomolekulėmis šie junginiai pasižymi įvairiomis biologinėmis savybėmis, įskaitant prieštuberkuliozinį [1], priešūždegiminį [2], priešgrybelinį [3] bei amiloidų agregaciją moduluojantį [4] poveikį. Dėl šių priežasčių imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino struktūrą turintys junginiai laikomi perspektyviais kandidatais kuriant naujus bioaktyvius junginius.

Imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino heterociklinės sistemos gali būti sintetamos įvairiais metodais. Tradiciniai sintezės keliai dažniausiai apima nukleofilinio pakeitimo arba kondensacijos reakcijas, kurios reikalauja kelių etapų. Pastaraisiais metais vis daugiau dėmesio skiriama elektrofilų inicijuojamos nukleofilinės ciklizacijos reakcijoms, leidžiančioms efektyviai ir selektyviai formuoti heterociklines sistemas vienos stadijos metu. Vis dėlto 2-alkeniltoimidazolų elektrofilinės ciklizacijos reakcijos iki šiol yra menkai tyrinėtos. Todėl šiame darbe siekiama ištirti šių junginių ciklizacijos metodus ir nustatyti tinkamiausias reakcijos sąlygas naujų imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino darinių sintezei.



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

Ciklizacijos reakcijos optimizavimui pradinio junginio pasirinktas 2-cinamiltiobenzimidazolas, kuris buvo susintetintas per kelias stadijas. Tyrimo metu vertinta skirtingų elektrofilinių I⁺ šaltinių ir tirpiklių įtaka reakcijos eigai bei produktų susidarymui. Nustatytomis optimaliomis sąlygomis buvo gautos imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino sistemos, turinčios jodo pakaitą (1 schema). Vėliau, šiuos junginius paveikus baze, jodas buvo eliminuotas, taip suformuojant galutines heterociklines struktūras. Gauti tiksliniai junginiai gali būti naudojami tolimesniuose cheminiuose ir biologiniuose tyrimuose.

Literatūros sąrašas

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

DVIGUBOS FUNKCIJOS SAVITVARKĮ MONOSLUOKSNĮ FORMUOJANČIOS MEDŽIAGOS SKIRTOS PEROVSKITINIŲ SAULĖS ELEMENTŲ EFEKTYVUMUI IR ILGALAIKIUI STABILUMUI PAGERINTI

Milda Žitinevičiūtė*, Dr. Matas Steponaitis, Prof. Dr. Vytautas Getautis

Organinės chemijos katedra, Kauno Technologijos Universitetas, Kaunas, Lietuva

**milda.zitineviciute@ktu.lt*

Daugėjant iššūkių klimato kaitos ir energetikos srityse, elektros energija sugeneruojama iš saulės šviesos sulaukia vis daugiau dėmesio kaip atsinaujinantis energijos šaltinis ir alternatyva iškastiniam kurui. Perovskitiniai saulės elementai (PSE) iškilo kaip perspektyviausia naujos kartos fotovoltinių įrenginių technologija. PSE pasižymi santykinai geru mechanišku lankstumu, paprasta gamyba ir aukštu našumu viršijančiu 27,2% [1, 2].

Didžiausią įtaką efektyvumui daro krūviui selektyvūs skylių ir elektronų pernašos sluoksniai. Šiuo metu našiausi PSE konstruojami invertuotos architektūros (p-i-n), kuriose tarp skaidraus laidaus oksido ir perovskito įterpiamas skylėms selektyvus organinio puslaidininkio sluoksnis, kuris leidžia molekulinio lygiu kontroliuoti sluoksnių sąsajas, kartu sumažinant histerezę ir sudarant galimybę sumažinti paviršinių defektų kiekį perovskito sluoksnyje modifikuojant molekules struktūras. Skylėms selektyvūs junginiai, sukurti karbazolo pagrindu su fosfono rūgšties inkarine grupe, tapo savitvarkį monosluoksnį formuojančių (SMF) junginių struktūriniu pagrindu kuriant efektyvius junginius skirtus krūvio pernašai. Šie junginiai pasižymi itin plonu molekulių išsidėstymu, stipriu prisitvirtinimu prie substratų, kas slopina rekombinaciją ir didina PSE efektyvumą [3].

Nors SMF junginiai jau laikomi PSE standartu, tačiau vis dar kyla problemų susijusių su tolygia sluoksnio formacija, molekulių agregacija, kas neleidžia saulės elementui pasiekti maksimalaus efektyvumo ir ilgalaikio stabilumo. Šio darbo tikslas yra išspręsti, arba bent sušvelninti prieš tai minėtas problemas, į klasikinę SMF struktūrą įvedant fenileno žiedus, turinčias amonio druskų grupes. Fenileno žiedas šioje struktūroje padėtų molekulėms išvengti agregacijos dėl papildomo molekulės iškreipimo, o amonio druskos galėtų sąveikauti su perovskito sluoksnio defektais, taip dar labiau pagerindamos sluoksnių sąveiką [4, 5].

PSE teikia daug optimistinių perspektyvų, dėl daugybės vykdomų tyrimų, kurie siekia išspręsti esamus apribojimus ir pasiekti tokį efektyvumą ir stabilumą, kuris leistų komercializuoti šiuos saulės elementus [1].

Literatūros sąrašas:

1. J. Han, et al. Perovskite solar cells, **2025** (5), 1, p.3.
2. Z. Xiong, et al. Homogenized chlorine distribution for >27% power conversion efficiency in perovskite solar cells, **2025** (390), 6773, p. 638-642
3. L. Castriotta, et al. Entering the 27% Era: Practical Design Rules for Single-Junction Perovskite Solar Cells, **2026** (11), 3, p. 2378-2381.
4. H. Wu, et al. Tailored Lattice-Matched Carbazole Self-Assembled Molecule for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells, **2025** (147), 9, p. 8004-8011.
5. Z. Shi, et al. "T-shaped" Carbazole Alkylammonium Cation Passivation in Perovskite Solar Cells, **2024** (9), 2, p. 419-427.

FENILETANO RŪGŠTIES DARINIŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIO AKTYVUMO TYRIMAS

Neimantė Šartutė^{1*}, Joana Solovjova¹, Algirdas Šačkus^{1,2}, Asta Žukauskaitė³

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

² Sintetinės chemijos institutas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

³ Cheminės biologijos katedra, Palackio universitetas, Olomouc, Čekija

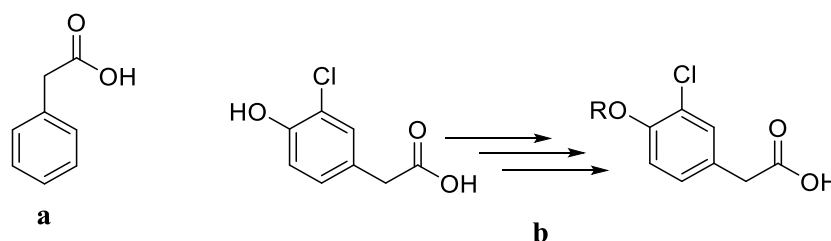
*neimante.sartute@ktu.lt

Auksinai – tai augalų hormonai, kurie atsakingi už augalo vystymąsi įvairiomis aplinkos sąlygomis. Netgi mažomis koncentracijomis, jie gali reguliuoti genų ekspresiją, sukeldami augalo ląstelių atsaką. Indol-3-etano rūgštis (IAA) yra labiausiai paplitęs natūralus auksinas, tačiau augaluose aptinkami ir kiti šiai hormonų grupei priklausantys junginiai, tokie kaip 4-chlorindol-3-etano rūgštis (4-Cl-IAA), indol-3-butano rūgštis (IBA) ir feniletano rūgštis (PAA) (žr. 1 pav. a) [1].

Nors PAA augaluose aptinkamas kaip augalų augimo hormonas, tačiau taip pat pasižymi fitotoksinėmis, antimikrobinėmis ir priešgrybelinėmis savybėmis [2]. PAA skatina augalo vystymąsi, hipokotilio ilgėjimą, šoninių šaknų susidarymą, tačiau jos aktyvumas sudaro maždaug nuo 1 % iki 10 % IAA aktyvumo. Vis dėlto, moksliniai tyrimai rodo, kad PAA aktyvumas priklauso nuo augalo rūšies, pavyzdžiui, žirnių daigus paveikus PAA susidaro daugiau ir ilgesnės šoninės šaknys nei veikiant IAA [3].

Šio tyrimo tikslas – susintetinti feniletano rūgšties darinius ir ištirti jų biologinį aktyvumą augalams.

Tyrimo metu atlikus karboksigrupės esterinimo, hidroksigrupės alkilavimo, hidrolizės reakcijas buvo gauta eilė 3-chlor-4-alkoksietano rūgšties darinių.



1 pav. a) Feniletano rūgštis; b) atliktos sintezės schema

Toliau tirtas susintetintų tikslinių junginių poveikis augalams, siekiant nustatyti, ar jie pasižymi auksinams būdingu aktyvumu: įvertintas pagrindinės augalo šaknies augimas, susiformavusių šoninių šaknų kiekis bei tankis ir atlikta DR5:GUS reporterinės linijos analizė.

Literatūros sąrašas:

- GOMES, G. L. B. ir SCORTECCI, K. C. *Auxin and its Role in Plant Development: Structure, Signalling, Regulation and Response Mechanisms*. Wiley, -08-15, 2021.
- AZOUAOUI-AIT KETTOUT, Tassadit; GACEB-TERRAK, Rabéa; BOUCENNA-MOUZALI, Baya; RAHMANIA, Fatma; TASSADIT, Azouaoui-Ait ir kt. *PHENYLACETIC ACID: A CHEMICAL MARKER OF Fusarium Oxysporum F. Sp. Albedinis IN LEAFLETS OF SUSCEPTIBLE CULTIVAR OF ALGERIAN DATE PALM*. .
- PEREZ, Veronica C.; ZHAO, Haohao; LIN, Makou ir KIM, Jeongim. *Occurrence, Function, and Biosynthesis of the Natural Auxin Phenylacetic Acid (PAA) in Plants*. MDPI AG, -01-06, 2023.

4-(IMIDAZO[2,1-*b*]TIAZIN-5-IL)ANILINO DARINIŲ SINTEZĖ

Polina Pylskaja*, Ieva Žutautė

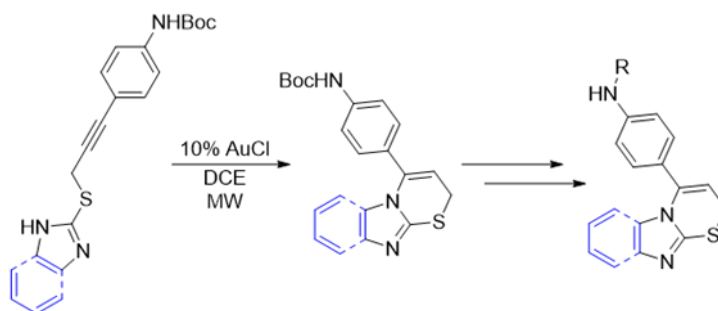
Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas, Vilnius, Lietuva

*polina.pylskaja@chgf.stud.vu.lt

Baltymų agregacijos procesai ir amiloidinių struktūrų formavimasis sulaukia vis didesnio dėmesio biotechnologijų ir medicinos tyrimuose dėl jų tiesioginio ryšio su įvairiomis neurodegeneracinėmis bei sisteminėmis ligomis. Tokie sutrikimai kaip Alzheimerio ir Parkinsono ligos ar II tipo cukrinis diabetas yra siejami su netaisyklingai susilanksčiusių baltymų kaupimusi, kai jie formuoja netirpius fibrilinius darinius. Šie agregatai trikdo normalią ląstelių veiklą ir gali sukelti citotoksinį poveikį, todėl junginių, galinčių slopinti ar modifikuoti amiloidogenezės procesus, paieška yra svarbi šiuolaikinių tyrimų kryptis [1].

Pastaraisiais metais ypatingas dėmesys skiriamas mažamolekuliams heterocikliniams junginiams, pasižymintiems gebėjimu sąveikauti su baltymais ir reguliuoti jų agregaciją. Nustatyta, kad junginiai, turintys imidazolo ar benzimidazolo fragmentus, gali veikti kaip amiloidų agregacijos modulatoriai [2]. Tarp jų išsiskiria imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino karkasą turinčios struktūros, kurioms būdingas platus biologinis aktyvumas bei potencialas slopinti pataloginių baltymų agregaciją [3].

Šiame darbe buvo vykdoma imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino ir benzimidazo[2,1-*b*][1,3]tiazino darinių sintezė bei jų struktūrinis modifikavimas. Heterocikliniai junginiai buvo suformuoti taikant ciklizacijos reakcijas iš atitinkamų alkinilimidazolų. Tolimesniuose etapuose junginiai buvo kryptingai funkcionalizuojami kuriant karbamatus, amidinius ir aminoalkilintus darinius. Tokia modifikacijų įvairovė leido praplėsti tiriamų junginių struktūrinę įvairovę ir sudaryti prielaidas jų biologinių savybių vertinimui.



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

Literatūros sąrašas:

1. M. G. Iadanza, M. P. Jackson, E. W. Hewitt, N. A. Ranson, S. E. Radford. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, **2018**, 19, 755–773.
2. X. Zhang, J. Liu, L. Huang, X. Yang, R. B. Petersen, Y. Sun, H. Gong, L. Zheng., K. Huan. *Prog. Biophys. Mol. Biol.*, **2016**, 124, 1-9.
3. I. Misiūnaitė, K. Mikalauskaitė, M. Paulauskaitė, R. Sniečkutė, V. Smirnovas, A. Brukštus, M. Žiaunys, I. Žutautė. *ACS Chemical Neuroscience*, **2024**, 15, 24, 4337-4591.

NAUJŲ BIPIRAZOLO IR PIRAZOL-PIRAZOLINO DARINIŲ SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAS

Simona Alesiūtė^{1*}, Miglė Dagilienė², Aurimas Bieliauskas², Algirdas Šačkus^{1,2}

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

²Sintetinės chemijos institutas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*simona.alesiute@ktu.edu

Bipirazolai ir pirazol–pirazolino dariniai priklauso azotą turinčių heterociklinių junginių klasei, pasižyminčiai didele struktūrine įvairove ir plačiu biologiniu aktyvumu, įskaitant priešvėžinį, antibakterinį bei priešuždegiminį poveikį [1]. Be to, šie junginiai pasižymi reikšmingomis fotofizinėmis savybėmis – jie tiriami kaip fluorescenciniai chemosensoriai metalų jonų aptikimui [2], naudojami organiniuose šviesos dioduose (OLED), kaip lazerinių medžiagų komponentai bei kaip potencialūs biožymekliai medicinoje [1,3]. Kai kurie dariniai taip pat pasižymi koroziją slopinančiomis savybėmis [4].

Šiame darbe sintetinti nauji bipirazolo ir pirazol–pirazolino dariniai iš chalkonų, taikant nukleofilinio prijungimo ir ciklizacijos reakcijas su hidrazinais. Kaip pradinė medžiaga naudotas 1-fenil-1*H*-pirazol-3-olis, iš kurio, atliekant alkilavimo, acilavimo, *Fries* persigrupavimo, *Vilsmeier–Haack* ir *Claisen–Schmidt* reakcijas, susintetinti atitinkami chalkonai. Išnagrinėtas tikėtinas reakcijos mechanizmas, aptariant galimus tarpinius junginius bei ciklizacijos eigą. Gauti junginiai identifikuoti spektroskopiniais (BMR, IR) bei spektrometriniais (HRMS) metodais, patvirtinant jų struktūrą ir grynumą. Vieno iš sintetintų junginių struktūra patvirtinta rentgeno struktūrinės analizės metodu (XRD), leidusiu tiksliai nustatyti molekulės erdvinę struktūrą. Atlikti gautų junginių fizikiniai tyrimai: UV absorbcijos, emisijos bei kvantinės išeigos skaičiavimai.

Literatūros sąrašas:

1. M. Oudi, M. Anary-Abbasinejad. *Synthetic Communications*, **2025**, 55.2: p. 146-151.
2. M. J. Huang ir kt. *Inorganic Chemistry Communications*, **2019**, 101: p. 121-124.
3. O. V. Barabash ir kt. *European Journal of Organic Chemistry*, **2024**, 27.1: p. e202301049.
4. I. Merimi ir kt. *International Journal of Corrosion and Scale Inhibition*, **2020**, 9.4: p. 1237-1260.

S-ALKILINTŲ 1,2,4-TRIAZOLŲ 2-AMINOPIRIDINO PAGRINDU ADMET SAVYBIŲ ANALIZĖ

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, savo struktūroje turintys azoto atomų penkianariuose ar šešianariuose žieduose, yra vieni dažniausiai aptinkamų fragmentų farmaciniuose preparatuose. Šiandieninėje vaistų kūrimo praktikoje heterociklinius fragmentus galima rasti daugiau nei 85 % biologiškai aktyvių cheminių junginių. Tokių struktūrų įtraukimas leidžia tikslingai modifikuoti tokius junginių parametrus kaip tirpumas, lipofiliškumas, poliškumas bei gebėjimas formuoti vandenilinius ryšius, taip optimizuojant vaistinių medžiagų ar jų kandidatų ADMET savybes [1]. Daug dėmesio yra skiriama 5-chlorpiridinui ir jo dariniams, kurie plačiai naudojami kaip pradinės struktūros kuriant naujus bioaktyvius junginius. Piridino žiedas pasižymi bazinėmis savybėmis, hidrofiliškumu, cheminiu atsparumu bei gebėjimu dalyvauti vandenilinių ryšių susidaryme, todėl yra svarbus užtikrinant efektyvią sąveiką su biologiniais taikiniai. 1,2,4-triazolo dariniai pasižymi plačiu farmakologinio aktyvumo spektru ir yra laikomi perspektyviais vaistinių medžiagų kandidatais. Jiems būdingos įvairios biologinės savybės, įskaitant analgezinį, antiseptinį, antimikrobinį, antioksidacinį, priešuždegiminį, priešvėžinį, antidiabetinį bei antimigreninį poveikį [2]. Pirolidono dariniai taip pat išlieka reikšmingi dėl plataus jų biologinio aktyvumo profilio. Šie junginiai plačiai tiriama kaip galimi antimikrobiniai, priešnavikiniai, priešuždegiminiai ir antivirusiniai agentai bei dėl jų gebėjimo selektyviai sąveikauti su konkrečiais biologiniais taikiniai [3].

Prieš sintetinant junginius, savo struktūroje turinčius 1,2,4-triazolo, piridino ir pirolidono fragmentus, buvo atliktas farmacinių savybių tyrimas pasitelkiant „AdmetLab 3.0“ programinę įrangą. Atlikus šių S-alkilintų junginių analizę buvo nustatyta, jog visų junginių molekulinė masė (MW) patenka į priimtina oralinio biologinio prieinamumo intervalą, o jos vertės yra nuo 419,12 iki 569,03. Šių junginių logP vertės yra nuo 3,113 iki 4,242, tai rodo vidutinį lipofiliškumą, kuris užtikrina gerą balansą tarp tirpumo vandenyje ir gebėjimo praeiti pro membranas. Junginių AMES vertės, kurios nurodo medžiagos gebėjimą sukelti mutacijas DNR grandinėje, yra žemos ir nerodo mutageninio poveikio potencialo.

Galima įžvelgti, kad ketinamų sintetinti junginių, savo struktūroje turinčių heterociklinius fragmentus, *in silico* ADMET analizė parodė, jog jie pasižymi tinkamomis farmakokinetinėmis savybėmis kaip potencialūs cheminiai preparatai.

Literatūros sąrašas

1. J. Jampilek. Heterocycles in Medicinal Chemistry, **2019** (24), 21, p. 3839.
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, p. 1592.
3. K. M. Pandya, P. S. Deasai. Design and Synthesis of 5-oxopyrrolidine-3 Carboxylic acid Derivatives as Potent Anti-inflammatory Agents, **2020** (13), 2, p. 1054-1062.

FENOKSIZINO IR FENTIAZINO PUSLAIDININKIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS

Skirmantas Musteikis*, Mantas Marčinskas, Tadas Malinauskas

Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*skirmantas.musteikis@ktu.lt

Saulės energetikai susilaukiant vis daugiau dėmesio ir investicijų, mokslininkai bando sukurti geresnes alternatyvas šiuo metu plačiausiai naudojamiems silicio saulės elementams. Silicio saulės elementų gamybos ir energijos sąnaudos yra didelės, todėl reikia naujos, ekonomiškesnės technologijos, kurios gamyba būtų pigesnė, paprastesnė ir ekologiškesnė. Vienas iš geriausių kandidatų yra perovskitiniai saulės elementai. Juos galima pagaminti pigiau, taikant paprastesnius gamybos metodus, o galutinis produktas pasižymi panašiu galios konversijos efektyvumu (ang. *power conversion efficiency*, PCE).

Kad perovskitiniai saulės elementai veiktų efektyviai, būtina turėti sluoksnius, kurie atskirtų perovskitiniame šviesos absorbente susidarančius teigiamus ir neigiamus krūvininkus. Medžiagos, pernešančios teigiamus krūvius, vadinamos skyles pernešančiomis medžiagomis (ang. *hole transporting materials*, HTM), paprastai riboja saulės elementų efektyvumą. Šiuo metu vienos iš perspektyviausių HTM, kurios gali sudaryti savitvarkį monosluoksnį (ang. *self-assembled monolayer*, SAM). Saulės elementų su SAM skyles pernešančiomis medžiagomis paprastai būna didelis efektyvumas, mažos HTM sąnaudos ir šios architektūros saulės elementai gali būti naudojami gaminant tandeminius fotovoltines paneles.

Šiuo metu plačiausiai yra išvystyta švino pagrindo perovskito technologija. Taip yra todėl, nes naudojant šviną yra gaunamas aukščiausias našumas ir stabilumas. Šiuos saulės elementus yra lengva pagaminti ir išbandyti, tad šiai perovskito kompozicijai buvo skirta daugiausia laiko ir tyrimų. Nors ši technologija yra gan išvystyta, galima iškart įžvelgti vieną didelę problemą – šviną. Siekiant išspręsti šią problemą yra vystoma alavo perovskitų technologija. Nors ši technologija yra sąlyginai jauna ir saulės elementai siekia tik apie ~16% PCE, lyginant su švino perovskito ~27% PCE, [1] naudojant alavo perovskitą yra išvengiama švino. Norint optimizuoti alavo saulės elementus neužtenka tik panaudoti jau egzistuojančias skyles pernešančias medžiagas, nes jos turi energetinius lygmenis, geometriją ir funkcines grupes, kurios yra suderintos su švino perovskitu. Tad siekiant priartėti prie alavo perovskito platesnio ir efektyvesnio panaudojimo yra svarbu susintetinti naujus junginius, kurie būtų suderinti su šio perovskito fizikinėmis ir cheminėmis savybėmis.

Šio projekto metu, bus siekiama padidinti alavo pagrindo perovskitinių saulės elementų efektyvumą ir pagerinti jų stabilumą. Kad pasiekti šiuos tikslus, bus bandoma sukurti naujus fenoksizino ar fentiazino centrinius fragmentus turinčius skyles pernešančius junginius, gebančius formuoti savitvarkį monosluoksnį, kartu panaudojant papildomas funkcines grupes, kurios galėtų sąveikauti ne tik su elektrodu, bet ir su perovskito sluoksniu.

Literatūros sąrašas:

1. Z. Xiong. Homogenized chlorine distribution for >27% power conversion efficiency in perovskite solar cells, **2025** (390), 638-642.

IMIDAZOL-2-TIOLIO DARINIŲ SINTEZĖ

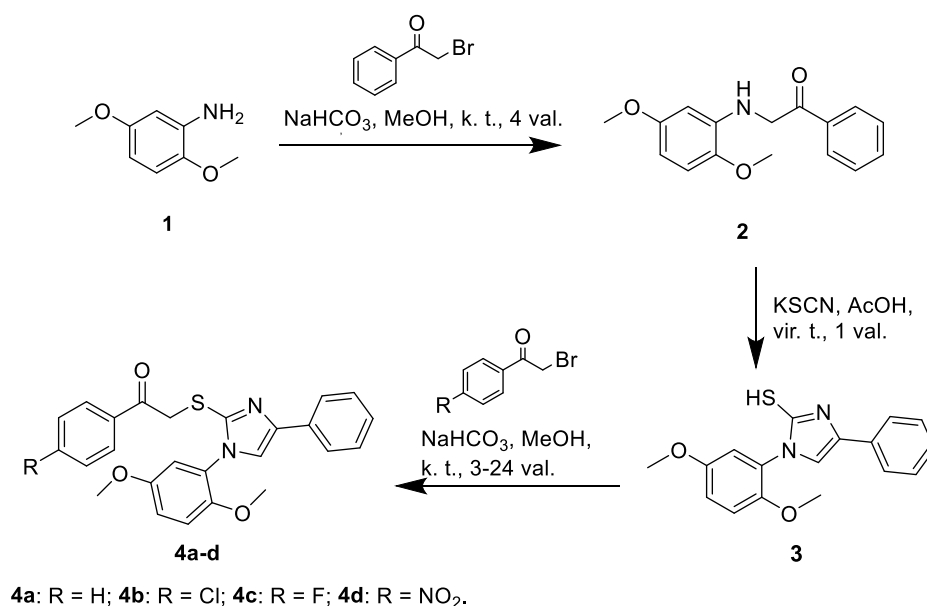
Tomas Tutkus*, Birutė Sapijaskaitė-Banevič

Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva
tomastutkus@ktu.edu

Imidazolas – dažnai gamtoje sutinkamas, penkianaris heterociklinis junginys, savo struktūroje turintis du azoto atomus. Imidazolo dariniai pasižymi antibakterinėmis, antivirusinėmis, priešuždegiminėmis, priešvėžinėmis, antifungicidinėmis savybėmis bei yra plačiai naudojami farmacijoje [1,2].

Šiame darbe tioimidazolo fragmentą turintis junginys 3 gautas iš 2,5-dimetoksianilino 1, jį veikiant 2-bromacetofenonu metanolyje kambario temperatūroje, esant natrio hidrokarbonato ir susidaręs aromatinis α -amino ketonas 2 toliau ciklizuoamas kalio tiocianatu, rūgštinėje terpėje.

Taip pat buvo iširtos 1-(2,5-dimetoksi)-4-fenil-1*H*-imidazol-2-tiolio (3) alkilimo reakcijos su įvairiais aromatiniais ketonais. Nustatyta, jog tioimidazolą 3 veikiant atitinkamais 2-bromacetofenonais metanolyje, esant natrio hidrokarbonato, susintetinti *S*-alkilinti imidazolo dariniai 4a-d.



1 schema. Imidazol-2-tiolio darinių 3–4a-d sintezė

Susintetintų junginių 2–4a-d struktūros patvirtintos ¹H ir ¹³C BMR spektroskopijos metodais.

Literatūros sąrašas:

- Serdaliyeva D., Nurgozhin T., et al. Review of pharmacological effects of imidazole derivatives, **2022** (19), 3, p. 11–15.
- Abdullah S., Ganguly S. An overview of imidazole and its analogues as potent anticancer agents, **2023** (15), 17, p. 1621–1646.P

INDOLO FRAGMENTĄ TURINČIŲ CIKLINIŲ DARINIŲ SINTEZĖ IR BIOLOGINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAI

Ugnė Babianskaitė^{1*}, Asta Žukauskaitė², Vilija Kederienė¹

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

² Cheminės biologijos katedra, Gamtos mokslų fakultetas, Palackio universitetas, Olomouc, Čekijos Respublika
**ugne.babianskaite@ktu.lt*

Indolo dariniai yra plačiai paplitę gamtoje, pavyzdžiui, alkaloiduose, kurie dažniausiai ir plačiausiai aptinkami mikromicetuose, tačiau pasireiškia ir kituose mikroorganizmuose, tokiuose kaip bakterijos [1-2]. Indolo fragmentą turintys alkaloidai pasižymi plačiu biologinio aktyvumo spektru, apimant citotoksiškumo, antibakterinį, priešgrybelinį, priešmaliarinį, antivirusinį ir kitus poveikius [1-3]. Žinomi ir sintetinį indolo pagrindą turintys dariniai, įeinantys į tokių plačiai žinomų vaistų sudėtį, kaip roksindolas, ondansetronas, delaviridinas ar indalpinas [3]. Diazepino dariniai taipogi pasižymi įvairiomis biologinio aktyvumo savybėmis, dėl kurių yra plačiai taikomi medicininėje chemijoje gaminant anksiolitikus, miorelaksantus, prieštraukulinius vaistus ir kt [4]. Atsižvelgiant į tai, naujų diazepinindolo darinių konstravimas yra nauja ir perspektyvi tyrimų kryptis, leidžianti išplėsti biologiniu poveikiu pasižyminčių junginių biblioteką bei tirti šių junginių potencialą medicininėje chemijoje.

Šio darbo tikslas – pritaikius paladžio katalizuojamas kryžminimo jungimo reakcijas sintetinti naujus indolo fragmentą turinčius junginius ir ištirti jų biologinį aktyvumą.

Tarpiniai junginiai, naudojant rinkoje prieinamus reagentus, buvo sintetinti iš indolkarboksilato darinių, atliekant alkilavimo reakcijas pagal žinomus sintezės metodus. Toliau atliekant ciklizacijos ir halogenavimo reakcijas, gauti indolo dariniai, turintys sudėtyje diazepino žiedą. Galutiniai produktai gauti atliekant paladžio katalizuojamas kryžminimo jungimo reakcijas. Darbo metu, taip pat nustatytas susintetintų indolo darinių biologinis aktyvumas.

Padėka. Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (LMTLT) lėšomis, projekto Nr. S-ST-25-70.

Literatūros sąrašas:

1. S. M. Umer, M. Solangi, K. M. Khan, R. S. Z. Saleem. Indole-Containing Natural Products 2019–2022: Isolations, Reappraisals, Syntheses, and Biological Activities, **2022** (27), 21, p. 7586.
2. S. M. Li. Prenylated indole derivatives from fungi: structure diversity, biological activities, biosynthesis and chemoenzymatic synthesis, **2010** (27), 1, p. 57-78.
3. P. Kumar, M. I. Ahma, S. Singh, M. R. F. Pratam, A. K. Mishra. Recent advancements on biological activity of indole and their derivatives: A review, **2022** (46), 3, p. 1.
4. E. Batlle, E. Lizano, M. Viñas, M. D. Pujol. 1,4-Benzodiazepines and New Derivatives: Description, Analysis, and Organic Synthesis. IntechOpen, London, **2019**, p. 1-24.

TRETINIŲ AMINŲ PAGRINDO HSP90 SLOPIKLIŲ SU CHLORREZORCINOLIO FRAGMENTU SINTEZĖ

Ugnius Popovas*, Ieva Žutautė

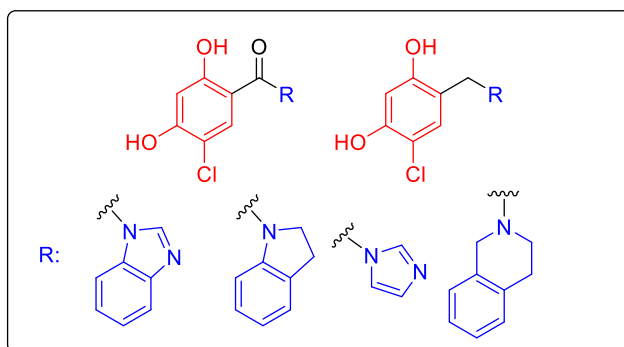
Chemijos institutas, Vilniaus universitetas, Vilnius, Lietuva

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

HSP90 (*angl. Heat shock protein 90*) – tai itin konservatyvūs 90 kDa molekulinės masės šaperonai, kurie įprastomis sąlygomis sudaro 1–2 % visų ląstelės baltymų. Veikdami kartu su kitais košaperonais, jie užtikrina teisingą baltymų susilankstymą, denatūruotų struktūrų stabilizavimą bei transportą reaguojant į stresą [1]. HSP90 slopikliai yra ypač reikšmingi vėžio terapijoje: slopinant šį baltymą, sutrikdomas onkogeninių klientinių baltymų stabilumas, skatinama jų degradacija, o užląstelinių HSP90 slopinimas leidžia efektyviai stabdyti metastazavimo procesus [2].

Analizuojant gamtinius slopiklius nustatyta, kad rezorcinolio fragmentas yra esminis N-galo domeno slopinimui [3]. Rezorcinolio hidroksigrupės suformuoja vandenilinius ryšius su HSP90 amino rūgščių liekanomis bei vandens molekulėmis [4], o šis procesas tiesiogiai sutrikdo vėžinių ląstelių dauginimąsi ir klientinių baltymų brendimą [5]. Pastebėta, kad šalia rezorcinolio farmakoforo esantis papildomas aromatinis žiedas padeda dar geriau įtvirtinti slopiklį ATP kišenėje per π - π sąveikas [6].

Norint pašalinti dabartinių HSP90 slopiklių trūkumus, bendradarbiaujant su Biotermodinamikos ir vaistų tyrimų skyriaus (GMC) mokslininkais buvo pasirinkta strategija modifikuoti rezorcinolio farmakoforą. Darbo metu rezorcinolio fragmentas papildomas naujomis metilamino ir amido funkcinėmis grupėmis, kurios parinktos remiantis literatūroje aprašytų analogų analize.



1 pav. Tikslinės, HSP90 baltymo slopiklių, struktūros.

Literatūros sąrašas:

1. B. Chen, D. Zhong, ir A. Monteiro. BMC Genomics, **2006** (7), 1, p. 156.
2. S. K. Calderwood. Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences, **2018** (373), 1738, p. 20160524
3. J. Dernovšek ir T. Tomašič. Pharmacology and Therapeutics, **2023** (245), p. 108396.
4. X. L. Xu ir kt. Scientific Reports, **2016** (6), 1, p. 19004.
5. C. Prodromou, S. M. Roe, R. O'Brien, J. E. Ladbury, P. W. Piper, ir L. H. Pearl. Cell, **1997** (90), 1, p. 65–75.
6. M. Ardestani, Z. Khorsandi, F. Keshavarzipour, S. Iravani, H. Sadeghi-Aliabadi, ir R. S. Varma. Pharmaceutics, **2022** (14), 10, p. 2220.

Polymer Chemistry and Technology

Polimerų chemija ir technologija

ALGINATE AND METHYL CELLULOSE BASED HYDROGEL INTEGRATION WITH POLYMERIC SCAFFOLDS FOR IN VITRO JOINT MODELING

Aleena Ijaz^{*}, Edvinas Krugly

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

^{*} aleena.ijaz@ktu.edu

Osteoarthritis is one of the most common and painful joint diseases and is characterized by inflammation, tissue level interactions, and progressive biomechanical degradation of cartilage [1,2]. Conventional in vivo and simplified in vitro models do not adequately reproduce the combined structural, mechanical, and biochemical complexity of joint tissues [3]. The aim of this research was to evaluate hydrogel systems for integration with polymeric scaffolds in the development of an in vitro joint model. Poly(ϵ -caprolactone) scaffolds were fabricated using melt electro writing to obtain controlled pore architecture and fiber alignment. These scaffolds were used as structural supports for hydrogel integration. Alginate based hydrogels were prepared by ionic crosslinking with calcium chloride [4], and the effects of alginate concentration and crosslinking time on gel formation, shape stability, porosity, and compatibility with the scaffold structure were investigated. Although concentration dependent differences in morphology were limited, hydrogel hardness increased with increasing alginate concentration. The interaction between alginate hydrogels and the polymeric scaffolds showed that these systems could be combined under stable conditions, indicating their suitability for hybrid scaffold-hydrogel constructs. In parallel, methyl cellulose-based hydrogels were prepared by thermal gelation using three viscosity grades, MC 15, MC 400, and MC 1500. Different concentrations were screened to obtain reproducible gels and evaluate their suitability for scaffold integration. In contrast to alginate, these gels showed insufficient mechanical stability and poor water absorption behavior, which limited their ability to form stable integrated systems with the polymeric scaffolds. The hydrogel-scaffold systems were characterized by optical microscopy, scanning electron microscopy, and ImageJ based image analysis to assess morphology, pore structure, and interface formation. Fourier transform infrared spectroscopy was used to confirm hydrogel crosslinking, while X-ray diffraction was used to evaluate crystallinity and structural features. The results showed that hydrogel composition strongly influences not only gel properties but also the quality of scaffold integration. Overall, alginate-based hydrogels demonstrated better compatibility with the polymeric scaffolds than methyl cellulose systems and appear more promising for the development of hybrid in vitro joint models. These scaffold-hydrogel systems may provide a more representative platform for studying tissue interactions in osteoarthritis than conventional single material models.

References:

1. Goldring, M. (2000). The role of the chondrocyte in osteoarthritis. *Arthritis & Rheumatism*.
2. Lee, A. S., Ellman, M. B., Yan, D., Kroin, J. S., Cole, B. J., van Wijnen, A. J., & Im, H. J. (2013). A current review of molecular mechanisms regarding osteoarthritis and pain. *Gene*, 527(2), 440-447.
3. Rajan, M. (Ed.). (2021). *Functional nanomaterials for regenerative tissue medicines*. CRC Press.
4. Shan, Y., Li, C., Wu, Y., Li, Q., & Liao, J. (2019). Hybrid cellulose nanocrystal/alginate/gelatin scaffold with improved mechanical properties and guided wound healing. *RSC advances*, 9(40), 22966-22979.

EXPERIMENTAL VALIDATION OF THEORETICAL CHARACTERISTICS OF NOVEL METAL-FREE EMITTERS GENERATED USING RPA TECHNOLOGY

Augustas Kristutis*, Audrius Bučinskas, Oleksandr Bezikonnyi

¹Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

* augustas.kristutis@ktu.lt

In recent years, the use of artificial intelligence has become a staple in everyday tasks for almost everyone. Slowly but surely, it is making its way into the scientific field as many different large language models allow deep dives into research topics that are of interest to the user. The growing popularity of various tools, such as GP-MoLFormer [1] and Chemformer [2], reflects their ability to automate tasks, save time, and improve convenience, thereby increasing the efficiency of scientific research, including chemistry and material sciences. One of the major challenges in organic optoelectronics is the limited operational stability of blue-emitting organic light-emitting diodes (OLEDs), whose lifetime is approximately 5–7 times shorter than that of their analogous green- or red-emitting counterparts [3,4]. Although OLEDs comprise multiple functional layers based on different organic semiconducting materials, the present study is focused exclusively on the emissive layer.

This study aims to apply Robotic Process Automation (RPA) technology and combinatorial screening to generate a list of organic molecules combined with quantum-chemical calculations for each generated structure. Data was used to predict potential emitters, select and synthesize them, and finally measure and compare their experimental photophysical and electrochemical properties with respective theoretical results. The key properties of the analysis are the excited singlet-triplet states (S1, T1) and the HOMO/LUMO energy levels. The following four structures were selected from the generated library for synthesis and analysis:

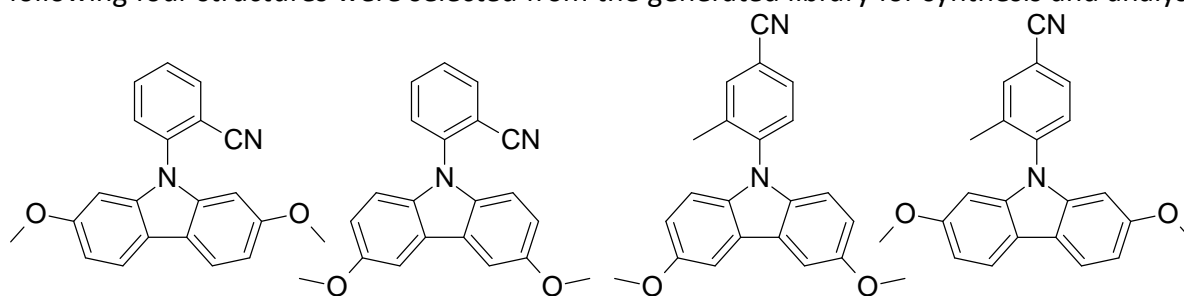


Fig. 1. Structures generated using RPA technology

The principles of the molecules generation process, theoretical simulations, synthesis, and comparison of theoretical and experimental approaches will be presented.

References:

- ROSS, J. et al. GP-MoLFormer: a foundation model for molecular generation. **2025**. Vol. 4, no. 10.
- IRWIN, R. et al. Chemformer: a pre-trained transformer for computational chemistry. **2022**. Vol. 3.
- SWAYAMPURABHA, S.S. et al. Approaches for Long Lifetime Organic Light Emitting Diodes. **2021**. Vol. 2002254, p. 1–29.
- MONKMAN, A. Why Do We Still Need a Stable Long Lifetime Deep Blue OLED Emitter? **2022**. p. 20463–20467.

RESEARCH ZEIN FIBROUS SCAFFOLDS FOR FUTURE CULTURED MEAT APPLICATION

Bramos Murthy^{*}, Eidvyle Gasiulyte, Darius Ciuzas, Ingrida Pauliukaityte, Edvinas Krugly

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

^{*} bramos.murthy@ktu.edu

The need for sustainable alternative protein has increased, with one such prominent alternative source being cultivated meat. It is referred to as the replacement for conventional animal farming. Edible scaffolds that mimic the extracellular matrix for supporting the growth of animal cells in a 3D environment are crucial for the development of cultivated meat. It is safe to be eaten by people, yet it's large scale production remains a challenge [1]. The study is related to the electrospinning of biopolymeric fibres, which involves using zein as raw material. Zein is a hydrophobic protein, which is a product of hydrolysed maize. Zein is a good candidate for scaffolds in foods since it is non-allergenic, can form films, and has GRAS (generally recognized as safe) status [2]. The experimental solutions were prepared by dissolving zein (25 w/v), along with several additives like polyethylene oxide, NaCl, glucose, and glycerol, in varying volumes of ethanol-water ratios.

Subsequently, electrospinning was performed in an environmental condition of 24°C, 38 percent relative humidity (approx), applied voltage of 14 kV. The processing parameters and the solution composition were changed to figure out their influence on the resulting fibre morphology and its spinnable nature. Then the SEM analysis was conducted, which showed the solution composition of 70:30 v/v ethanol-water ratio, and operating conditions of 6 ml/h flow rate and a needle to collector distance of 10 cm gave homogeneous fibres with a diameter of 139 µm with minimal bead formation and lower dripping of solvent.

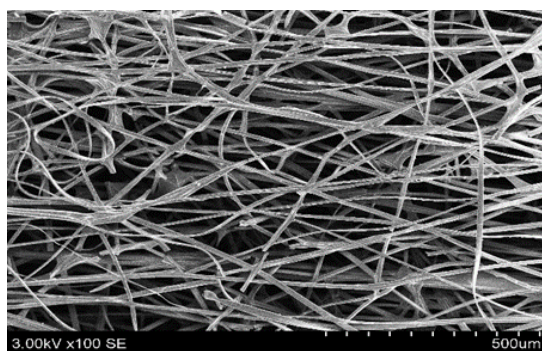


Fig. 1. SEM view of electrospun zein polymeric fibres (70:30 v/v ethanol-water ratio).

The experimental results revealed that the electrospinning zein-based scaffolds have a good fibre morphology. Further studies on enhancing its mechanical properties and biocompatibility experiments using cell culture will be performed. Therefore, currently this procedure proves to be a prominent, scalable and low-cost way to make scaffolds for artificial meat [3].

References:

1. S.C.P. Norris, et al. *Annual Review of Food Science and Technology*, **2024**, Vol. 15, p. 51–73.
2. F.A. Momany, et al. Willett. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **2006**, Vol. 54(2), p. 543–547.
3. D. Jeong, G. Jang, W.K. Jung, et al. *npj Science of Food*, **2024**, Vol. 8, p. 13.

DEVELOPMENT AND INVESTIGATION OF VITRIMERS SYNTHESIZED FROM BIO-BASED MONOMERS

Aysu Nasiribouyony^{*}, Jolita Ostrauskaitė, Sigita Grauželiene

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

^{*} aysu.nasiribouyony@ktu.edu

Bio-based polymers have been extensively investigated as promising alternatives to petroleum-based polymers owing to their high performance, recyclability, biodegradability, and low CO₂ emissions [1]. Vitrimers are dynamic associative covalent adaptable networks (CANs) whose crosslinks undergo exchange reactions at elevated temperatures, allowing reorganization of the polymer network without altering the crosslink density [2]. Hence, bio-derived vitrimers are promising candidates for use in coatings, adhesives, and the automotive sector due to their malleability, self-healing properties, recyclability and reprocessability [3].

In this study, vitrimers were synthesized via photopolymerization of resin formulations incorporating bio-based monomers, with ethyl(2,4,6-trimethylbenzoyl) phenylphosphinate acting as the photoinitiator. Real-time photorheometry was employed to investigate photocuring kinetics and the role of monomer content. After the vitrimer structure was confirmed by FT-IR spectroscopy and Soxhlet extraction, the thermal and mechanical properties of the materials were investigated by thermogravimetric analysis, dynamic thermomechanical analysis, and tensile testing.

The obtained results showed that the initial resin formulation significantly affected the photocuring behavior and the rheological, thermal, and mechanical performance of the vitrimers. Photocuring kinetics revealed that the monomer ratio in the formulations influenced the induction period, gelation time, and viscosity, but had only a minor effect on the storage modulus. Vitrimers synthesized from aromatic ring-containing monomers exhibited enhanced stiffness. The improvement in mechanical properties after self-welding at elevated temperatures highlights the reparability of the vitrimers, as dynamic bond exchange is activated by heat, enabling network rearrangement and mechanical recovery. In addition, the selected vitrimer demonstrated effective shape-memory behavior, showing temporary shape stability and complete recovery of its original shape upon heating.

Acknowledgement. This research was funded by the Research Council of Lithuania (project No. S-MIP-25-3).

References:

1. C. Shi, Y. Ge and E. Y.-X. Chen. *Designing truly sustainable polymers through an integrated three-pillar framework*, **2025**, 8(11), 101517.
2. A. V. Karatrantos, O. Couture, C. Hesse and D. F. Schmidt. *Molecular simulation of covalent adaptable networks and vitrimers: A review*, **2024**, 16(10), 1373.
3. V. R. Madduluri et. al. *Recent Advances in Vitrimers: A Detailed Study on the Synthesis, Properties and Applications of Bio-Vitrimers*, **2025**, 33, p. 301-322.

MOLECULARLY IMPRINTED NANOFILM POLYPYRROLE FOR THE DETECTION OF MACROMOLECULES

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

¹Department of Nanotechnology, Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania.

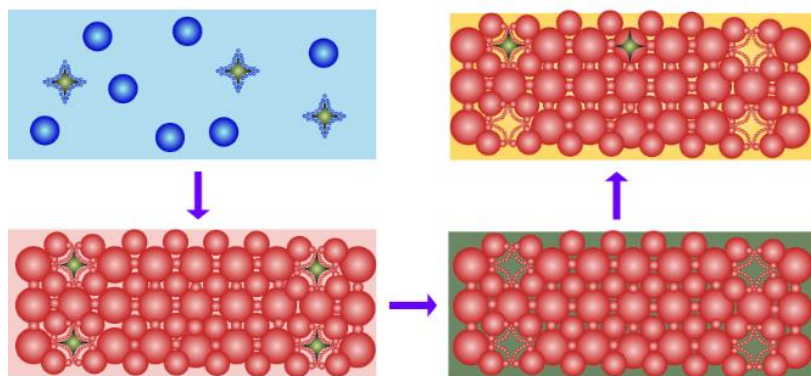
²Department of Electrochemical Material Science, Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania.

³Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry and Geoscience, Vilnius University Vilnius, Lithuania.

*artem.yerniazov@ftmc.lt

Molecularly imprinted polymers (MIPs) are reliable, selective, and sensitive synthetic sensors comparable to biological recognition elements for protein sensing. The development of MIPs for large protein targets is challenging due to their size [1]. Here, an impedimetric sensor based on a polypyrrole (PPy) nanofilm deposited on a glassy carbon electrode (GCE) is proposed for the detection of BSA at the attomole level.

Imprinting is performed by cyclic voltammetry by polymerizing monomers in the presence of the hard template. Polymerization kinetically arrests the monomer–template binding equilibrium at the electrode interface [2]. Subsequent detergent-based passive extraction produces structurally and chemically complementary binding sites to the template molecule, functioning as synthetic receptors. The analytical response is primarily governed by modulation of the charge-transfer resistance (R_{ct}) between the MIP-modified electrode and redox probe.



Scheme [1]: Pre-polymerization solution (blue rectangle) has monomer molecules (blue spheres) binding and rebinding the template (green star) in equilibrium. During polymerization (red rectangle), the monomer-template complex guides the polymer formation (red spheres). The template is then extracted (green rectangle). In the rebinding solution (yellow box), analytes bind specifically and non-specifically to complementary cavities [3].

References:

1. E. Brazys, V. Ratautaite, E. Mohsenzadeh, R. Boguzaitė, A. Ramanaviciute, A. Ramanavicius. *Advances in Colloid and Interface Science*, **2025**,337, p. 103386.
2. G. Zvirzdine, S. Zukauskas, A. Rucinskiene, E. Mohsenzadeh, R. Boguzaitė, A. Ramanaviciene, M. Pogorielov, V. Ratautaite, A. Ramanavicius. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **2025**,17, p. 57475–57485.
3. E. Mohsenzadeh, V. Ratautaite, E. Brazys, S. Ramanavicius, S. Zukauskas, D. Plausinaitis, A. Ramanavicius. *Trends in Analytical Chemistry* **2024**, 171, 117480.

ADVANCING TETRACYCLINE DETECTION THROUGH POLYDOPAMINE-BASED MOLECULARLY IMPRINTED ELECTROCHEMICAL SENSORS

Danish Khalid ^{1*}, Ernestas Brazys^{1,2}, Vilma Ratautaitė², and Arūnas Ramanavičius^{1,2}

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

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

* danish.khalid@chgf.stud.vu.lt

Tetracycline (TC) is an extensively used antibiotic that may cause environmental and biological hazards due to its partial metabolism and significant excretion into the environment. This highlights the need for rapid and accurate detection techniques [1]. Electrochemical sensors provide advantages, including fast response, low cost, and ease of use. Molecularly imprinted polymers (MIPs) are a polymer-based recognition system, fabricated using a template molecule and functional monomer, to create specific recognition sites, facilitating a selective target capture through molecular interactions [2]. Therefore, this work presents a PDA-based molecularly imprinted nanoparticle (MIP/PDA/SPCE) combined with screen-printed electrodes (SPCEs) for the detection of TC.

Initially, MIP and NIP Polydopamine nano particles synthesized through aqueous oxidative self-polymerization of dopamine in the presence and absence of TC template, followed by template removal using an ethanol-acetic acid mixture (9:1, v/v). The synthesized nanoparticles were deposited onto the SPCE through multiple surface modification strategies, such as direct drop-casting and underlayers surface modification with electrochemically deposition of dopamine HCl, PEDOT: PSS, along with solvent/binder-mediated nanoparticles stabilization systems to improve adhesion and sensor performance. Electrochemical characterization using cyclic voltammetry (CV) and electron impedance spectroscopy (EIS) showed that the PDA underlayer in phosphate buffer (pH 7.4) exhibited the optimal sensor stability and selectivity. The MIP-functionalized electrodes showed a marked concentration-dependent increase in ΔR_{ct} relative to NIP controls across a broad TC concentration range (0.01–100 μM), validating successful template recognition within imprinted cavities. Conversely, PEDOT: PSS-based systems exhibited poor impedance behavior due to high conductivity, and binder-assisted systems showed limited reproducibility. Overall, this study demonstrates a stepwise optimization strategy leading to a stable, reproducible, and highly selective PDA-based MIP sensor for reliable TC detection.

Acknowledgements. This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. S-LL-25-3.

References:

1. L. Wang, J. Hu. *Microchemical Journal*, **2024**, 207, 111809.
2. Q. Cheng, T. Abdiryim. *International Journal of Biological Macromolecules*, **2024**, 281, 136468
3. A. G. Ayankojo, J. Reut. *Talanta*, **2020**, 209, 120502.
4. S. A. Zaidi. *ChemistrySelect*, **2019** (17), 4, 5081–5090.

DEVELOPMENT OF ELECTROSPUN COLLAGEN-BASED SYSTEM ENRICHED WITH BIOACTIVE COMPOUNDS

Ugnė Zasčiurinskaitė^{*}, Erika Adomavičiūtė, Virginija Jankauskaitė

Faculty of Mechanical Engineering and Design, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

^{*} ugne.zaschiurinskaite@gmail.com

Acne is a chronic inflammatory skin disorder associated with overproduction of sebum and bacterial colonization. Acne medications may cause side effects, such as erythema, skin dryness, and irritation [1]. Furthermore, there is an increasing demand for natural and effective cosmetic products that do not contain irritating chemical substances [2]. Collagen is widely used in the cosmetic industry due to its hydrating and skin regenerating properties. Herbal extracts can be incorporated into skincare formulations for bioactive compounds including anti-inflammatory, antioxidant and antimicrobial properties [3]. This research aims to develop porous nano/microfiber sheets from rabbit collagen (RC), polyvinylpyrrolidone (PVP), PVP solutions enriched with extracts of yarrow (*Achillea millefolium*) (PVP/Ach) and St. John's wort (*Hypericum perforatum*) (PVP/Hyp). RC solution was prepared by dissolving collagen granules in an acetic acid–water mixture, while the PVP solution (10 wt%) was prepared by dissolving PVP granules in ethanol. PVP/Ach (1.2 wt%) and PVP/Hyp (1.5 wt%) formulations were prepared by first obtaining ethanolic extracts from dried plant materials, which were subsequently incorporated into the PVP solution. Coaxial electrospinning was employed to produce nano-/microfiber mats. Pure RC solution exhibited limited electrospinnability, resulting in the formation of uniaxial nano/microfibers with a broad diameter distribution (up to 500 nm). In the case of core–shell RC/PVP nano/microfibers, the electrospinning process exhibited improved stability and reduced fiber diameters, with approximately 50% of the fibers falling within diameter range below 100 nm. For PVP/Ach-RC composition, 53% of the fibers were distributed below 200 nm, whereas in the PVP/Hyp-RC system, 37% of the fibers had diameters below 300 nm.

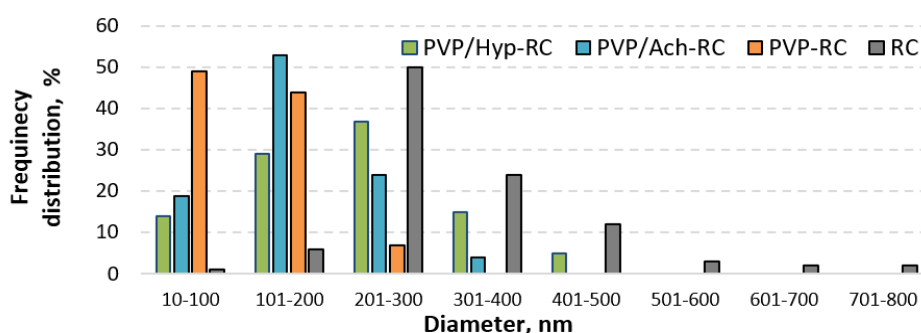


Fig. 1. Diameter of nano/microfibers of electrospun collagen systems

The formation of collagen–based core fibers surrounded by PVP or PVP/herbal extract shells significantly enhanced electrospinnability, resulting in reduced fiber diameters and a narrower diameter distribution.

References:

1. A.K. Leung, et al. *Drugs in Context*, **2021**, 10. DOI: 10.7573/dic.2021-8-6.
2. P. Ratajczak, et al. *Cosmetic and Investigational Dermatology*, **2023**, 16. DOI: 10.2147/CCID.S411032.
3. J.K. Liu. *Natural Products and Bioprospecting*, **2022**, 12. DOI: 10.1007/s13659-022-00363-y.

INFLUENCE OF POLYANILINE ON CONDUCTIVITY AND DRUG RELEASE FROM ALGINATE-BASED HYDROGEL

Shahbaz Khan, Šarūnas Žukauskas

Department of Nanotechnology, Center for Physical Sciences and Technologies

Sodium alginate-based hydrogels are popular for drug delivery due to their biocompatibility and high water retention. However, they lack electrical conductivity, limiting their use in electroactive environments. This study developed a composite of sodium alginate and PANI to explore its electrical properties and drug release. Polyaniline was integrated into sodium alginate via in situ polymerization of aniline with ammonium persulfate as the oxidant, and crosslinked with calcium ions using calcium chloride. Methylene blue served as a drug model for release testing. In phosphate-buffered saline, dye release depended on concentration: low methylene blue levels resulted in minimal release due to electrostatic and pi-pi interactions in the dense network. Higher dye concentrations led to diffusion-controlled, sustained release fitting the Higuchi model with $R^2 \approx 95$ over 48 hours. Electrical conductivity, measured by the four-probe method, increased significantly with more PANI, rising over two orders of magnitude at higher PANI contents. These findings show that polyaniline crucially influences conductivity and passive drug release in alginate hydrogels, underscoring their potential in drug delivery systems. The increased conductivity indicates promise for controlled release applications with further optimization.

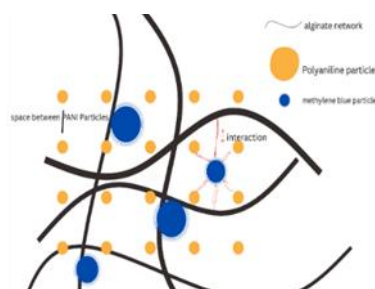


Fig. 1. Hydrogel with discontinuous PANI chains

Figure 1, a schematic illustration shows the structure of Sodium Alginate chains with discontinued Polyaniline chains and the entrapped Methylene blue, which ultimately leads to very low conductivity.

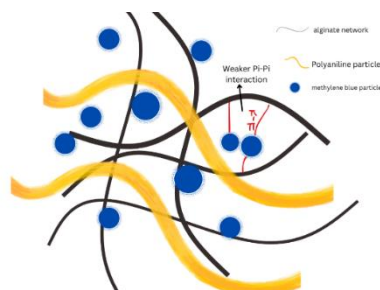


Fig. 2. Hydrogel with continuous PANI chains

Figure 2, a schematic illustration shows the structure of Sodium Alginate in the presence of PANI continuous chains with in situ entrapment of methylene blue.

ENHANCED ANTIOXIDANT ACTIVITY OF CHITO-OLIGOSACCHARIDES VIA FORMATION OF SECONDARY PRODUCTS DURING ACIDIC HYDROLYSIS

Viktorija Juščenko*, Tatjana Kavleiskaja

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

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

The antioxidant activity of native chitosan is a well-established fact [1]. Nonetheless, it can be significantly enhanced by chemical modification and hydrolysis. Acidic hydrolysis is a simple and efficient method for the production of chito-oligosaccharides (COS) [2]. The resulting products are more soluble in water, flexible and improved accessibility to reactive oxygen species compared to commercially available chitosan [3]. Therefore, the aim of this study was to investigate the antioxidant activity of chitosan acidic hydrolysis products. The study included reaction optimization, purification, structure analysis, and antioxidant activity determination by the DPPH• scavenging method. A series of COS-1 and COS-3 samples were obtained at 6 M of hydrochloric acid (HCl) at 70°C temperature for 2 hours, whereas COS-2 samples were hydrolyzed at 3 M of hydrochloric acid under the same conditions. Before the fractionation on a preparative column, hydrolysates were neutralized to pH 4–5. Additionally, COS-2 and COS-3 samples were concentrated at 35°C temperature under reduced pressure (20 mbar). The presence of free amino groups in chitosan/COS allows them to act as amino group donors in the Maillard reaction. Moreover, COS containing hemiacetal groups terminal on the chain, which act as carbonyl group donors. Therefore, under favorable conditions during the concentration step, this may lead to the formation of imine structures between different parts of the chitosan/COS chains, particularly in COS-2 and COS-3 samples. The antioxidant activity of COS-2 and COS-3, as expected, was higher than that of native chitosan or COS without modification (Fig. 1). This enhancement can be attributed to the formation of imine groups during the concentration step. Accordingly, the antioxidant activity of COS was found to depend on the content of imine structures in the samples, with COS-3 exhibiting the highest activity among the studied systems.

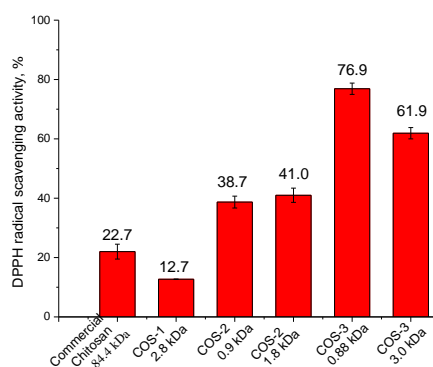


Fig. 1. The antioxidant activity of commercial chitosan, COS-1 with M_n 2.8 kDa, COS-2 with M_n 0.90 and 1.8 and COS-3 with M_n 0.88 and 3.0 kDa. Concentration of sample is 0.2 mg/ml.

References:

1. S. Petroni, I. Tagliaro et al. *Mar. Drugs*, **2023** 21(3), p. 147.
2. A. Singh, A. Mittal, S. Benjakul. *Food Reviews International*, **2023** 39(4), p. 2297–2319.
3. N. Tabassum, S. Ahmed, M. A. Ali. *Carbohydrate Polymers*, **2021**, 261 p. 117882.

STUDY OF THIN 3D PRINTED POLYMER LAYER INTERACTIONS WITH SOLVENTS BY THE QCM AND ELECTROCHEMICAL METHODS

Rytis Biveinis^{*}, Deivis Plaušinitis

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

^{*} rytis.biveinis@chgf.stud.vu.lt

Nowadays, additive manufacturing technologies are increasingly used in industry and chemistry, from simple laboratory containers to more complex microfluidic systems and electrochemical sensor components [1,2]. 3D printing allows fast and relatively low-cost fabrication of customized structures that can be adapted for specific experimental needs [1]. Polymers are commonly used, but their chemical resistance is not always sufficient when working with different solvents [3]. Because of their layered structure and possible porosity, 3D printed polymers can be sensitive to organic solvents. This may lead to swelling, partial dissolution, or structural degradation. For this reason, it is important to evaluate how such materials behave in commonly used solvents. The aim of this work was to investigate the resistance of selected photopolymer resins to acetonitrile and methanol solutions and to evaluate their suitability for applications. The influence of solvents were analyzed on 3D printed containers using electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and cyclic voltammetry (CV), as well as quartz crystal microbalance (QCM) measurements to study the interaction of thin films with solvents. The results showed that different resins exhibit different levels of resistance, and the observed changes in frequency or impedance indicate possible swelling or mass loss processes.

References:

1. B. C. Gross et al. *Evaluation of 3D Printing and Its Potential Impact on Biotechnology and the Chemical Sciences Analytical Chemistry (ACS)*, **2014**, 86(7), 3240-3253.
2. A. Ambrosi et al. *3D-Printing Technologies for Electrochemical Applications*. *Chemical Society Reviews (RSC)*, **2016**, 45(10), 2740-2755.
3. S. Waheed et al. *3D Printed Microfluidic Devices: Enablers and Barriers. Lab on a Chip (RSC)*, Vilnius, Lithuania, **2016**, 16(11), 1993-2013.

MOLECULARLY IMPRINTED CONDUCTING POLYMER–HYDROGEL COMPOSITES FOR TETRACYCLINE LOADING AND ELECTRO-RESPONSIVE DRUG DELIVERY

Samuel A. Kosoko^{1,2*}, Ernestas Brazys^{1,2}, Vilma Ratautaite² 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@chgf.stud.vu.lt*

Precise, on-demand drug delivery remains a critical challenge in modern therapeutics, particularly for localized treatments requiring high loading efficiency and spatiotemporal control. Electronic drug delivery systems (EDDS) based on electroactive materials offer programmable release profiles; however, their practical application is often limited by insufficient drug loading capacity and poor mechanical compliance. In this work, we report the development of a molecularly imprinted conducting polymer–hydrogel composite designed to address these limitations and enable electrically tunable drug delivery.

Polypyrrole (PPy) was incorporated at varying concentrations (0–2%) into a hydrogel matrix, with molecular imprinting introduced to enhance selective tetracycline recognition. Drug loading was quantified using UV–Vis spectroscopy at 360 nm, while swelling behaviour was evaluated to elucidate structure–property relationships.

The composites exhibited reproducible tetracycline adsorption, with loading strongly dependent on PPy content. A low PPy concentration (0.2%) produced the highest adsorption capacity ($\approx 381 \mu\text{g g}^{-1}$), attributed to enhanced π – π and electrostatic interactions between tetracycline and the conducting polymer. In contrast, higher PPy contents ($\geq 0.4\%$) resulted in reduced drug loading, correlating with decreased swelling ratios and increased network rigidity. Swelling systematically decreased from 84.1% for the PPy-free hydrogel to 71.3% at 2% PPy, highlighting the trade-off between binding selectivity and hydrogel permeability.

These results demonstrate that careful optimization of conducting polymer content is essential to maximize drug loading while maintaining favourable hydrogel swelling properties. The presented molecularly imprinted PPy–hydrogel platform shows strong potential for integration into electroceutical systems, enabling high drug loading combined with electrically controlled, on-demand release.

Acknowledgement. This project has received funding from the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No. S-LL-25-3.

References

1. R. Liu, A. Poma. *Molecules*, 26(12), **2021**, 3589.
2. J. Abdel Aziz, J. Gladisch, S. Griggs et al. *Journal of Materials Chemistry B*, 12(16), **2024**.

TRAŠŲ TIRPUMUI REGULIUOTI SKIRTŲ DANGŲ GAVIMAS IR SAVYBĖS

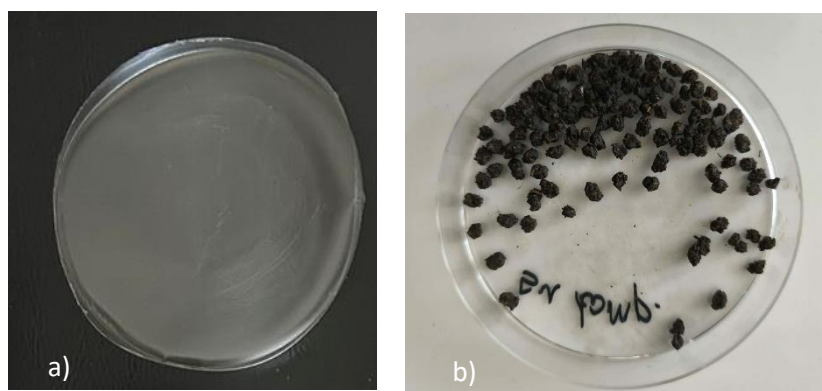
Laurynas Lukomskis*, Rasa Šlinkšienė

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

* *laurynas.lukomskis@ktu.edu*

Trąšos, kaip pagrindinis augalų ir dirvožemio maisto medžiagų šaltinis, yra esminis faktorius, skirtas derlingumui didinti [1]. Deja, mineralinių trąšų naudojimas augalams yra nepakankamai efektyvus, nes dėl vykstančio garavimo, reakcijų su dirvožemyje esančiais organiniais junginiais bei išplovimo, absorbuojama tik apie trečdalis trąšose esančių augalų maisto medžiagų. Vienas perspektyviausių būdų spręsti šias problemas – lėto ir reguliuojamo veikimo trąšos, kurios leidžia efektyviau panaudoti maisto medžiagas, sumažinti išplovimą ir prisideda prie tikslaus augalų maitinimo [2]. Šiam tikslui pasiekti trąšos gali būti dengiamos polimerais, pavyzdžiui, krakmolu, ligninu ar celiulioze, kurie dėl savo ekologinių savybių yra labai vertinami. Tačiau minėtomis medžiagomis dengtų trąšų maisto medžiagų atpalaidavimo trukmė dažniausiai būna per trumpa ir retai viršija 30 dienų. Siekiant pailginti šį laikotarpį bei suteikti dangai norimas savybes, skirtingi biopolimerai maišomi tarpusavyje, taip pat derinami su sintetiniais polimerais, modifikuojami ar tinklinami įvairiomis neorganinėmis ir organinėmis medžiagomis [3].

Šių tyrimų tikslas – pagaminti bioskaidžias polimerines plėveles, pasižyminčias lėtinančiu maisto medžiagų atpalaidavimo poveikiu dirvožemyje bei gerinančiu mechanines savybes. Dangos buvo ruošiamos naudojant kukurūzų krakmolą, chitozaną, vandenį, polivinilo alkoholį, citrinų rūgštį ir boraksą. Tyrime siekiama nustatyti optimalias dangų ruošimo sąlygas, įvertinti poveikį trąšų tirpumui ir mechaninėms savybėms.



1 pav. Biopolimerų pagrindu pagaminta plėvelė (a) bei dengtos trąšų granulės (b)

Literatūros sąrašas:

1. P. Barłóg, W. Grzebisz, R. Łukowiak // *Plants*, **2022**, 11(14), 1855.
2. D. Lawrencia // *Plants*, **2021**, 10(2), 238.
3. P. Boberski *et. al* // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **2025**, 73(22), 13105–13124.

CELIULIOZINIO PLUOŠTO CHEMINIS MODIFIKAVIMAS

Klaudija Čėrkaitė^{1*}, Joana Bendoraitienė¹

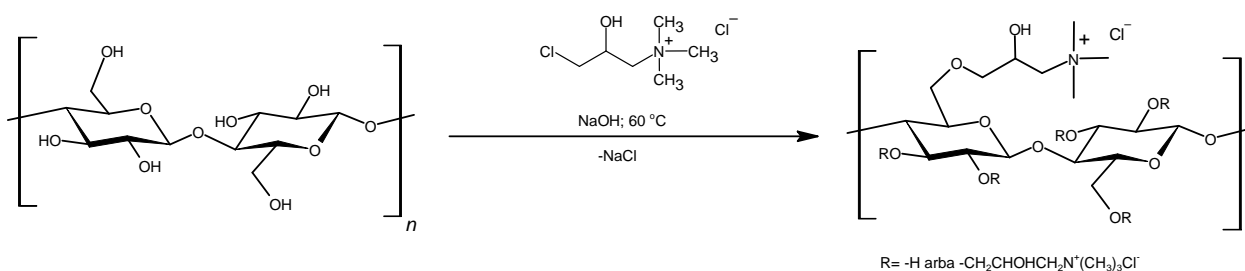
¹ Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

**klaudija.cerkaite@ktu.edu*

Polisacharidų katjonizavimas naudojant 3-chloro-2-hidroksipropiltrimetilamonio chloridą (CHPMAC) kaip katjonizavimo agentą, šarminėje terpėje yra tikslingas metodas, leidžiantis į polisacharidų struktūrą įterpti teigiamą krūvį turinčias amonio grupes (1 pav.). Chlorhidriniai reagentai lengvai reaguoja su polisacharidų hidroksigrupėmis, reakcija vyksta švelniomis sąlygomis ir polimerui gali būti suteikiamos papildomos savybės. Gauti katjoniniai polisacharidai yra hidrofiliškesni, gali būti tirpūs vandenyje, padidėja jų giminiškumas neigiamai įkrautiems paviršiams ar molekulėms, todėl tokios medžiagos plačiai taikomos vandens valymui, popieriaus pramonėje, biomedicinoje [1, 2].

Šio darbo tikslas buvo atlikti įvairios morfologinės struktūros celiuliozinio pluošto modifikavimą vandeninėje terpėje naudojant CHPMAC ir šarminį katalizatorių, optimizuoti reagentų molinį, gaunant didelio pakeitimo laipsnio katjoninę celiuliozę.

Keičiant molinį reagentų Celiuliozė:CHPMAC:NaOH = 1:(0,95-1,90):(1,5-3,0) santykį, gauti skirtingą pakeitimo laipsnį ir savybes turintys modifikuotos celiuliozės dariniai.



1 schema. Katjoninės celiuliozės sintezės schema

Modifikuotose medžiagose buvo nustatytas azoto kiekis, kuris svyravo nuo 0,53 % iki 2,95 %. FTIR spektroskopijos būdu identifiкуotos ketvirtinės amonio funkcinės grupės. Nustatyta, kad esant pakeitimo laipsniui 0,50 ir daugiau katjoninės celiuliozės dariniai yra tirpūs vandenyje. Taip pat nustatyta ir jų sorbcinė geba prijungiant anijoninius junginius iš vandeninės terpės.

Literatūros sąrašas:

1. A. Negi. Cationized Cellulose Materials: Enhancing Surface Adsorption Properties Towards Synthetic and Natural Dyes, **2025** (17), 1, p. 36.
2. A. Gupta, C. R. Ladino, T. H. Mekonnen. Cationic modification of cellulose as a sustainable and recyclable adsorbent for anionic dyes, **2023** (234), p. 123523.

Environmental Chemistry and Technology

Aplinkos chemija ir technologija

UPCYCLING PRECIOUS METAL RECOVERY SOLUTIONS: FROM BASE METAL ELECTROWINNING TO ELECTROCATALYSTS FOR GREEN HYDROGEN PRODUCTION

Darius Bernotas^{1,2*}, Gytis Eidukas^{2,3}

¹Department of Catalysis, Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania

²Department of Physical Chemistry, Vilnius University, Vilnius, Lithuania

³Department of Chemistry, HZ University of Applied Sciences, Vlissingen, Netherlands

* dariusbernotas6@gmail.com

Electrodeposition is an environmentally friendly technique for recovering precious metals (PMs) and heavy metals, as it leaves no permanent residues. This method has several advantages, including effective process control, minimal chemical requirements, excellent selectivity, and minimal sludge generation. There were 3 types of wastewaters investigated:

- Solutions A and B: Waste containing copper and zinc hydroxides as main constituents was dissolved in H₂SO₄ (Sol A) and citric acid (Sol B). The prepared solutions contain Cu(II) as the main component at concentrations of 46 g/L and 12 g/L, respectively.
- Solution C: Solutions following the leaching of spent automotive catalysts (SAC) in various organic acids (oxalic, glycolic, citric) with oxidizing agents, containing 0.005–0.050 g/L of Pd and Pt.

Investigations of Sol A and Sol B focused on the electrowinning of base metals (Cu, Zn), whereas Sol C was used to fabricate electrocatalytic coatings for green hydrogen production. The maximum electrowinning current obtained under potentiostatic conditions from Sol A and Sol B is 150 mA/cm² and 35 mA/cm² on 2D electrodes, and 380 mA/cm² and 30 mA/cm² on 3D electrodes, respectively. The average metallic composition of deposits from Sol A is Cu 57%, Zn 41%, and Fe 2.0%, whereas from Sol B it is Cu 86% and Zn 14%.

Direct electrodeposition typically yields metal recovery efficiencies below 90% because the hydrogen evolution reaction competes with metal reduction near the metal's reduction potential [1]. This challenge is mitigated by precipitating metals as hydroxides or carbonates, which can then be used to prepare new compounds or reduced to metallic form using reducing agents such as hydrazine hydrate or sodium borohydride.

Metals were electrodeposited from Sol C-type solutions onto 2D and 3D electrodes under galvanostatic conditions, forming electrocatalytic coatings containing Cu, Fe, Ni, Pd, and Pt. The content of Pd varies from 2 to 20%, and Pt from 0.2 to 1.8%, depending on the type of leaching solution. The Pd and Pt incorporated into alloys from Solutions of type C were effectively upcycled to fabricate highly active catalyst cathodes for green hydrogen production, demonstrating the viability of this integrated wastewater valorization strategy.

Acknowledgements. The authors thank the research advisors, Prof. H. Cesiulis and Dr. N. Tsyntaru, for their valuable and critical discussions. JSC Elektronikos Perdirbimo Technologijos provided the wastewater samples for study. This work is supported by the Lithuanian Research Council (project S-MIP-24-11) and partially by the COST program (project EU-CONCERT).

References:

1. A.T. Nakhjiri, et al. *Desalination*, **2022**, 527, 115510.

EXTRACTS FROM BIODEGRADABLE RAW MATERIALS AND THEIR PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES

Iqra Perveen^{*}, Rasa Šlinkšienė

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

^{*} iqra.perveen@ktu.edu

Introduction

Improving soil fertility, reducing dependence on chemical fertilizers, and ensuring effective nutrient management are necessary for sustainable agriculture. The abundance of essential nutrients, including macronutrients NPK, and micronutrients like Fe and Zn, is the main determinant of plant growth. However, interactions between macro and micronutrients regulate the nutrient uptake, and imbalances may negatively affect plant growth and productivity [1]. Soil organic matter is imperative in maintaining soil fertility, and it enhances nutrient accessibility, solubility, and retention while acting as a reservoir of essential nutrients. Furthermore, soil organic carbon reduces the toxicity of deleterious substances and reinforces soil structure, water retention, and microbial activity [2]. The use of bioactive compounds, such as bio-stimulants, has increased due to their ability to enhance the growth and uptake of plant nutrients. They contain microbes and organic extracts that improve quality, stress resistance, and facilitate natural plant processes, although their effects depend on multiple interacting factors [3]. Alternative approaches have been developed to reduce the environmental impacts of traditional fertilizers, including soil erosion and water pollution. Biofertilizers and organic fertilizers derived from microorganisms and natural sources improve soil properties and the nutrients availability whilst upholding sustainable agriculture. Biomass waste, such as manure, plant leftovers, and food waste, can be converted into organic fertilizers for nutrient recycling and safeguarding the environment [4, 5]. Liquid fertilizers have become popular due to their ease of application and the superiority of their nutrient provision. They also encourage resource conservation and reduce energy consumption by being made from waste materials such as digestates and algae-based ingredients [6]. Although anaerobic fermentation is also used to produce liquid biofertilizers that are enriched with minerals and compounds that stimulate plant development, aqueous extraction provides a rich solution of nutrients, and nutrient balancing remains hard, and the composition can vary based on the source [7, 8].

Overall, the idea of integrating nutrient interactions with soil organic matter and bioactive compounds to develop liquid fertilizers from waste and organic materials is a promising approach to effective and sustainable agricultural production. This study investigated buckwheat husk and buckwheat biomass as sources of liquid extracts containing plant nutrients. The bulk materials were fractioned into different particle sizes and then treated using distilled water and 0.5 M KOH. The physicochemical properties of the obtained extracts, including density, pH values, refractive index, viscosity, crystallization temperature, and chemical composition of potassium, phosphorus, calcium, and total organic carbon, were studied. The alkaline extraction caused the release of phosphate and potassium, more than aqueous extraction. The extraction was also influenced by the size of the particle and the nature of the solid matter. The results show that components produced from buckwheat can

be efficiently used to produce liquid extracts. Research is currently being done on the direct application of these extracts in liquid fertilizer systems.

Results and discussion

The raw materials were by-products of buckwheat processing: buckwheat hulls (BHL) and buckwheat biomass (BBM). Before extraction, the materials were dried and fractionated using a sieve shaker with mesh sizes of 0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 3.15, and 4 mm. For aqueous extraction, 1 g of each fraction was mixed with 100 mL of distilled water. After one hour, with constant stirring, the extract obtained at 60 °C was filtered and stored in a refrigerator until analysis. Alkaline extraction was performed under the same conditions, and the liquid phase was filtered and collected.

The concentrations of phosphorus, potassium, and calcium were determined in all produced extracts using standard fertilizer analysis methods. The results are presented in Table 1 and Table 2.

Table 1. Chemical composition of BHL extracts in water and 0.5 M KOH

| BHL fractions, mm | 0.2–0.5 | 0.5–1.0 | 1.0–2.0 | 2.0–3.15 | 3.15– 4.0 |
|---------------------------------|--|------------|-------------|-------------|-------------|
| Aqueous extract | | | | | |
| Potassium (K) concentration, % | 0.54–0.35 | 0.3–0.27 | 0.27–0.33 | 0.33–0.33 | 0.33–0.29 |
| Phosphorus (P) concentration, % | 0.49–0.25 | 0.25–0.19 | 0.19–0.14 | 0.14–0.14 | 0.14–0.14 |
| Calcium (Ca) concentration, % | Was below the calibration curve and could not be determined. | | | | |
| Alkaline extracts | | | | | |
| Potassium (K) concentration, % | 30.08–20.11 | 20.1–20.11 | 20.11–20.11 | 20.11–25.09 | 25.09–20.11 |
| Phosphorus (P) concentration, % | 1.56–1.52 | 1.52–1.69 | 1.69–1.52 | 1.52–1.04 | 1.04–0.79 |
| Calcium (Ca) concentration, % | 2.02–2.02 | 2.02–1.49 | 1.49–1.49 | 1.49–2.02 | 2.02–1.49 |

Table 2. Chemical composition of BBM extracts in water and 0.5 M KOH

| BBM fractions, mm | 0.2–0.5 | 0.5–1.0 | 1.0–2.0 | 2.0–3.15 | 3.15–4.0 |
|---------------------------------|--|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Aqueous extract | | | | | |
| Potassium (K) concentration, % | 0.93–0.76 | 0.76–0.72 | 0.72–0.43 | 0.43–0.49 | 0.49–0.68 |
| Phosphorus (P) concentration, % | 1.67–2.75 | 2.75–1.10 | 1.10–0.99 | 0.99–0.70 | 0.70–0.55 |
| Calcium (Ca) concentration, % | Was below the calibration curve and could not be determined. | | | | |
| Alkaline extracts | | | | | |
| Potassium (K) concentration, % | 20.11–17.61 | 17.61–20.11 | 20.11–20.11 | 20.11–22.60 | 22.60–15.12 |
| Phosphorus (P) concentration, % | 2.93–3.66 | 3.66–3.48 | 3.48–1.77 | 1.77–1.34 | 1.34–1.00 |
| Calcium (Ca) concentration, % | 2.55–2.02 | 2.02–2.02 | 2.02–1.49 | 1.49–1.49 | 1.49–0.96 |

The data in Table 1 show that the concentrations of potassium and phosphorus in aqueous extracts of all particle size fractions of buckwheat hulls were low, ranging from 0.27–0.54% for potassium and 0.14–0.49% phosphorous. On the other hand, the concentrations of potassium in alkaline extracts were noticeably higher, reaching up to 30.08%, and phosphorus up to 1.69%. This indicates a low efficiency of water extraction and confirms that KOH is better at extracting BHL nutrients and breaking down the plant structure.

Aqueous extracts of BBM (Table 2) showed low concentrations of potassium and phosphorus, ranging from 0.43-0.93% and 0.55-2.75%, respectively. However, BBM tended to exhibit slightly more phosphorus in aqueous extraction than BHL. The concentrations of nutrients also increased tremendously in the extracts that were alkaline, with phosphorus concentration standing at 3.66% and potassium concentration at 22.60%. The extraction yielded a higher level of extraction efficiency as a result of the presence of calcium in alkaline extracts but not in aqueous extracts. These results indicate that, though generally, biomass contains more extractable nutrients than hulls, alkaline environments highly enhance the release of nutrients.

The total organic carbon (TOC) concentration of some extracts was also investigated. The results obtained showed a significant difference depending on the type of raw material and the nature of the extractant. In aqueous extracts of buckwheat hulls prepared with 100 mL of solvent, the TOC content was low: in the 4 mm fraction, it reached 47.05 mg/L, and in the 1 mm biomass fraction, the TOC content was higher 168.4 mg/L. On the other hand, alkaline extraction significantly increased the TOC content in each sample. While the biomass values were very high: in the 0.2 mm fraction, the TOC value was 3583.5 mg/L, and in the 1 mm fraction, 2840 mg/L, the TOC value of buckwheat hulls in the 0.5 mm fraction was 1896.5 mg/L. These data indicate that alkaline conditions help the release of organic molecules from the plant matrix. Furthermore, higher TOC values were consistently recorded in the biomass compared to the husks, which means that it contained more extractable organic matter.

Using standard analytical methods, the physical properties of all produced extracts, such as viscosity, density, refractive index, and crystallization temperature, were determined. The results of these studies are presented in Table 3, Table 4, Fig. 1, and Fig. 2.

Table 3. Physical properties of BHL extracts in water and 0.5 M KOH

| BHL fractions, mm | 0.2–0.5 | 0.5–1.0 | 1.0–2.0 | 2.0–3.15 | 3.15–4.0 |
|--------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Aqueous extract | | | | | |
| Density (g/L) | 19.96–19.92 | 19.92–19.80 | 19.80–19.87 | 19.87–19.82 | 19.82–19.96 |
| Viscosity (mm ² /s) | 0.64–0.59 | 0.59–0.60 | 0.60–0.59 | 0.59–0.52 | 0.52–0.47 |
| Alkaline extracts | | | | | |
| Density (g/L) | 20.10–20.30 | 20.30–20.04 | 20.04–20.34 | 20.34–20.27 | 20.27–20.35 |
| Viscosity (mm ² /s) | 0.50–0.47 | 0.47–0.47 | 0.47–0.52 | 0.52–0.45 | 0.45–0.44 |

The Table 1 results show that the extraction technique and BHL particle size did not affect either density or viscosity. The density values 20.04 g/L to 20.34 g/L in alkaline extracts were often higher than in aqueous extracts, 19.80 g/L to 19.96 g/L. Viscosity values showed minor variations, ranging from 0.52 mm²/s to 0.64 mm²/s in aqueous extracts and from 0.44 mm²/s to 0.52 mm²/s in alkaline extracts. This may be due to the higher density of the extractant itself, i.e., the potassium hydroxide solution, compared to water.

Table 4. Physical properties of BBM extracts in water and 0.5 M KOH

| BBM fractions, mm | 0.2–0.5 | 0.5–1.0 | 1.0–2.0 | 2.0–3.15 | 3.15–4.0 |
|--------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Aqueous extract | | | | | |
| Density (g/L) | 19.70–19.86 | 19.86–19.90 | 19.90–19.41 | 19.41–19.78 | 19.78–19.74 |
| Viscosity (mm ² /s) | 0.65–0.54 | 0.54–0.57 | 0.57–0.59 | 0.59–0.49 | 0.49–0.60 |
| Alkaline extracts | | | | | |
| Density (g/L) | 17.96–20.36 | 20.36–19.92 | 19.92–20.09 | 20.09–20.33 | 20.33–19.90 |
| Viscosity (mm ² /s) | 0.65–0.68 | 0.68–0.53 | 0.53–0.51 | 0.51–0.69 | 0.69–0.54 |

Similar trends were observed with BBM extracts (Table 4). The density of alkaline extracts was a little higher, with a range of 19.90–20.36 g/L, as compared to aqueous extracts with a range of 19.41–19.90 g/L. Viscosity values in aqueous extracts were in the range of 0.49 to 0.65 mm²/s, and in alkaline extracts, the range was 0.51 to 0.69 mm²/s. Based on these results, particle size does not play a significant role in physical attributes, whereas extraction methodology has a slightly significant difference due to solute concentration change.

All refractive index (Fig.1) values varied very little between the different extraction methods and particle size fractions. The values were approximately 1.333 and 1.340 for the BHL and BBM extracts, respectively. Compared to aqueous extracts (~1.333–1.335), alkaline extracts exhibited a slightly higher value of refractive index (~1.339–1.340). These differences, though, were insignificant, and it is believed that the kind of extractant or the particle size had no significant influence on the refractive index of the extractant.

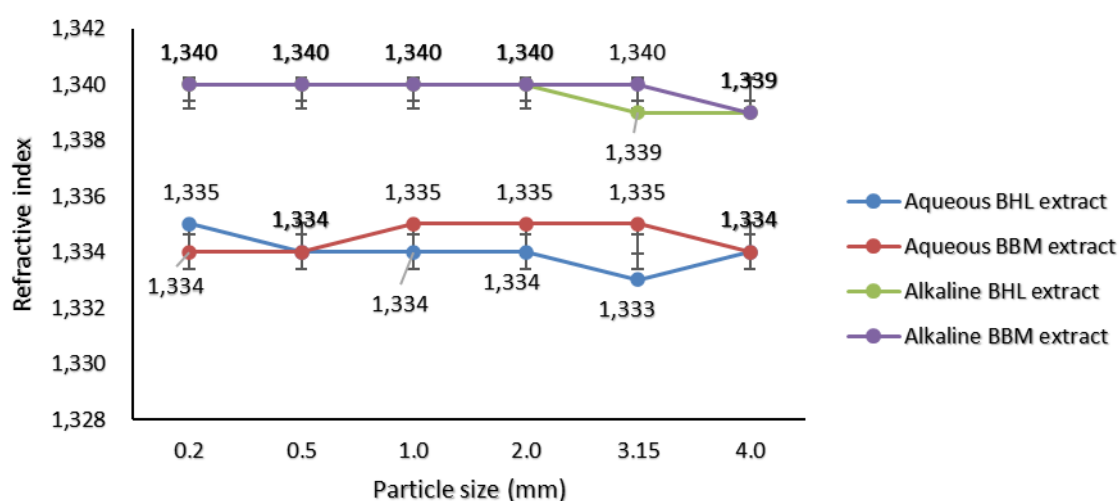


Fig. 1 Refractive index of BHL and BBM fractions (mm) in two solvents (water and KOH)

The crystallization temperature data (Fig. 2) showed that all the extracts had negative temperatures, with the crystallization temperature lying between approximately -1.5 °C and -5.0 °C. Lower values were observed with alkaline extracts (between -3.0 °C and -5.0 °C), with smaller particle fractions showing lower crystallization temperatures, whereas aqueous extracts had higher crystallization temperatures (between -1.5 and -2.0 °C). This implies that the extraction using alkaline conditions produced a greater quantity of dissolved substances, thereby resulting in a further decrease in the crystallization temperature.

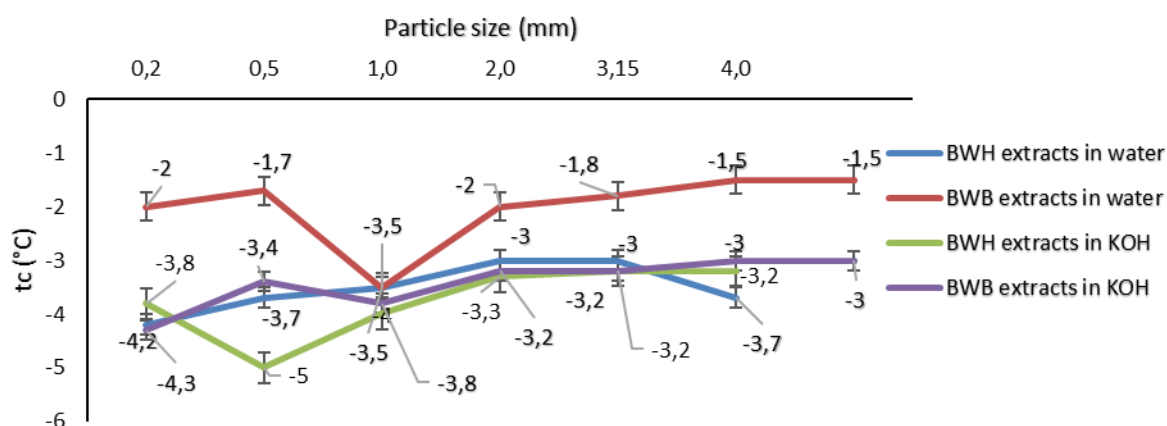


Fig. 2 Crystallization temperature of BHL and BBM fractions (mm) in two solvents (water and KOH)

The results of the physical properties show that the studied properties depend little on the origin of the extractant used and even less on the bulk fraction of the raw material. However, the fact that plant nutrients were found in the obtained extracts allows us to assume that, by choosing the appropriate extraction conditions and method, buckwheat biomass and buckwheat hulls can be used as raw materials for the production of liquid extracts.

Conclusions

The results of the study show that the nature of the extractant has a greater influence on the chemical composition and physicochemical properties of extracts made from buckwheat than the particle size of the bulk raw materials. During alkaline extraction, using a 0.5 M alkaline KOH solution, higher concentrations of potassium (K), phosphorus (P) and measurable calcium were achieved compared to extraction with water. Aqueous extraction proved to be very inefficient, especially for calcium, which remained at the detection limit, meaning that calcium in the raw materials is in the insoluble form of water. Buckwheat biomass had a higher phosphorus concentration than non-buckwheat, meaning that the nutrient distribution of these two raw materials differed. Particle size affected the extraction behavior, although not equally in different fractions, indicating that both the composition and structural properties of the material are affected. Overall, the results indicate that buckwheat by-products can be a useful source of nutrients for the production of extracts suitable for fertilization.

References:

1. S. Kumar, S. Kumar, T. Mohapatra. *Frontiers in Plant Science*, **2021**, 12.
2. J. Gerke. *Soil Systems*, **2022**, 6(2), 33.
3. C.N. Sible, J. R. Seebauer, F. E. Below. *Agronomy*, **2021**, 11(7).
4. M.M. A. Allouzi, S. M. A. Allouzi, Z. X. Keng, C. V. Supramaniam, A. Singh et al. *Heliyon*, **2022**, 8(12).
5. S. Gao, D. Lu, T. Qian, Y. Zhou. *Science of the Total Environment*, **2021**, 775, 145786.
6. R. Pajura, A. Mastoń, J. Czarnota. *Energies*, **2023**, 16(4), 1747.
7. M.D. C. Salas Sanjuán, J. Ruiz, J. Valenzuela, A. Campos. *Horticulturae*, **2023**, 9(12), 1281.
8. J. López-Rubio, C. Cebrián-Tarancón, G. Alonso, M. Salinas, R. Sánchez-Gómez. *Agriculture*, **2025**, 15(11), 1225.

E-WASTE GLASS POWDER UTILIZATION IN CONCRETE PAVING BLOCKS

Jones Mwenda Mutegi*, Evaldas Šerelis, Ernestas Ivanauskas

Kaunas University of Technology, Lithuania

*jones.mutegi@ktu.edu

The study investigates the use of processed E-glass waste as a partial replacement for Portland cement (OPC) in concrete paving blocks. E-glass, an amorphous alumino-borosilicate material rich in silica (roughly 52–56 wt%), has been studied as a supplementary cementitious material (SCM)[1, 2]. It was milled into fine powder and used to replace cement at 0%, 20%, 40%, 60%, and 80% by mass, with a constant water-to-binder ratio of 0.35. All specimens were cured under standard conditions (20 °C). The preparation scheme is shown in Figure 1.



Fig. 1. Preparation scheme for concrete paving block

The specimens were evaluated using semi-adiabatic calorimetry, density, splitting tensile strength, water absorption, porosity, and compressive strength tests. Results show that Portland cement can be partially replaced by 40–60% E-glass powder while maintaining the minimum splitting tensile strength of 3.6 MPa[3]. Within this range, compressive strength decreases from 50.2 MPa to 35.9 MPa. These findings indicate that E-glass-modified concrete paving blocks are suitable for pedestrian walkways, bicycle paths, and light-traffic pavements.

Acknowledgements: This work was supported by the M-era.Net 3 project and the Research Council of Lithuania (LMTLT), agreement No S-M-ERA.NET-23-4.

References:

1. Jakubikova Karolina Hudec; Hermann Radek and Drochytka Rostislav. The Assessment and Treatment of Waste from Glass Fibre Production for use as a Filler in Composites *In: Young Scientist* **2023**, pp. 01037–01037.2023.
2. POUDEL, Sushant; BHETUWAL, Utkarsha; KHAREL, Prabin; KHATIWADA, Sudip; KC, Diwakar, et al. Waste Glass as Partial Cement Replacement in Sustainable Concrete: Mechanical and Fresh Properties Review. *Buildings*, vol. 15 (**2025**), no. 6.
3. European Committee for Standardization (CEN). *Concrete Paving Blocks — Requirements and Test Methods*. Brussels: CEN, **2003**.

COMPARATIVE LIFE CYCLE ASSESSMENT OF SERPENTINE AND PHLOGOPITE-BASED CO₂ MINERAL CARBONATION ROUTES

Jurgita Čestauskaitė^{1*}, Inga Stasiulaitienė¹, Ron Zevenhoven²

¹ Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

² Åbo Akademi University, Turku, Finland

* *jurgita.cestauskaite@ktu.edu*

As anthropogenic CO₂ emissions drive the urgent need for carbon capture, utilisation, and storage (CCUS) [1], mineral carbonation has emerged as a potential permanent storage solution [2]. However, the technology is challenged by high energy intensity and a lack of standardised environmental assessments [3]. This study addresses this gap by comparing life cycle assessments (LCAs) of serpentine- and phlogopite-based mineral carbonation routes in the Finnish context [4]. Using unified functional units and system boundaries, both conventional and integrated process routes are evaluated, incorporating chemical recovery to improve system realism. Results show that, despite its higher magnesium content, phlogopite does not achieve greater CO₂ capture efficiency than serpentine, disproving the hypothesis. All three scenarios show similar environmental performance when chemical recycling is included, while comparison with virgin material systems supports the implementation of chemical looping. Sensitivity analysis indicates that energy consumption is the primary driver of environmental impact. The findings demonstrate that process configurations relying on heat as the main energy input yield the most favourable outcomes, and that mineralogical composition alone does not ensure improved capture efficiency.

Acknowledgements. This work was supported by the MAGNEX project at Åbo Akademi University, Finland. Thanks to Prof. Ron Zevenhoven for supervision and support.

References:

1. IPCC. Climate Change 2022: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, Cambridge, UK and New York, NY, USA, **2022**, p. 1-1500.
2. A. Sanna, M. Uibu, G. Caramanna, R. Kuusik, M. M. Maroto-Valer. A review of mineral carbonation technologies to sequester CO₂. *Chemical Society Reviews*, **2014**, 43, p. 8049–8080.
3. H. Ostovari, A. Sternberg, A. Bardow. Rock 'n' use of CO₂: carbon footprint of carbon capture and utilization by mineralization. *Sustainable Energy & Fuels*, **2020**, 4, p. 4482–4496.
4. N. Thonemann, L. Zacharopoulos, F. Fromme, J. Nühlen. Environmental impacts of carbon capture and utilization by mineral carbonation: A systematic literature review and meta life cycle assessment. *Journal of Cleaner Production*, **2022**, 333, p. 130139.

DETERMINATION OF THE QUANTITY AND PROPERTIES OF MICROPLASTICS IN SETTLED INDOOR DUST

Monika Eimutyte, Violeta Kaunelienė

Kaunas University of Technology, Faculty of Chemical Technology, Environmental Technology, Kaunas, Lithuania
* monika.eimutyte@ktu.edu

Although microplastic pollution has been studied primarily in aquatic and soil environments, recent studies show that significant amounts of these particles are also found in indoor environments. Due to their small size, they can remain airborne for long periods or accumulate in settled particles, thus constituting a constant source of human exposure [1].

The aim of this study is to quantitatively assess the concentration of microplastic particles in indoor environments and to determine the characteristics of their distribution. During the study, samples were collected from the indoor environment of the Faculty of Chemical Technology at Kaunas University of Technology: 10 lecture halls and 14 laboratories. The samples were analyzed using optical microscopy and fluorescence microscopy, which allowed for more reliable identification of microplastic particles. The total number of particles and their concentration were determined, and the proportion of fibrous particles in the total microplastic content was assessed.

The results showed that the microplastic concentration ranged from 90 to 1069 MPs/g \pm 288 MPs/g, with an average of approximately 574 MPs/g. It was found that fiber-like particles constituted a significant portion of the microplastics (24%), indicating their possible origin from synthetic fabrics. Based on the obtained microplastic concentrations, the Estimated Daily Intake (EDI) of microplastic particles can be calculated [2].

In summary, it can be stated that the indoor environment is a significant source of microplastic accumulation and potential exposure.

References:

1. M. H. Niari et al. *Air Quality, Atmosphere & Health*, **2025** 18(1), p. 253–262.
2. H. K. Ageel, S. Harrad, M. A. E. Abdallah. *Emerging Contaminants*, **2025** 11(3), p. 100506.

DATA-DRIVEN APPROACH FOR PREDICTING AOF AND PERFORMANCE OF OFFSHORE HYDROCARBON WELLS

Sampson Kennie Wayoe^{1*}, Rebecca Dedeyo Wayoe²

¹ Kwame Nkrumah University of Science and Technology, Kumasi, Ghana

² Vilnius University, Vilnius, Lithuania

*sampson.wayoe@chgf.stud.vu.lt

The optimization of offshore wells is a multifaceted challenge, particularly in deep-water environments. In this study, we aimed to forecast the Absolute Open Flow (AOF) of offshore hydrocarbon wells and determine the critical factors affecting well performance. The study used a hybrid approach that combines traditional nodal analysis and data-driven machine learning to predict AOF in offshore well configurations. The technique involved importing and preprocessing data, developing a machine learning model, and conducting a thorough evaluation that included correlational heatmaps and feature importance analysis. The results extracted from the PIPESIM well simulation runs were exported into a structured dataset for ML processing in the Google Colab research notebook. This study demonstrated that the physical connectivity of the reservoir and the efficiency of completion are the main determinants of maximum theoretical capacity.

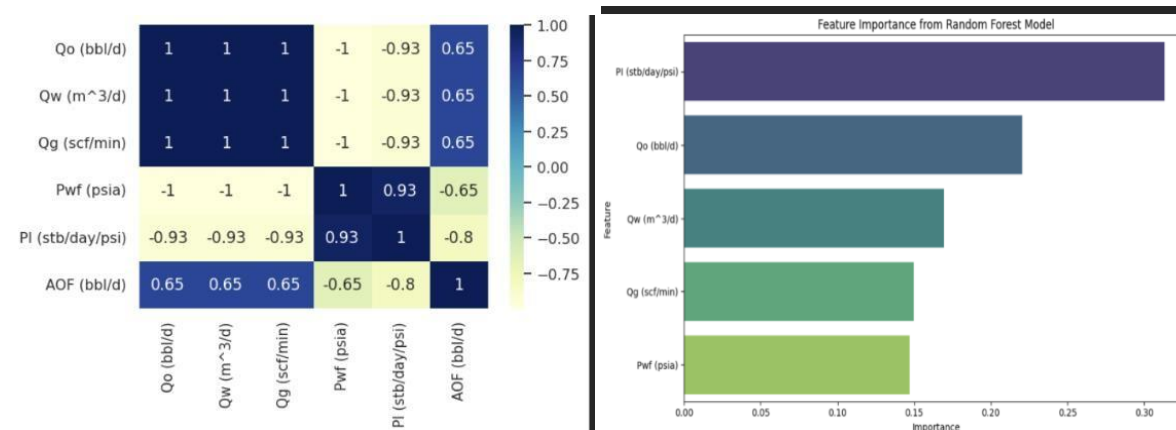


Fig. 1. Correlation Analysis and Visualization

Fig. 2. Random Forest Prediction Report

References:

1. Abdullayeva, F.; Imamverdiyev, Y. Development of Oil Production Forecasting Method Based on Deep Learning. *Optim. Inf. Comput.* **2019**, *7*, 826–839.
2. Ahmadi, M.A., Chen, Z. Machine Learning Models to Predict Bottom Hole Pressure in Multi-Phase Flow in Vertical Oil Production Wells. *Can. J. Chem. Eng.* **2019**, *97*, 2928–2940.
3. Amaechi, U.C., Ikpeka, P.M., Xianlin, M., Ugwu, J.O. Application of Machine Learning Models in Predicting Initial Gas Production Rate from Tight Gas Reservoirs. *Rud.-Geol.-Naft. Zb.* **2019**, *34*, 29–40.

COMPARATIVE ANALYSIS OF PROPERTIES AND MICROPLASTIC RELEASE FROM RAW AND RECYCLED POLYESTER WEFT KNITTED FABRICS

Vykintė Trakšelytė^{1,2*}, Erika Adomavičiūtė³

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

² Department of Textile Technologies, State Research Institute Center for Physical Sciences and Technology, Lithuania

³ Faculty of Mechanical Engineering and Design, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

* vykinte.trakselyte@ktu.edu

Polyester is a widely used fiber in the textile industry due to its physical characteristics, low price, recyclability, and widespread use (cloths, domestic textiles and industrial textiles). The advantage in price of polyester has made it essential for clothing industry known as “fast fashion”. However, the increasing consumption of polyester based products has raised environmental concerns. During domestic washing, synthetic textiles release microfibers that enter wastewater systems and contribute significantly to microplastic pollution in the environment [1-3].

The aim of this study was to evaluate the mechanical properties and microfiber release from weft knitted fabrics made from commercially available virgin polyester (PES) and recycled polyester (rPES) during domestic washing.

From 16.5 tex PES and rPES yarns were knitted samples of combined interlock structure with a 20E gauge 30” diameter Orizio knitting machine in company UAB “Omniteksas fabrics”, the surface area of knits was determined according to LST EN 12127: 1999 “Determination of mass per unit area using small samples” standard, the mechanical properties were estimated according to LST EN ISO 20932-1 “Determination of the elasticity of fabrics. Part 1: Strip tests” standard, surface abrasion test was determined according to LST EN ISO 12947-2:2017 “Determination of the abrasion resistance of fabrics by the Martindale method. Part 2: Determination of specimen breakdown” standard. The microplastic release was determined according to ISO 4484-1:2023 “Microplastics from textile sources. Part 1: Determination of material loss from fabrics during washing” standard.

Knits from rPES yarns showed lower elongation at a force of 15 N than knits from PES yarns by approximately 27% in the row direction and 9% in the course direction. Surface abrasion test results showed that both knitted fabrics withstood 40,000 abrasion cycles before specimen breakdown, however, the rPES fabric formed more pills. The analysis of microfiber release indicated that PES knits released 29.4 % fewer microfibers than rPES knits. After comparing the data using Welch’s t-test, it can be stated that the difference found is of no statistical significance ($p > 0.05$). This indicates that the release of microplastics from textiles needs to be investigated using a larger number of samples.

References:

1. K. Bailey et al. *Water*, **2022**, 14(7), 1073.
2. I. Ozkan et al. *The Journal of the Textile Institute*, **2021**, 112(2) p. 264–272.
3. S.H. Akyildiz et al. *Environmental Pollution*, **2024**, 357.

STUDY OF THE EFFECT OF ADDITIVES ON THE PROPERTIES OF MODIFIED BITUMEN

Vilius Jokūbas Šlikas, Linas Miknius

Department of Organic Chemistry, Kaunas university of technology, Radvilėnų pl. 19, Kaunas, 50254, Lietuva

* vilius.slikas@ktu.edu

Introduction

Bitumen is a product obtained during petroleum refining, produced by oxidizing residual fractions from various refining processes with atmospheric oxygen. Bitumen can also be produced by compounding – mixing bitumen feedstock with bitumen. Under standard conditions, bitumen is black, viscous, non-volatile liquid or a solid material that is insoluble in water and resistant to its effects. Bitumen is generally considered a colloidal system in which micelles of high molecular weight compounds, asphaltenes, are dispersed in lower molecular weight compounds [1, 2]. From chemical perspective, bitumen is a complex mixture of high molecular weight hydrocarbons and heteroatomic compounds, which can be divided into four fractions [2, 3]:

- Paraffins – saturated, non-cyclic hydrocarbons.
- Resins – black, highly viscous multi-ring aromatic hydrocarbon mixtures with a relative molecular mass of 300–2000. Resins can be liquid, semi-liquid and plastic. Upon oxidation, resins transform into asphaltenes.
- Asphaltenes – high molecular weight (800–3500 g/mol) compounds containing nitrogen, sulfur and oxygen heteroatoms. Asphaltenes are solid, brittle, shiny, amorphous substances with high melting point. Asphaltenes are insoluble in n-heptane, but soluble in toluene.
- Arenes – cyclic compounds containing benzene (usually polycondensed) rings.

The main practical application of bitumen is in road asphalt production. Bitumen is used as a binding material together with aggregates such as crushed stone and other fillers. This product can also be used to produce roofing coverings and various composite materials. In order to reduce the rutting and cracking in roads caused by continuously increasing traffic loads, scientists are constantly improving the chemical composition of bitumen, to enhance its performance properties. One area of research is the modification of bitumen with polymers [2, 4].

Polymer modified bitumen (PMB) is a product whose properties are improved by the addition of one or more organic polymers. The properties of modified bitumen grades and their testing are described in the EN 14023:2010 standard "*Bitumen and bituminous binders. Specification framework for polymer modified bitumens*". Compared to conventional bitumen, polymer modified bitumen exhibits improved resistance, elasticity, ageing properties, as well as better resistance to high temperatures, water and wear. The polymer interacts with the compounds present in bitumen, the polymer immobilizes the lower molecular weight compounds in the bitumen, forming a three-dimensional network (polymer domain). In this way, the properties of the bitumen are altered, elasticity and resistance to mechanical stress are provided [2, 4, 5, 6, 7]. Asphalt produced from polymer modified bitumen is used for the construction of heavily loaded pavements. Such asphalt has a longer service life or can be used in thinner structures compared to conventional bitumen grades. PMB is also well suited to produce thin noise-

reducing layers. The use of modified bitumen in Lithuania is also described in the *TRA ASFALTAS 24* specification, which states that polymer-modified bitumen is a mandatory component for both the base and surface layers of public road pavements. PMB also involves the use of rubber additives derived from tires—devulcanized rubber produced from shredded tires. This additive contributes to the circular economy and helps reduce waste from used tires [8].

The aim of this work is to evaluate the effect of the concentration of the bitumen modifier used and addition of sulfur on the penetration and softening temperature properties of modified bitumen. The bitumen modifiers used are styrene-butadiene polymer produced by KRATON or tire rubber additive, consisting of 80% devulcanized rubber and 20% polypropylene.

Materials and research methods

The tests were carried out in accordance with the methodologies of standards EN 1426 "*Bitumen and bituminous binders. Determination of needle penetration*" and EN 1427 "*Bitumen and bituminous binders. Determination of softening point. Ring and ball method*" in order to determine the penetration and softening point values of polymer-modified bitumen by adding different mass fractions of KRATON styrene-butadiene polymer or devulcanized tire additive to the bitumen.

In Lithuania and Europe, the most commonly used modified bitumen grades are PMB 25/55-60, PMB 45/80-55 and PMB 45/80-65. Accordingly, the following base bitumen grades were selected for the research: 35/50 and 50/70 are used in the production of polymer-modified bitumen PMB 25/55-60, and 70/100 which is used in the production of PMB 45/80-55 and PMB 45/80-65. Therefore, these base bitumen grades were selected as raw materials for the research. The properties of the base bitumen are presented in Table 1.

Table 1. Properties of base bitumen grades used in the study

| Property | Unit | Test method | Grade | | |
|---|--------------------|-----------------|-------|-------|--------|
| | | | 35/50 | 50/70 | 70/100 |
| Unaged bitumen | | | | | |
| Penetration at 25°C | 0.1mm | LST EN 1426 | 44 | 58 | 82 |
| Softening point (Ring and Ball method) | °C | LST EN 1427 | 53 | 50 | 47 |
| Flash point (Cleveland open cup) | °C | LST EN ISO 2592 | 251 | 241 | 239 |
| Solubility (in trichloroethylene) | % | LST EN 12592 | 99.5 | 99.5 | 99.5 |
| Kinematic viscosity at 135°C | mm ² /s | LST EN 12595 | 430 | 350 | 245 |
| Dynamic viscosity at 60°C | Pa · s | LST EN 12596 | 258 | 175 | 112 |
| Fraass breaking point | °C | LST EN 12593 | -3 | -10 | -11 |
| Bitumen aged by short-term (RTFOT) method according to LST EN 12607-1 | | | | | |
| Residual penetration | % | LST EN 1426 | 55 | 52 | 49 |
| Increase in softening point (Ring and Ball method) | °C | LST EN 1427 | 5 | 7 | 8 |
| Mass change | % | LST EN 12607-1 | 0.1 | 0.1 | 0.1 |

The research is carried out by adding 3 to 20% by weight of styrene-butadiene polymer or devulcanized tire modifier to base bitumens 35/50, 50/70 and 70/100. The tests are repeated by adding 0.5% (by weight) of sulfur to the bitumen together with the polymer or tire modifier.

Results and Discussion

The dependence of the penetration and softening point of polymer-modified bitumen on the amount of polymer additive is shown in Figure 1.

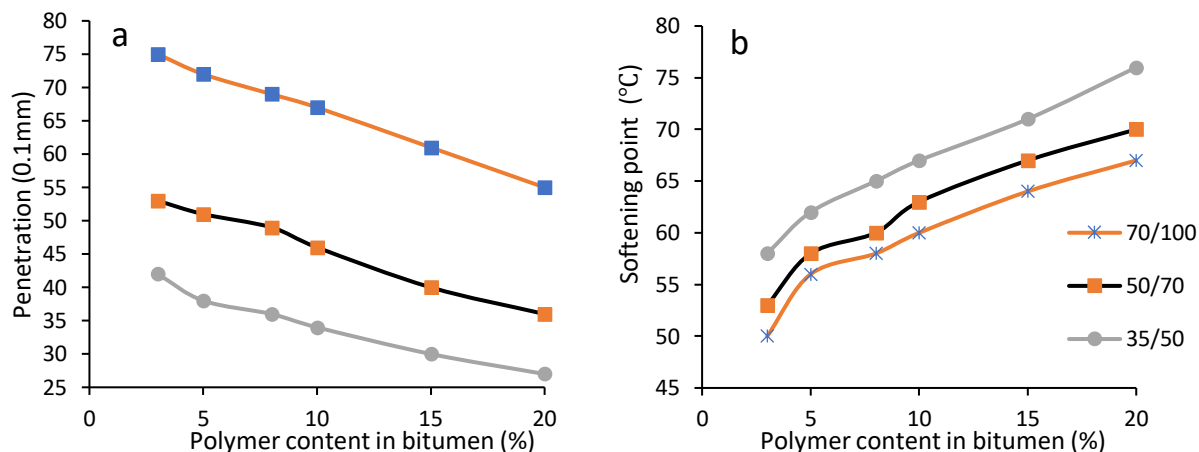


Fig. 1. Effect of polymer content on bitumen penetration at 25°C (a) and softening point (b)

The results show that as the polymer concentration increases, the softening point values of bitumen increase (Fig. 1, a), as and the penetration decreases proportionally (Fig. 1, b), the bitumen becomes harder. The studies also show that the change in penetration of the harder bitumen, in this case 35/50, is less than that of the softer grades 50/70 and 70/100.

The dependence of the penetration and softening point of modified bitumen with the addition of devulcanized tire additive on the amount of additive is presented in Figure 2.

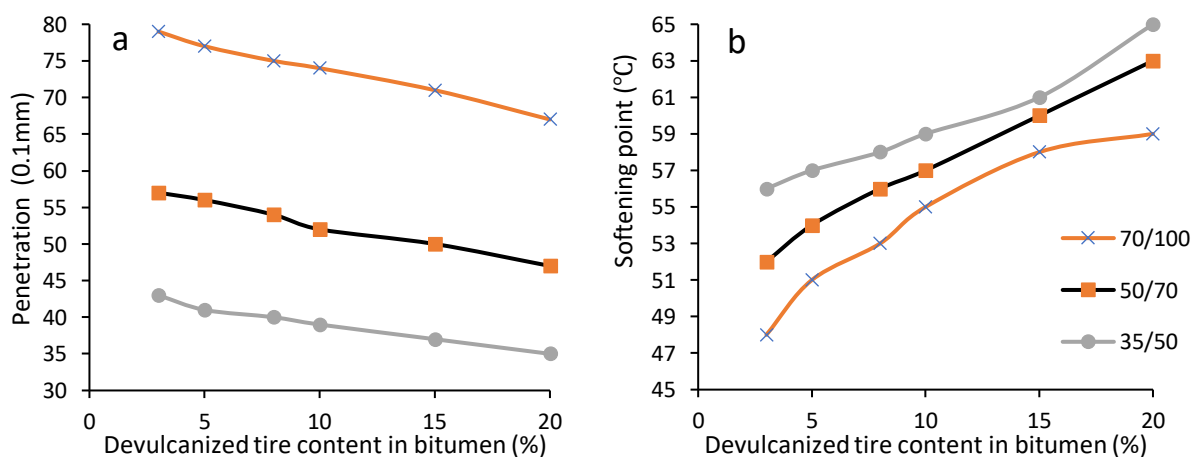


Fig. 2. Effect of devulcanized tire additive content on bitumen penetration at 25°C (a) and softening point (b)

As the research results show (Fig. 2), devulcanized rubber has a positive effect on the properties of bitumen quality, but the same amount of additive has a smaller effect on both

penetration (Fig. 2, a) and softening temperature (Fig. 2, b) compared to the case of a polymer additive.

The influence of sulfur as a co-additive on the penetration and softening point of polymer modified bitumen is depicted in Figure 3.

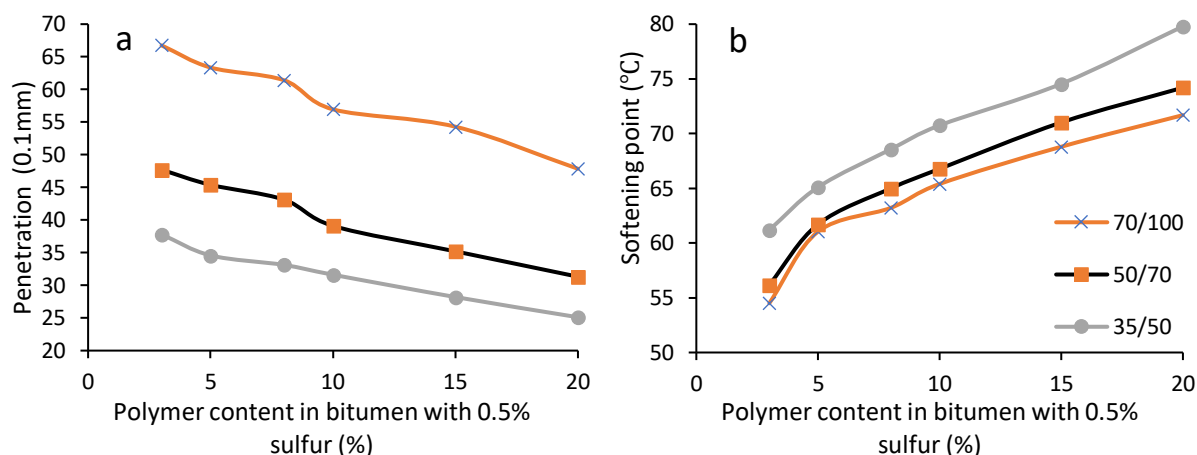


Fig. 3. Effect of polymer content with 0.5% sulfur on bitumen penetration at 25°C (a) and softening point (b)

The results of the experiments show that the use of sulfur together with a polymer additive significantly improves the hardening of bitumen at a temperature of 25°C (Fig. 3, a), and studies of the softening point of bitumen (Fig. 3, b) confirm this.

The influence of the same sulfur content (0.5%) on the penetration and softening temperature of devulcanized tire rubber modified bitumen is reflected in Figure 4.

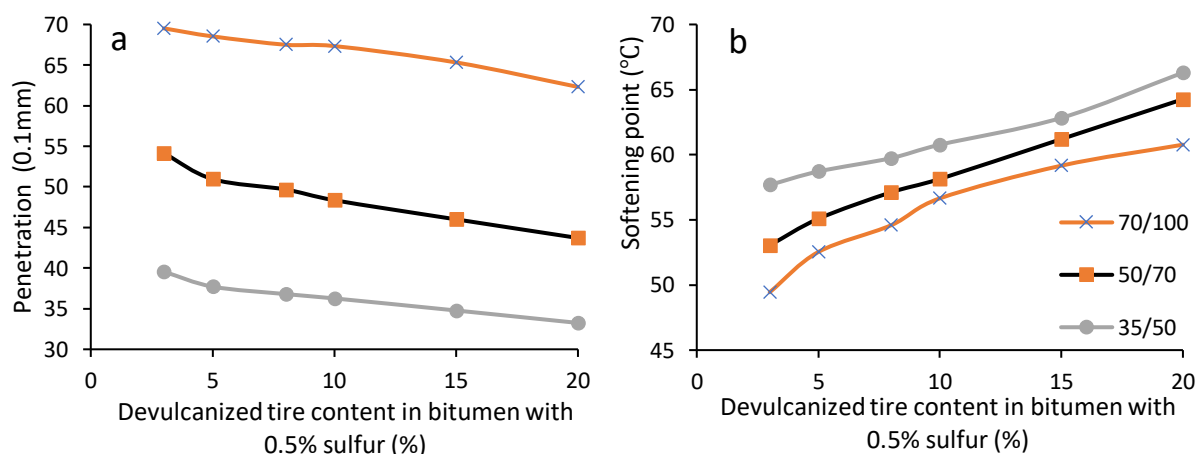


Fig. 4. Effect of devulcanized tire additive content with 0.5% sulfur on bitumen penetration at 25°C (a) and softening point (b)

Both penetration (Fig. 4, a) and bitumen softening point (Fig. 4, b) investigation indicate a positive effect of sulfur addition to the tested mixture. However, at higher additive amounts, the bitumen hardening effect that was obtained using the polymer additive was not achieved.

In any case, the synergistic effect of the sulfur additive allows the use of smaller amounts of modifiers to achieve the desired bitumen quality characteristics.

Conclusions

1. By modifying the base bitumen with additives, it was determined that 20% of polymer modifier reduces bitumen penetration by 17–27 0.1mm, and increases the bitumen softening point by 20–21°C.
2. It was found that the change in penetration values of a base bitumen with a higher degree of oxidation, in this case 35/50, after the addition of the polymer modifier with sulfur is 8–15 0.1mm lower than that of softer bitumen grades.
3. The use of sulfur in combination with a polymeric or devulcanized tire additive increases the hardening effect. The addition of 0.5% sulfur increases the softening point of the bitumen by 13–27°C and reduces the penetration by 11–34 0.1mm. As polymeric additive with sulfur is applied, 41–48% higher hardening is achieved than the use of the same amount of devulcanized tire additive with sulfur.

References:

1. T. McNally. Polymer modified bitumen properties and characterisation. Woodhead Publishing Limited, 80 High Street, Sawston, Cambridge CB22 3HJ, UK, **2011**, p. 1-340.
2. M. Porto, P. Caputo, V. Loise, S. Eskandarsefat, B. Teltayev, and C. O. Rossi. Bitumen and Bitumen Modification: A Review on Latest Advances. *Applied Sciences*, **2019**, 9(4), p. 1-35
3. M. Paliukaitė, A. Vaitkus, A. Zofka. Evaluation of bitumen fractional composition depending on the crude oil type and production technology, the 9th International Conference “ENVIRONMENTAL ENGINEERING”, Vilnius, Lithuania, **2014**, p. 1-7.
4. B. Sengoz, G. Isikyakar. Evaluation of the properties and microstructure of SBS and EVA polymer modified bitumen, *Construction and Building Materials*, **2008**, 22(9), p. 1-9.
5. N. Thakre, D. Mangrulkar, M. Janbandhu, J. Saxena. Polymer Modified Bitumen, *IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering*, **2016**, Volume 13, Issue 6 Ver. VI, p. 120-128.
6. J. Xu, T. Xi, L. Zhao, B. Yina and M. Yang. Correlation between phase separation and rheological behavior in bitumen/SBS/PE blends, *RSC Advances*, **2018**, 8, p. 1-9.
7. M. Wieser, A. Schaur, and S. Unterberger. Polymer-Bitumen Interaction: A Correlation Study with Six Different Bitumens to Investigate the Influence of SARA Fractions on the Phase Stability, Swelling, and Thermo-Rheological Properties of SBS-PmB, *Materials*, **2021**, 14(5), p. 1-14.
8. M. R. Ibrahim, H. Y. Katman, M. R. Karim, S. Koting, and N. S. Mashaan. A Review on the Effect of Crumb Rubber Addition to the Rheology of Crumb Rubber Modified Bitumen, *Advances in Materials Science and Engineering*, **2013**, 10, p. 1-8.

ASSESSING THE EFFICIENCY OF PHTHALATES ELIMINATION VIA QUATERNARY STAGE WASTEWATER TREATMENT

Emilija Mockutė¹, Povilas Reškevičius², assoc. prof. dr. Inga Urniežaitė¹

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

²JSC “Kauno vandenys” Wastewater Treatment Plant, Kaunas, Lithuania.

emilija.mockute@ktu.lt

Phthalates are widely used plasticizers that pose environmental and health risks due to their persistence and endocrine-disrupting properties [1]. They are frequently detected in municipal wastewater, where conventional treatment is often insufficient for their removal. The updated EU Urban Wastewater Treatment Directive highlights the need to monitor micropollutants, including phthalates, and promote advanced treatment technologies, particularly in sensitive areas, with plans for harmonized EU limit values [2]. This research was funded by the EMPEREST project under the Interreg Baltic Sea region programme 2021–2027. The project investigated the effectiveness of quaternary wastewater treatment technologies in removing micropollutants. Samples were collected after biological treatment and after each step of the quaternary treatment process: ozonation and activated carbon filtration. Phthalate concentrations were determined using GC-MS/MS for accurate quantification.

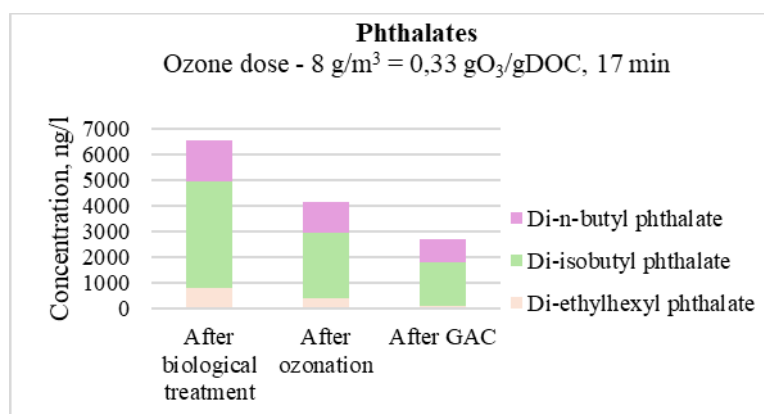


Fig. 1. Phthalates concentrations before and after each stage of quaternary wastewater treatment technology.

Figure 1 shows a significant decrease in phthalates concentrations after each stage of quaternary wastewater treatment. Ozonation contributes to partial degradation of phthalates, which increased the overall removal efficiency – 36.97 %. The complete quaternary treatment train including GAC filtration achieved an overall phthalates removal efficiency – 58.75 %. The total removal efficiency remains insufficient to ensure complete elimination of these contaminants during the quaternary wastewater treatment.

Acknowledgements. For the EMPEREST project for the opportunities to benefit from the Interreg Baltic Sea region programme 2021–2027.

References:

1. Net, S., Delmont, A., Sempéré, R., Paluselli, A., Ouddane, B. *Environmental Science & Technology*, **2015**, 49(7), p. 4019–4035.
2. European Commission. *Directive (EU) 2024/3019 on urban wastewater treatment (recast)*, Brussels, **2024**.

ZnO TETRAPOD-BASED CHEMORESISTIVE SENSORS FUNCTIONALISED WITH GRAPHITIC CARBON NITRIDE

Olha Sokolova, Martynas Tichonovas, Simas Račkauskas

Institute of Materials Science, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania
olha.sokolova@ktu.edu

Graphitic carbon nitride ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) is a two-dimensional (2-D) polymeric semiconductor that consists of carbon, nitrogen, and some impurity hydrogen [1]. In the 19th century, it was first identified by Berzelius by its color, and Liebig gave the name melon in 1834. After being structurally described by Edward Franklin in 1922 [2]. Under ambient conditions, $g\text{-C}_3\text{N}_4$ is the most stable carbon nitride phase, with a bandgap of approximately 2.7 eV, good chemical and thermal stability, and a nitrogen-rich surface that facilitates strong interfacial interactions [1,3]. These properties make it a promising modifier for metal oxide gas sensors. Zinc oxide tetrapods (ZnO-T) are widely employed in chemoresistive sensing because of their three-dimensional morphology, high surface area, and ultraviolet sensitivity [4,5]. The sensing mechanism is governed by surface depletion effects: adsorbed oxygen species trap conduction-band electrons, increasing resistance. This impact is amplified by nitrogen dioxide (NO_2), which further removes electrons. UV light, on the other hand, creates holes that improve conductivity, encourage desorption, and neutralize surface oxygen ions [4]. Combining ZnO-T with $g\text{-C}_3\text{N}_4$ allows to achieve high efficiency sensing at room temperature. ZnO-T/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ were fabricated by spray coating at mass ratios of 100:0, 90:10, 80:20, and 50:50, and characterized for ultraviolet photoresponse and nitrogen dioxide (NO_2) sensing performance under UV activation. Incorporation of $g\text{-C}_3\text{N}_4$ enhanced the UV photoresponse in all samples, with the 80:20 composite demonstrating the highest response, better than that of pure ZnO-T. This composition also showed the most consistent NO_2 dose-response behavior at 5, 10, and 20 ppm. These improvements are explained by heterojunction development at the ZnO-T/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ interface, which raises the density of active adsorption sites for NO_2 and strengthens charge-carrier separation under UV light. These results demonstrate that $g\text{-C}_3\text{N}_4$ functionalization is an effective strategy for improving ZnO-T sensor performance, offering better UV response and reliable NO_2 detection.

References:

1. J. Zhu, P. Xiao, H. Li, S.A.C. Carabineiro. ACS Appl. Mater. Interfaces, **2014**, 6(19), p. 16449–16465.
2. Y. Wang, L. Liu, T. Ma, Y. Zhang, H. Huang. Adv. Funct. Mater., **2021**, 31(34), p. 2102540.
3. F. Chang, Y. Xie, C. Li, J. Chen, J. Luo, X. Hu, J. Shen. Appl. Surf. Sci., **2013**, 280, p. 967–974.
4. S. Račkauskas, K. Jankauskas, A. Andrulevičius, A. Naujokaitis, A. Ramanavičius. Nanomaterials, **2017**, 7(11), p. 381.
5. S. Račkauskas, A. Andrulevičius, A. Naujokaitis, A. Ramanavičius. Nanotechnology, **2012**, 23, p. 95502.

COMPARATIVE LIFE-CYCLE ASSESSMENT OF TIMBER AND BRICK RESIDENTIAL BUILDINGS IN NORWAY: AN EVALUATION OF ENVIRONMENTAL IMPACTS

Umme Aimon^{1*}, Md. Mahedi Habib Chowdhury²

¹Electrical & Electronic Engineering, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

²Electrical and Computer Engineering, University of St. Thomas, St. Paul, United States

* umme.aimon@ktu.edu

This research examines two 50 m² buildings for the Norwegian cold climate, one timber and one brick, to determine which of the two building typologies is the most environmentally friendly [1]. The paper applies a Life Cycle Assessment (LCA) approach according to the ISO 14040/44 standards [2], and focuses on the production of materials, their transport, construction, and the operation phase of the buildings. Environmental impacts are quantified with SimaPro 10.1.0.6 software, using the ReCiPe 2016 Endpoint (H) method which assesses the impact on human health, environment and resource use [3].

Table 1. Material Inventory Comparison for Brick and Timber Buildings [4]

| Component | Material | Brick (kg/m ²) | Timber (kg/m ²) |
|------------|--------------|----------------------------|-----------------------------|
| Foundation | Concrete | 42.77 | 35.88 |
| Floors | Concrete | 539.13 | 267.55 |
| Floors | CLT | – | 71.90 |
| Walls | Concrete | 125.74 | 13.77 |
| Walls | CLT | – | 28.22 |
| Insulation | Mineral wool | 0.085 | 0.085 |

The outcomes demonstrate that the timber house has a better environmental performance than the brick house [4]. Specifically, it reduces the total impact score by approximately 44 %, largely due to timber having lower embodied emissions, being a lighter material and needing less space heating. The timber building's lifetime space heating is about 50 kWh/m², compared to almost 250 kWh/m² for the brick building because of poorer thermal insulation. Timber is also a carbon-storing, renewable resource that lowers global warming and fossil fuel use [1], [3], [5]. In the eco-design scenario, a redesign of the brick building was carried out to improve its sustainability. Here, the solid bricks were replaced with hollow eco-bricks and rock-wool insulation to optimize the thermal performance. This led to a reduction of more than 50% in the mass of the wall, which not only reduced emissions associated with the manufacturing of the wall but also increased the efficiency of transporting the wall elements [5]. These results are in line with the European Green Deal, suggesting that, in cold climates, timber buildings and optimized masonry systems can both have a role in low-carbon construction.

References:

1. K. Allan and A. R. Phillips, *Sustainability*, **2021**, vol (13), 6, p. 3401.
2. A. Takano et al., *Eur. J. Wood Wood Prod.*, **2015**, vol. 73, pp. 299–312.
- 3] Z. Chen et al., *Sustainability*, **2020**, vol. 12, no. 11, p. 4708.
4. S. Liang et al., *Wood Fiber Sci.*, **2020**, vol. 52, no. 2, pp. 217–229.
5. D. A. Ramos Huarachi et al., *Environ. Impact Assess. Rev.*, **2020**, vol. 80, 106335.

ĮSITERPUSIŲ Co^{2+} JONŲ ĮTAKA GIROLITO TERMINIAM STABILUMUI

Adrija Marija Paknytė^{*}, Tadas Dambrauskas

Kauno Technologijos Universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Kaunas, Lietuva

^{*}*adrija.paknyte@ktu.edu*

Susiduriant su tokiais iššūkiais kaip klimato kaita, tarša, biologinės įvairovės nykimas, išauga gamtai draugiškų medžiagų poreikis, kurios galėtų sumažinti neigiamą poveikį aplinkai [1,2]. Tokios medžiagos gali būti kalcio hidrosilikatai ($x\text{CaO}\cdot y\text{SiO}_2\cdot z\text{H}_2\text{O}$, čia x , y , z – moliniai koeficientai). Tai medžiagos, kurios pasižymi dideliu specifiniu paviršiaus plotu bei porų tūriu, cheminiu bei terminiu stabilumu [3,4]. Girolitas [$\text{Ca}_8\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$] priklauso kalcio hidrosilikatų šeimai bei pasižymi didžiausiais atstumais tarp silikatinių plokštumų (~0,3 nm), t.y. pakankamais papildomų jonų įterpimui, išlaikant krūvio neutralumą. Dėl šios priežasties girolitas yra perspektyvi medžiaga pažangiuose adsorbcijos procesuose, kaip: anglies dioksido adsorbcija ar nuotekų valymas [5]. Vis dėlto, yra nedaug duomenų apie girolito sintezę su įsiterpusiais pereinamųjų metalų jonais, terminį stabilumą bei taikymą. Todėl šio tyrimo tikslas buvo nustatyti įsiterpusių Co^{2+} jonų įtaką girolito terminiam stabilumui.

Girolitas su įsiterpusiais Co^{2+} jonais sintetintas kalcio oksido, amorfinio silicio dioksido ir kobalto nitrato mišiniuose, kurių CaO/SiO_2 molinis santykis yra lygus 0,66. Į 2 g kalcio oksido ir silicio dioksido mišinio buvo įpilta 20 mL vandeninio kobalto nitrato tirpalo ($c_{\text{Co}} = 10 \text{ g/L}$), siekiant gauti suspensijas ($V/K = 10$). Gautos suspensijos perkeltos į 23 mL PTFE indelius hidroterminėi sintezei. Indeliai patalpinti į „Parr Instruments“ autoklavą. Sintezė vykdyta 200 °C temperatūros aplinkoje 48 h. Gauti produktai išdžiovinti 50 °C temperatūros aplinkoje.

Nustatyta, kad sintezės metu susidarė girolitas su įsiterpusiais kobalto jonais. Skystosios terpės cheminė analizė patvirtino, kad į girolito struktūrą įsiterpė visi kobalto jonai buvę skystojoje terpėje (100 mg/g). Degimo rezultatai parodė, jog girolitas išlieka stabilus iki 300 °C temperatūros ir aukštesnės temperatūros aplinkoje pradeda persikristalizuoti į truskotitą, kuris yra dominuojantis produktas iki 700 °C temperatūros. Esant >800 °C temperatūros aplinkai, stebimas kristalinių junginių susidarymas, o pagrindinis degimo produktas yra volastonitas. Pažymėtina, jog šiomis sąlygomis identifikuotas ir kobalto silikatas. Tikėtina, jog aukštoje temperatūroje Co^{2+} jonai, kurie yra įsiterpę į girolito struktūrą, reaguoja su silicio dioksidu susidarant Co_2SiO_4 , t.y. kobalto silikatui. Volastonito kristalinės gardelė pasižymi dideliu tvarkumu. Volastonitas nėra linkęs į struktūrą priimti pašalinių jonų.

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-25-4.

Literatūros sąrašas:

1. J. Guo ir kt. Chinese Chemical Letters, **2025** (37), 2, p. 112116.
2. C. V. Amaechi ir kt. Materials Today Sustainability, **2026** (33), p. 101298.
3. Supriya ir kt. Journal of Cleaner Production, **2023** (417), p. 137466.
5. Q. Wu ir kt. Desalination and Water Treatment, **2025** (324), p. 101504.
6. K. Baltakys ir T. Dambrauskas. Synthetic Gyrolite. Springer Nature, **2024**, p. 41-77, p.139-209.

PLUOŠTINIŲ FILTRAVIMO MEDŽIAGŲ ANTIMIKROBINIS FUNKCIONALIZAVIMAS NANODALĖMIS

Justina Kukelkaitė^{1*}, Dainius Martuzevičius¹, Darius Čiužas¹, Martynas Tichonovas¹, Simas Račkauskas²

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

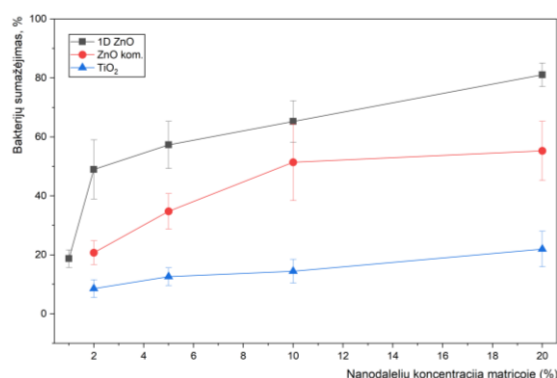
² Medžiagų mokslo institutas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*justina.kukelkaite@ktu.edu

Patalpų oro kokybė yra svarbus veiksnys, darantis įtaką žmonių sveikatai, nes ventiliacijos sistemose gali plisti įvairūs mikroorganizmai. Dėl to daug dėmesio skiriama antimikrobinų dangų kūrimui. Cinko oksido (ZnO) nanodalelės pasižymi antibakterinėmis savybėmis [1], tačiau jų efektyvumas priklauso nuo dalelių morfologijos ir įterpimo į polimerinę matricą. Šio darbo tikslas – įvertinti liepsnos sintezės būdu gauto ZnO (1D ZnO) pagrindu sukurtų dangų antibakterinį aktyvumą ir palyginti jį su komercinėmis ZnO (ZnO kom.), TiO₂, Cu ir Ag nanodalelėmis.

Nanodalelių antibakterinis aktyvumas pirmiausia vertintas suspensijų pavidalu, taikant šulinėlių difuzijos (angl. *well diffusion*) metodą prieš *Esherichia coli* ir *Staphylococcus aureus*. Vėliau nanodalelės buvo įterptos į poli[ε]-kaprolaktono (PCL) matricą elektroverpimo būdu. Susidariusių dangų antibakterinis aktyvumas nustatytas kontaktiniu metodu pagal ASTM E2180-07 standartą, vertinant bakterijų skaičiaus sumažėjimą po kontakto su danga.

Šulinėlių difuzijos metodu nustatyta, kad 1D ZnO ir ZnO kom. pasižymi antibakteriniu aktyvumu prieš *S. aureus* (esant 160 mg/mL konc. siekė 15 ± 1 mm 1D ZnO bei 17 ± 1 mm ZnO kom.). Prieš *E. coli* reikšmingas poveikis nepasireiškė, kas atspindi difuzija pagrįstą antibakterinio veikimo mechanizmą. TiO₂, Cu ir Ag antibakterinio aktyvumo neparodė. Dėl nehomogeniškos Cu ir Ag nanodalelių dispersijos elektroverpimo metu jų dangos toliau neanalizuotos. Kontaktiniu metodu nustatyta, kad 1D ZnO dangos efektyviai slopina *S. aureus*: esant 2 % koncentracijai bakterijų sumažėjimas siekė 48,98 %, o 1 % – 18,7 % (artima minimaliam efektyvumo lygiui - 20 %). Prieš *E. coli* poveikis silpnas: esant 2 % nustatytas 10,57 % sumažėjimas. Skirtumai siejami su bakterijų struktūra: gramneigiama *E. coli* turi papildomą išorinę lipidinę membraną (veikia kaip apsauginis barjeras).



1 pav. Skirtingų nanodalelių koncentracijų įtaka *S. aureus* bakterijų sumažėjimui PCL dangose

Literatūros sąrašas:

1. V. Puspasari ir kt. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, **2022**, 46, p. 1421-1445.

ORGANINIŲ ŽALIAVŲ EKSTRAKTŲ PANAUDOJIMAS TRĄŠŲ KŪRIMUI

Karina Kuzborskaja*, Kristina Jančaitienė

Fizikinės ir neorganinės chemijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas,
Kaunas, Lietuva

**karina.kuzborskaja@ktu.lt*

Žiedinės ekonomikos principai vis plačiau taikomi sprendžiant išteklių eikvojimo ir aplinkos degradacijos problemas, akcentuojant medžiagų pakartotinį panaudojimą ir atliekų vertės išsaugojimą. Kaip pažymima mokslinėje literatūroje, atliekų pagrindu sukurtos trąšos leidžia susigrąžinti maistines medžiagas iš jau egzistuojančių išteklių, taip mažinant neigiamą poveikį aplinkai ir didinant regioninį savarankiškumą [1]. Šiame kontekste organinių žaliavų panaudojimas trąšų gamybai prisideda ne tik prie atliekų kiekio mažinimo, bet ir prie dirvožemio derlingumo bei tvarios žemdirbystės užtikrinimo.

Šiame tyrime nagrinėtas augalams prieinamų makroelementų – azoto (N), fosforo (P) ir kalio (K) – išsiskyrimas iš pasirinktų organinių žaliavų: bananų žievių, kavos pupelių lukštų, kankorėžių bei džiovintų lubinų (violetinių ir rožinių) lapų ir stiebų. Maistinių medžiagų ekstrakcija atlikta trimis metodais: vandeniniu būdu, šarminiu (0,5 N KOH tirpalu) ir mineralizacijos būdu naudojant koncentruotą H₂SO₄.

Tyrimo rezultatai parodė, kad kalis lengviausiai pereina į tirpalą vandeninės ekstrakcijos metu, ypač iš bananų žievių, tuo tarpu lubinų biomasė ir kavos pupelių lukštai pasižymėjo didesne fosforo koncentracija. Šarminė ekstrakcija padidino maistinių medžiagų tirpumą, o mineralizacija užtikrino didžiausią azoto išgavimą, patvirtindama cheminio apdorojimo svarbą.

Remiantis gautais ekstraktais, buvo sukurtos 6 skirtingų sudėčių skystųjų trąšų markės. Jos pasižymėjo žema kristalizacijos temperatūra, kas yra svarbu sandėliuojant ir naudojant įvairiomis sąlygomis. Taip pat nustatytos pagrindinės fizikinės savybės – pH, klampa ir tankis, kurios patvirtino šių produktų tinkamumą praktiniam taikymui.

Gauti rezultatai rodo, kad organinės atliekos gali būti efektyviai panaudojamos kaip vertingas augalams prieinamų N, P ir K šaltinis. Tyrimas pabrėžia galimybes kurti aplinkai draugiškas trąšas, prisidedančias prie tvaraus maistinių medžiagų valdymo ir dirvožemio derlingumo atkūrimo.

Literatūros sąrašas:

1. Shrivastava V., Laasri I. Nutrient Recovery Strategies and Agronomic Performance in Circular Farming: A Comprehensive Review, Nitrogen **2025**, 6(3), 80.

ĮSITERPUSIŲ SN(IV) JONŲ ĮTAKA GIROLITO TERMINIAM STABILUMUI

Monika Bakierskytė*, Tadas Dambrauskas

Kauno Technologijos Universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Kaunas, Lietuva

*monbak3@ktu.lt

Oro tarša yra viena didžiausių aplinkosaugos problemų, o lakieji organiniai junginiai (LOJ) – svarbūs jos veiksniai. Katalizinė oksidacija efektyviai skaido LOJ į CO₂ ir H₂O, tačiau dėl brangių tauriųjų metalų (paladžio, platinos) katalizatorių jos taikymas ribotas, todėl ieškoma pigesnių alternatyvų [1,2]. Perspektyvūs yra kalcio hidrosilikatai su pereinamųjų metalų jonais, pasižymintys geru terminiu stabilumu, poringumu ir kataliziniu aktyvumu [3]. Deja literatūroje yra mažai duomenų apie šių junginių gamybą su pereinamųjų metalų jonais, pavyzdžiui alavu. Pastarasis metalas gali būti pritaikytas elektrocheminio CO₂ redukavimui, organinių junginių sintezei ar skaidymui. Deja literatūroje nėra duomenų apie alavo jonais modifikuotų kalcio hidrosilikatų savybes bei panaudojimo galimybes. Todėl šio darbo tikslas – nustatyti alavo jonų įterpimo į girolito struktūrą galimybę ir jų įtaka terminiam produktų stabilumui.

Šiame darbe naudotos žaliavos: kalcio oksidas (gautas degant kalcio karbonatą 950 °C temperatūros aplinkoje 2 h), amorfinis silicio dioksidas (SiO₂·nH₂O) ir alavo (IV) chlorido pentahidratas [Sn(Cl)₄·5H₂O]. Kalcio oksidas ir silicio dioksidas buvo sumaišyti taip, kad molinis CaO/SiO₂ santykis būtų lygus 0,66. Hidroterminė girolito sintezė vykdyta dviem etapais:

- 1) 2 g CaO ir SiO₂ mišinio sumaišyta su 20 mL vandens ir gauta suspensija hidroterminiškai apdorota PTFE indeliuose, įdėtuose į „Parr Instrument“ autoklavą, 200 °C temperatūroje 48 h.
- 2) suspensiją gautą po hidroterminės sintezės įdėta alavo nitrato priedo, kad gautame mišinyje alavo kiekis būtų lygus 100 mg viename grame CaO/SiO₂ mišinio. Gauta suspensija papildomai apdorota 24 h 200 °C temperatūros aplinkoje.

Nustatyta, kad pirmojo hidroterminės sintezės (200 °C, 48 h) etapo metu susidaro grynas girolitas (Ca₈Si₁₂O₃₀(OH)₄·7H₂O), kuris išlieka stabilus ir po antrojo etapo. Skystosios terpės analizės rezultatai parodė, kad sintezės metu visi alavo jonai įsiterpė į girolito struktūrą (100 mg/g). Nustatyta, kad girolitas palaipsniui dehidratuoja iki 700 °C temperatūros, o aukštesnėje persikristalizuoja į volastonitą (CaSiO₃). Pastebėta, kad alavo jonai reaguoja su kalciumu bei susidaro megavitas (CaSnO₃). Aukštesnės temperatūros aplinkoje (900 °C) kartu su minėtais produktais identifikuotas ir kaseritas (SnO₂).

Padėka. Finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-25-4.

Literatūros sąrašas:

1. Massolo, L. ir kt. Indoor-Outdoor Distribution and Risk Assessment of Volatile Organic Compounds in the Atmosphere of Industrial and Urban Areas. *Environmental Toxicology*, 2010, 25(4), p. 339–349.
2. Li, X., Ma, J., Ling, X. Design and Dynamic Behaviour Investigation of a Novel VOC Recovery System Based on a Deep Condensation Process. *Cryogenics*, 2020, 107, p. 103060.
3. Dambrauskas, T., Davidovičienė, D., Eisinas, A., Baltakys, K. Thermal Stability, Porosity, and Catalytic Activity of Compound Formed in a CaO–SiO₂–Cu(NO₃)₂–H₂O System. *Surfaces and Interfaces*, 2023, 37, p. 102696.

MIKROBIOLOGINIO ORO UŽTERŠTUMO MAŽINIMAS JONIZACINĖMIS TECHNOLOGIJOMIS

Patricija Kirvelaitytė*, Justinas Masionis, Martynas Tichonovas, Dainius Martuzevičius

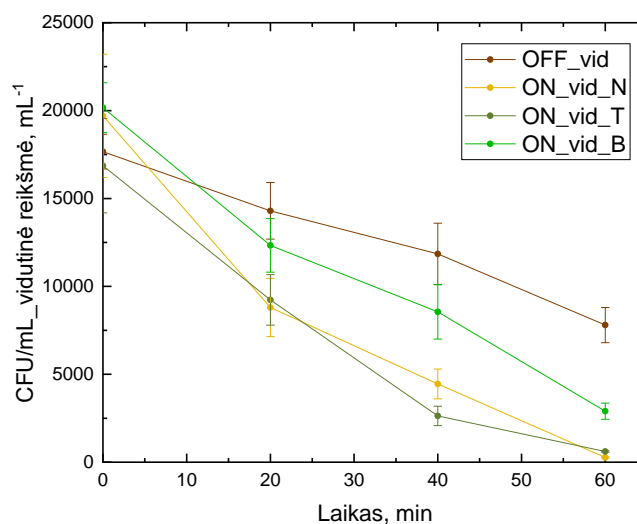
Aplinkosaugos technologijos katedra, Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas,
Kaunas, Lietuva

*patricija.kirvelaityte@ktu.lt

Ore plintančios virusinės ir bakterinės ligos kelia didelį pavojų visuomenės sveikatai, ką aiškiai parodė pastarojo šimtmečio pandemijos, įskaitant COVID-19 pandemiją ir kasmet pasikartojančius sezoninio gripo protrūkius. Šie įvykiai pabrėžia efektyvių technologijų svarbą gerinant patalpų oro kokybę ir mažinant mikrobiologinę oro taršą, ypač sveikatos priežiūros įstaigose, kur ore esančių mikroorganizmų koncentracija gali būti padidėjusi [1]. Šio darbo tikslas – sukurti ir įvertinti technologiją, galinčią efektyviai mažinti mikrobiologinę oro taršą.

Tyrime nagrinėtas neigiamų, teigiamų ir dvipolių oro jonų poveikis ore esančių bakterijų koncentracijos mažinimui, naudojant 4 kV įtampą. Į bandymų kamerą buvo aerosolizuota *Lactobacillus casei* suspensija (10^9 CFU/mL). Oro mėginiai buvo imami naudojant impingerį po 0, 20, 40 ir 60 minučių, jonizatoriui veikiant (ON) ir neveikiant (OFF). Surinkti mėginiai buvo pasėti į Petri lėkštes, inkubuoti ir suskaičiuoti kolonijas sudarantys vienetai (CFU).

Rezultatai parodė, kad jonizacijos metu bakterijų koncentracija ore mažėjo greičiau nei natūralaus nykimo sąlygomis. Po 60 minučių jonizatoriaus veikimo pasiekta iki 98,98 % redukcija. Gauti rezultatai bandymų metu yra pateikti 1 paveiksle, kuriuose naudojami trijų pakartojimų matavimų aritmetinis vidurkis ir standartinio nuokrypio paklaida. Rezultatai parodė, kad jonizacinės technologijos yra perspektyvi priemonė mikrobiologinei oro taršai mažinti.



1 pav. CFU/mL kitimas laike, esant įjungtam ir išjungtam jonizatoriui.

Literatūros sąrašas:

1. L. Song ir kt. Airborne pathogenic microorganisms and air cleaning technology development: A review, **2022**, 424, p. 11.

MIKROSKOPINIŲ GRYBŲ *TRICHODERMA VIRIDE* GYVYBINGUMO TYRIMAS KOMBINUOJANT JUOS SU SKIRTINGŲ RŪŠIŲ MINERALINĖMIS TRĄŠOMIS

Ugnė Mamonaitė^{1*}, Rasa Šlinkšienė¹, Renata Žvirdauskienė²

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

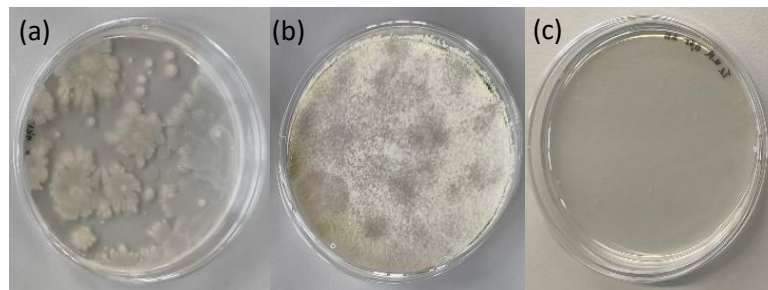
²Maisto mokslo ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*ugne.mamonaite@ktu.edu

Su augančiu maisto poreikiu, auga ir mineralinių trąšų poreikis, tačiau naudojant per didelį ar netinkamą kiekį, jų efektyvumas mažėja. Tokiu atveju augalai nepasisavina dalies maisto medžiagų, o perteklius patenka į dirvą bei požeminius vandenis ir gali paskatinti dirvožemio eroziją bei vandens eutrofikaciją [1]. Vienas iš naujesnių sprendimo būdų yra pridėti mikroorganizmų, kurie padėtų augalams efektyviau pasisavinti mineralinėse trąšose esančius elementus [2].

Šio tyrimo tikslas, nustatyti *Trichoderma viride* gyvybingumą sąveikoje su trijų rūšių kietosiomis mineralinėmis trąšomis (amonio nitratu, amonio hidrofosfatu ir karbamidu). Grybai su trąšomis buvo maišomi ir granuliuojami bei tabletuojami. Metodų parametrai buvo parinkti atsižvelgiant į mikroskopinio grybo savybes, metodikų specifikacijas ir remiantis literatūros duomenimis. Gyvybingumas vertintas taikant įpylimo metodą, pagal išaugusių kolonijų skaičių lyginant su pradiniu *Trichoderma viride* kolonijų skaičiumi [3].

Nustatyta, kad *Trichoderma viride* amonio nitrato ir karbamide išgyveno, tik tabletuojant. Amonio hidrofosfate mikroskopiniai grybai liko gyvybingi taikant abu kietųjų trąšų gavimo metodus.



1 pav. *Trichoderma viride* išgyvenamumo tyrimo rezultatai skirtingose mineralinėse trąšose: karbamide (a), amonio hidrofosfate (b), amonio nitrato (c)

Šis tyrimas atskleidžia galimybę naudoti *Trichoderma viride* kombinuojant juos su mineralinėmis trąšomis, kas atskleidžia ateities perspektyvą - padidinti trąšose esančių fosforo junginių, efektyvesnį įsisavinimą.

Literatūros sąrašas:

1. J. Zhao ir kt. Agriculture, Ecosystems & Environment, **2022**, 327, 107808.
2. I. Beltran – Medina ir kt. Nutrient Cycling in Agroecosystems, **2023**, 126, p. 21 – 34.
3. A. Perez Cordero ir kt. Journal of Posthumanism, **2024**, (4)3, p. 430–436.

Food Technology

Maisto technologija

OPTIMIZATION OF IVY GOURD (*COCCINIA GRANDIS* L.) DRYING AND PRETREATMENT PARAMETERS FOR DEVELOPMENT OF AN INSTANT SOUP MIX

Akila Ramesh^{1*}, Loreta Bašinskienė¹, Dawn CP Ambrose²

¹ Department of Food Science and Technology, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania.

² ICAR-Central Institute of Agricultural Engineering, Coimbatore, India.

* akila.ramesh@ktu.edu

Instant soup mixes are often considered as a convenient food option due to its stable shelf life [1]. But it also lacks the nutritional value that are required for human health. This research investigates the optimization of processing parameters and protocol development for creating an instant soup mix from an underutilized vegetable ivy gourd (*Coccinia grandis* L.), a vegetable known for its health benefits and bioactive compounds [2]. Ivy gourd fruit contains certain amount of fiber, moisture, and antioxidants, including vitamin C, β -carotene, lycopene [3]. The study aims to identify optimal drying temperature (50°C, 60 °C, and 70 °C) and pretreatment method (hot water blanching, steam blanching, and citric acid treatment) to preserve the nutritional content and sensory attributes of the ivy gourd fruits while ensuring its suitability for instant soup preparation. Using two-way ANOVA, it was observed that change in temperature and pretreatment technique had a significant result on vitamin C and β -carotene content in ivy gourd at the 1% level ($P < 0.01$). Ivy gourd control sample dried at 60°C retained maximum vitamin C (111.2 ± 6.0 mg/100 g), whereas control sample dried at 50°C retained maximum β -carotene (61.5 ± 4.7 μ g/g) as well as maximum rehydration ratio (5.13). Hot water blanching, steam blanching, and citric acid treatment reduced vitamin C and β -carotene content in ivy gourd fruits. Based on the maximum vitamin C retention, the control sample dried at 60°C was chosen for further product development. The research explored the development of an optimized protocol for incorporating ivy gourd into an instant soup mix, considering factors such as ingredient selection, blending ratios, and flavour enhancement. The final instant soup mix formed from ivy gourd, tomato, onion, garlic, coriander, and barnyard millet powders, pepper, and salt showed good nutritional profile – high amount of vitamin C (174.5 mg/100g), calcium (21.8 mg/100g) and low glycaemic index (49). Sensory evaluation indicated positive results for taste, texture and overall acceptability. The development of this instant soup mix could provide consumers with a convenient and nutritious food option while promoting the utilization of underutilized vegetables like ivy gourd.

References:

1. G.K. Gomathi, S. Parameshwari. *Biosciences Biotechnology Research Asia*, **2023** 20(1), p. 189-196.
2. A.M. Beera, L.P. Nori, S.M. Seethamraju. *Pharma Times*, **2022** 54(7), p.7-13.
3. P. Meenatchi, A. Purushothaman, and S. Maneemegalai. *J. Tradit. Complement. Med.*, **2017** vol. 7, p. 54–64.

EXTRACTION OF ESSENTIAL OIL FROM *ZANTHOXYLUM ARMATUM* BY HYDRODISTILLATION AND QUALITATIVE ANALYSIS OF VOLATILE COMPOUNDS

Armanda Uselytė*, Milda Keršienė, Renata Baranauskienė

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

*armanda.uselyte@ktu.edu

Zanthoxylum is a genus comprising more than 200 species (one of them is *Zanthoxylum armatum*) of aromatic trees and shrubs. The fruits of *Zanthoxylum armatum* possess a distinctive spicy, fresh, green, and floral aroma [1] and has potent antioxidant, anti-inflammatory, and anticancer properties making it valuable for food product development [2]. In this study, hydro-distillation method was applied to isolate essential oil (EO) from dried berries of *Z. armatum* whose yield was obtained 0.97 ± 0.01 % (v/w). The composition of EO volatile compounds was analyzed by gas chromatography time-of-flight mass spectrometry (GC-TOF/MS). In total, 55 volatile aroma compounds were identified in *Z. armatum* berry EO, which were categorised into nine chemical groups (Fig. 1). Monoterpene and sesquiterpene hydrocarbons were the major constituents in EO: limonene (40.61 ± 0.17 %), (*E*)-methyl cinnamate (23.59 ± 0.58 %), linalool (13.88 ± 0.08 %), β -phellandrene (9.50 ± 0.32 %), myrcene (3.84 ± 0.15 %), (*E*)-caryophyllene (2.44 ± 0.05 %) (Fig. 2). According to the “The Good Scents Company” database, these compounds contribute spicy (myrcene, (*E*)-caryophyllene), fresh, citrus, sweet (limonene, linalool), minty (β -phellandrene), balsamic, cherry ((*E*)-methyl cinnamate), woody, clove ((*E*)-caryophyllene) odour notes. *Z. armatum* berry EO was applied in chocolate candies with bergamot gel and milk chocolate ganache infused with earl grey tea. After sensory evaluation the assessors showed a preference for the products enriched with *Z. armatum* berry EO over the control samples.

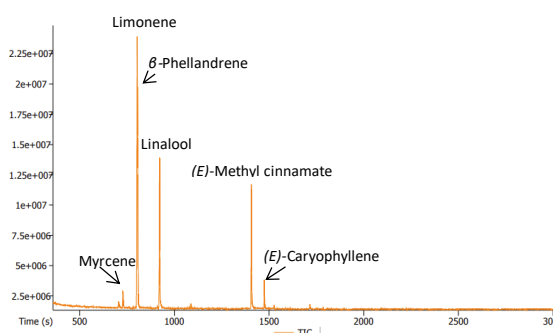
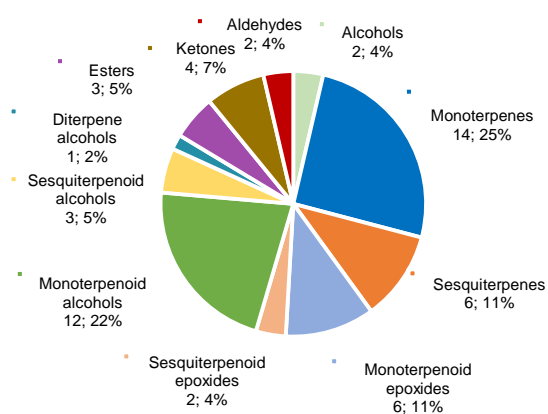


Fig. 1. The content of each volatile compound groups of *Z. armatum* berry EO.

Fig. 2. The GC-TOF/MS chromatogram of *Z. armatum* berry EO.

Acknowledgements. This work was supported by KTU academic mentorship funding 2025.

References:

1. N. M. Ivane, et al. Trends in Food Science & Technology, **2022** Vol(126), p. 1–12.
2. S. Punniyamoorthy, A. Adhikari, J. Baral, G. Singh, Y. R. Pokharel. *Results in Chemistry*, **2025** Vol(17), p. 102618.

THE DETERMINATION OF PHENOLIC COMPOUNDS AND CAROTENOIDS IN EXTRACTS FROM DIFFERENT COLOR CARROT (*DAUCUS CAROTA* L.) ROOT

Uladzislau Stuharau*, Dalia Urbonavičienė, Marina Sidorenko, Saulius Mickevičius

Faculty of Natural Sciences, Vytautas Magnus University, Universiteto Str. 10, 53361 Akademija, Lithuania

* vladstugarev@gmail.com

Carrots (*Daucus carota* L.) are a nutritious root vegetable grown around the world. They are valued for their high levels of bioactive compounds that offer health benefits. There is increasing interest in functional foods and natural sources of antioxidants [1]. This makes studying the phytochemical makeup and antioxidant qualities of different carrot varieties very important. The results of these studies could greatly affect choices about which carrot types to grow. This, in turn, would influence diets, the food industry, and drug production.

The aim of this study was to evaluate and compare the total phenolic compounds content and carotenoids content in extracts of edible carrot roots derived from five varieties: orange ('Riesen von Colmac'), yellow ('Janne du clouds'), white ('Küttiger'), black ('Black nebula'), purple with orange core ('Lila Lu'), and purple with white core ('Gniff').

The different colored roots of carrots were extracted using a 70 % ethanolic solution combined with ultrasound assisted extraction. The total phenolic content (TPC) was quantitatively assessed in extracts using the Folin-Ciocalteu methodology, with Gallic acid as the standard [2]. Carotenoids contents were determined using high-performance liquid chromatography (HPLC) with slightly modified method [3].

In conclusion, the total phenolic content (TPC) in the extracts differed among carrot varieties were determined. Depending on the variety, TPC varies from 13.9 to 345.6 mg GAE/100 g fw ($p < 0.05$). The highest TPC was demonstrated in the extracts obtained from 'Black nebula' ($p < 0.05$), while the lowest content of phenolic compounds was detected in the 'Riesen von Colmac' extracts ($p < 0.05$). Depending on the carrot variety, carotenoids content range from 0.2 to 26.9 mg/100 g fw. Orange carrots ('Riesen von Colmac') have the highest carotenoid content at (26.9 mg/100 g fw), followed by 'Lila Lu' (11.3 mg/100 g fw). Carrot (*Daucus carota* L.) cultivars of different colors – including orange, purple, yellow, white, and mixed colors – exhibit diverse phytochemical profiles, particularly in carotenoids and phenolic compounds.

References:

1. N. O. Boadi, et al (2021). Nutritional composition and antioxidant properties of three varieties of carrot (*Daucus carota*). *Scientific African*, 12.
2. Lamuela-Raventós, R. M. Measurement of antioxidant activity & capacity: recent trends and applications, 2018, 107-115.
3. Bobinaitė, R. (2020). Recovery of bioactive substances from rowanberry pomace by consecutive extraction with supercritical carbon dioxide and pressurized solvents. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 85, 152–160.

PHYTOCHEMICAL COMPOSITION AND FUNCTIONAL PROPERTIES OF *SIDERITIS SCARDICA* AND *SIDERITIS SYRIACA* EXTRACTS OBTAINED BY PRESSURIZED LIQUID EXTRACTION

Greta Tverskytė*, Marius Užupis, Michail Syrpas, Petras Rimantas Venskutonis, Vaida Kitrytė-Syrpa

Department of Food Science and Technology, Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania.

* g.tverskyte@ktu.edu

Sideritis scardica and *Sideritis syriaca* belong to the *Lamiaceae* family and are widely distributed in the Mediterranean region. Locals from ancient times used these medical plants for sore throat, cold and respiratory disorder treatment. Nowadays *Sideritis* plants have gained more attention due to high amount of biologically active compounds that potentially could be used in food supplement and medical industry. To better understand the distribution of biologically active compounds among different plant parts and the influence of solvent polarity, both sequential and non-sequential pressurized liquid extraction (PLE) were performed on the leaves, stems, and flowers of *S. scardica* and *S. syriaca*. In this study, phenolic content, antioxidant capacity, α -amylase inhibition, sun protection factor (SPF), and induction period in emulsions were evaluated. Extraction yield varied depending on plant species, plant part, and solvent, ranging from 2.4 to 34.5 mg/100 g in leaves, 0.7 to 20.9 mg/100 g in stems, and 2.5 to 28.4 mg/100 g in flowers. Among all extracts, acetone extracts exhibited the highest antioxidant activity. Total phenolic content (TPC) ranged from 120 to 237.5 mg GAE/g extract, while antioxidant capacity (ABTS assay) varied from 370.4 to 733 mg TE/g extract. The α -amylase inhibition results showed that leaf extracts exhibited stronger activity compared to flower extracts (IC_{50} values are 4.4 and 13.8 mg/mL, respectively). Sun protection factor (SPF) values were highest in hydroethanolic and ethanolic extracts, ranging from 2.2 to 48.5, depending on plant species, plant part, solvent and extract concentration. Additionally, *S. syriaca* extracts provided better photoprotective effects compared to *S. scardica*. Similar trends were observed in oxidation stability study in emulsions, where *S. syriaca* demonstrated slightly higher protection factor (PF) values than *S. scardica* with PF values of 2.14 and 2.08, respectively. Various phenolic acids and flavonoids identified in these extracts by HPLC–MS/MS are likely responsible for their antioxidant, enzyme-inhibitory, and photoprotective activities, highlighting their potential for use in functional product development.

CUKRINIŲ RUNKELIŲ IŠSPAUDŲ PANAUDOJIMAS BIOETANOLIO GAMYBAI

Radvilė Bagdonavičiūtė, Daiva Žadeikė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

radvile.bagdonaviciute@ktu.edu

Cukrinių runkelių išspaudos (CRI) yra pagrindinis cukraus pramonės šalutinis produktas [1]. Dėl savo unikalios sudėties CRI laikoma perspektyvia lignoceliuliozine žaliava pridėtinės vertės bioproduktų gamybai. Dėl didelio celiuliozės, hemiceliuliozės ir pektino kiekio, pirminis CRI apdorojimas yra būtinas etapas, siekiant panaudoti šią žaliavą tolesnei biokonversijai [2, 3]. Tyrimo tikslas buvo įvertinti pirminio CRI apdorojimo ultragarsu (UG) poveikį fermentinės hidrolizės efektyvumui ir fermentacijai į bioetanolį, skirtingomis mielių padermėmis.

Rezultatai parodė, kad didinant apdorojimo UG temperatūrą nuo 50 iki 70 °C (sausų medžiagų kiekis masėje 10 proc.) ir ilginant apdorojimo trukmę nuo 30 iki 50 min, galima padidinti redukuojančių sacharidų (RS) susidarymą vidutiniškai atitinkamai 9 ir 8 proc. Padidinus UG intensyvumą nuo 80 iki 100 %, RS koncentracija CRI masėje padidėjo 4,5 proc., priklausomai nuo temperatūros. Ilgesnė UG apdorojimo trukmė, ypač esant 70 °C temperatūrai, mažino sacharidų koncentraciją terpėje.

Apdorojimas UG turėjo teigiamos įtakos CRI fermentinės hidrolizės efektyvumui. Tyrimas parodė, kad dėl platesnio aktyvumo spektro efektyviausiu atrinktas Viscozyme L fermentinis preparatas, kuris veiksmingiau skaido CRI matricą nei kiti analizuoti fermentai. Naudojant Viscozyme L ir Pectinex UT atskirai (50 °C; hidrolizės trukmė 48 val; pH 5), didžiausias RS kiekis terpėje nustatytas po 24-30 valandų, atitinkamai 46,45 ir 47,88 mg/ml. Ilgesnė hidrolizė nepadarė didelės įtakos RS susidarymui, o tam turėjo įtakos biocheminiai apribojimai, tokie kaip produkto slopinimas ar fermentų prisotinimas. Taip pat nustatyta, kad RS koncentraciją CRI hidrolizate galima padidinti iki 84,76 mg/ml, kombinuojant Viscozyme L ir Pectinex UT preparatus ir didinant CRI s.m. kiekį mėginyje.

Eksperimento metu nustatyta, kad CRI hidrolizatų fermentacijai į etanolį įtakos turėjo naudojamų mielių padermių metabolinės savybės. Kai pradinė CRI s.m. koncentracija buvo 10 proc. ir naudotos *Saccharomyces cerevisiae* mielių padermės (kurios efektyviai fermentuoja heksozes), po 72 val. vidutiniškai etanolio gauta 1,15 %v/v. Pentozes fermentuojančios mielių padermės (kaip *Candida albicans* ir *C. tropicalis*) tokiomis pačiomis sąlygomis leido išgauti atitinkamai 1,07 ir 1,33 %v/v etanolio. Tokiu būdu, pentozes fermentuojančių mielių įtraukimas į bioetanolio gamybą įvertintas tikslingu. Heksozes ir pentozes fermentuojančių mielių kombinacija padidino CRI hidrolizatų fermentacijos į etanolį efektyvumą – po 72 val. fermentacijos vidutiniškai susidarė 3,45 %v/v etanolio (s.m. kiekis 16 proc.). Tyrimo rezultatai parodė, kad CRI gali būti efektyviai panaudotos kaip substratas biokonversijos procesams, kurių efektyvumui užtikrinti svarbus pirminis apdorojimas bei fermentinės hidrolizės ir fermentacijos sąlygų optimizavimas.

Literatūros sąrašas:

1. T. Zhang, et.al. *Food Hydrocolloids*, **2021** (116), p. 106646.
2. Z. M. A. Bundhoo et. *Ultrasonic Sonochemistry*, **2018** (40), p. 298-313.
3. K. Dhodduraj et al. *Industrial Crops and Products*, **2026** (240), p. 122559.

Biochemistry and Biotechnology

Biochemija ir biotechnologija

ADDRESSING DRUG DELIVERY CHALLENGES OF ASTAXANTHIN THROUGH LIPOSOMAL TECHNIQUES FOR ORAL ANTICANCER THERAPY

Hamidreza Sahaleh^{1*}, Dr. Jolita Stabrauskienė², Prof. dr. Jurga Bernatoniene²

¹Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania

²Lithuanian University of Health Science (LSMU), Kaunas, Lithuania

* Hamidreza.sahaleh@ktu.edu

Astaxanthin is a naturally occurring marine carotenoid which is widely found in marine organisms such as microalgae, shrimp, krill, and salmon. Because of its unique chemical structure, which includes a long conjugated polyene chain and terminal hydroxyl and keto groups, astaxanthin shows very strong antioxidant activity considerably higher than commonly used antioxidants such as vitamins C and E, and has anticancer potential, anti-inflammatory, antihypertensive, antimicrobial and neuroprotective. However, the therapeutic use of astaxanthin is limited due to its poor solubility and low bioavailability which make its effective delivery to target cells challenging. [1]

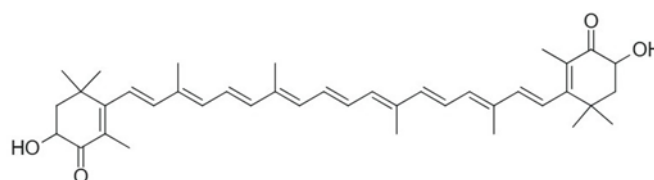


Fig. 1. Chemical structure of Astaxanthin

The aim of this study was to develop a liposomal formulation of astaxanthin. Liposomes are spherical vesicular and colloidal delivery systems which are made up of bilayer amphiphilic lipid membrane such as phospholipids and a hydrophilic core. These structures have many advantages which make drug delivery more effective [2]. In this study, liposomal astaxanthin was prepared by using the thin-film hydration method. In terms of particle size, a Z-average of 114 nm was observed, which confirms nanoscale liposomes suitable for drug delivery. Moreover, a Polydispersity Index (PDI) of 0.27 and a zeta potential of -19.2 mV which show uniform size distribution and colloidal stability. Also, a high encapsulation efficiency of 85% shows effective and efficient loading of astaxanthin into the lipid bilayer. To improve stability and protect astaxanthin from thermal degradation, the liposomal dispersion was converted into microcapsules by lyophilization.

This formulation strategy indicates the potential of liposomal astaxanthin microcapsules as an oral delivery system for anticancer applications. However, the stability studies, particularly in terms of encapsulation efficiency show that further investigation is needed to maintain long-term formulation stability.

References:

1. H. Wu, H. Zhang, X. Li, F. Secundo, X. Mao. Preparation and characterization of phosphatidyl agar oligosaccharide liposomes for astaxanthin encapsulation. *Food Chemistry*, 404, 2023, 134601.
2. Y. Chang, Q. Li, Q. He, Y. Guo, Q. Li, Y. Yang, et al. Development of astaxanthin-loaded nanostructured lipid carriers: physicochemical properties and oral bioavailability. *Drug Delivery*, 29(1), 2022, 843–854.

SYNTHESIS OF α -KETOAMIDE PSEUDOPEPTIDES TO INHIBIT HTRA ENZYME OF *HELICOBACTER PYLORI*

Maja Bogusz*, Anna Katarzyna Puszko

Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Warsaw, Poland

* m.bogusz13@student.uw.edu.pl

Helicobacter pylori are bacteria colonizing epithelial cells of gastric mucosa, which could lead to chronic gastritis, stomach ulcer or even cancer. One of the virulence factors of *H. pylori* is the HtrA enzyme. It is a protease which cleaves intercellular junction proteins. It makes it possible for bacteria to reach the basal side of gastric epithelial cells and leads to further infection [1].

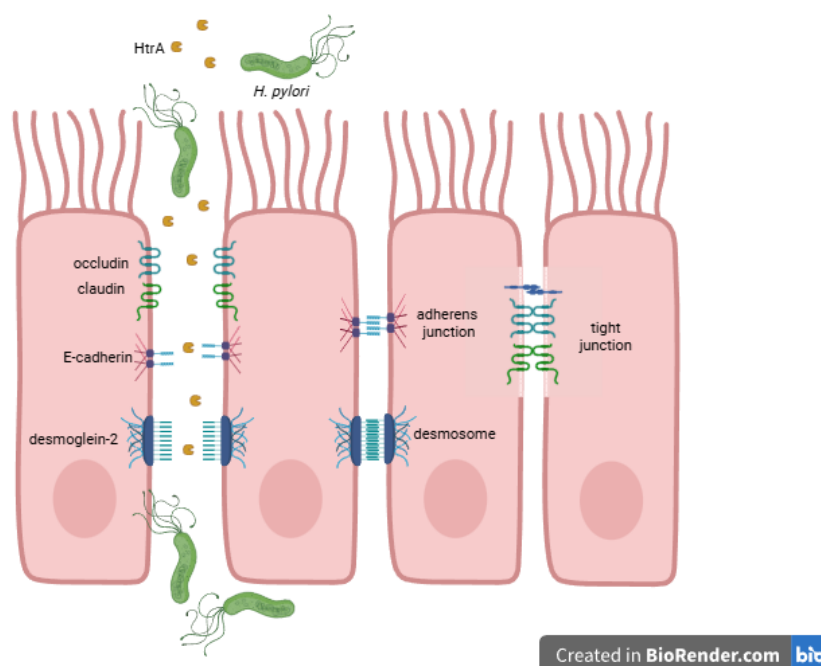


Fig. 1. *H. pylori* HtrA influence on gastric epithelial cells.

A popular strategy in protease inhibitor design is reversible covalent inhibition. These kinds of drugs are less toxic than typical covalent inhibitors which could bind irreversibly to off-target proteins. At the same time they still have advantages of covalent bond, such as prolonged duration of action. One of reversible covalent inhibitors' warheads with uniquely great properties are α -ketoamides [2].

The aim of this work was to design and synthesize α -ketoamide pseudopeptides to inhibit the HtrA enzyme of *H. pylori* by reversible covalent inhibition. α -ketoacid building block (Fmoc-Ala analogue) was synthesized and used in classic solid phase peptide synthesis (Fmoc-SPPS). Eight pseudopeptides were successfully obtained and are going to be examined for their influence on *H. pylori*.

References:

1. L. Cui, *et al.* *International journal of biological macromolecules*, **2023** 243, 125274
2. Faridoun, J. Zheng, G. Zhang, J. J. Li. *Future Medicinal Chemistry*, **2025** 17(4), p. 389–392

NAUJI PIRIDINO-(1,2,4-TRIAZOL-3-TION)HIDRAZONO DARINIAI: SINTEZĖ IR AKTYVUMO ĮVERTINIMAS

Klaudija Jasiulionytė*, Ilona Jonuškienė¹, Kristina Kantminienė², Ingrida Tumosienė¹

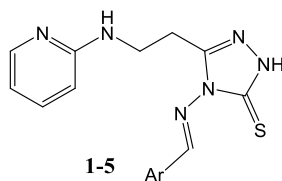
¹ Organinės chemijos katedra, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

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

*klaudija.jasiulionyte@ktu.edu

Heterociklinius karkasus turintys junginiai sudaro vieną svarbiausių šiuolaikinių vaistinių medžiagų klasių. Šie struktūriniai fragmentai reikšmingai lemia junginių biologines ir fizikochemines savybes, įskaitant farmakodinamiką, farmakokinetiką ir biologinį prieinamumą. Dėl to heterocikliniai junginiai plačiai paplitę vaistų chemijoje ir sudaro didelę dalį mažos molekulinės masės terapinių agentų [1]. Ypatingą vietą tarp jų užima piridino dariniai, įskaitant 2-aminopiridiną, kuris šiame darbe naudotas kaip pagrindinis sintezės blokas naujų bioaktyvių junginių gavimui. Piridino žiedas pasižymi cheminiu stabilumu, hidrofiliškumu ir gebėjimu sudaryti vandenilinius ryšius, todėl yra svarbus sąveikoms su biologiniais taikniais [2].

Darbo tikslas – susintetinti naujus hidrazonų darinius ir įvertinti jų biologinį aktyvumą bei ADMET savybes.



1 Pav. Hidrazonai 1 - 5.

Siekiant įvertinti susintetintų junginių biologinį prieinamumą ir toksiškumo profilį, atlikta *in silico* ADMET analizė. Visi junginiai atitinka Lipinskio taisyklės kriterijus, rodančius jų „drug-like“ savybes. Lipofiliškumo analizė parodė, kad hidrazonai 1–5 yra lipofiliški ($\log P > 0$), o didžiausiu lipofiliškumu pasižymi 1,2,4-triazolo-3-tiono darinys su 4-bromtiofeno pakaitu. Nors junginiai skiriasi lipofiliškumu, galinčiu turėti įtakos biologiniam prieinamumui, remiantis ADMET duomenimis, 4-amino-5-(2-(piridin-2-ilamino)etil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tionas ir 5-(2-(piridin-2-ilamino)etil)-4-((tiofen-3-ilmetilen)amino)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tionas išsiskiria kaip perspektyviausi kandidatai dėl palankių farmakokinetinių savybių.

Literatūros sąrašas:

1. A. Šermukšnytė, K. Kantminienė, I. Jonuškienė, I. Tumosienė, V. Petrikaitė. The Effect of 1,2,4-Triazole-3-thiol Derivatives Bearing Hydrazone Moiety on Cancer Cell Migration and Growth of Melanoma, Breast, and Pancreatic Cancer Spheroids, **2022** (15), p. 1026-1046.
2. A. Šermukšnytė, M. Stasevych, O. Komarovska-Porokhnyavets, V. Zvorych, E. Jakubauskienė, K. Kantminienė, I. Tumosienė. Novel Antimicrobial and Antitumor Agents Bearing Pyridine-1,2,4-triazole 3-thione-hydrazone Scaffold: Synthesis, Biological Evaluation, and Molecular Docking Investigation, **2024** (14), p.1592–1613.

TAIKINIŲ TERAPIJOS JUNGINIŲ POVEIKIO ENDOMETRIUMO VĖŽIO 2D IR 3D MODELIAIS ANALIZĖ

Laura Marija Račytė¹, Evelina Šidlovskā², Margarita Montrimaitė³, Gediminas Januška³,
Rūta Čiurlienė³, Eglė Žalytė¹

¹Gyvybės mokslų centras, Biomokslų institutas, Biochemijos ir molekulinės biologijos katedra, Vilnius, Lietuva

²Valstybinis patologijos centras, Vilnius, Lietuva

³Nacionalinis vėžio centras, Vilnius, Lietuva

* *laura.racyte@gf.stu.vu.lt*

Endometriumo vėžys (EV) yra vienas iš labiausiai paplitusių moterų vėžio atvejų, pasižymintis dideliu sergamumu Europoje, ypač Vidurio ir Rytų [1]. Ligos vystymąsi lemia daug tarpusavyje susijusių veiksnių, įskaitant hormonų disbalansą, medžiagų apykaitos sutrikimus, didesnę kūno masės indeksą ir vyresnę amžių [2]. Nepaisant chirurginio gydymo veiksmingumo ankstyvosiose ligos stadijose, kai kurioms pacientėms reikalingas papildomas sisteminis gydymas. Deja, chemoterapija, pagrįsta platinos junginiais ir taksanais, dažnai pasižymi ribotu selektyvumu ir sukelia didesnę šalutinį poveikį. Dėl to vis daugiau dėmesio skiriama taikinių terapijos strategijoms, kurios teikia pagrindą individualizuotam gydymui [3]. PI3K/AKT/mTOR kelio, receptorinių tirozino kinazių slopikliai, įvairūs ląstelių ciklo, proliferacijos ir išgyvenimo reguliatoriai, PARP polimerazės ir branduolio transporto slopikliai buvo identifikuoti kaip potencialūs EV terapijos taikiniai.

Norint įvertinti tokių junginių veiksmingumą, būtini tinkami ikiklinikiniai modeliai, kurie atspindėtų naviko biologinį sudėtingumą. Ilgą laiką vėžio tyrimuose dominavo 2D ląstelių kultūros, tačiau jos nepakankamai atkuria naviko mikroaplinką, ląstelių tarpusavio sąveiką. Pastaraisiais metais vis labiau populiarėja 3D modeliai, pavyzdžiui sferoidai, kurie geriau imituoja *in vivo* sąlygas, įskaitant difuzijos gradientus, naviko heterogeniškumą ir nuo ekstraląstelinio užpildo priklausomus signalinius kelius [4]. Dėl šių savybių 3D modeliai laikomi tinkamesniais vaistų atsako ir naviko elgsenos tyrimams.

Siekiant įvertinti taikinių terapijos junginių poveikį Lietuvos regiono pacienčių EV ląstelėms, buvo naudojamos anksčiau mūsų projektuose išvestos vėžinės endometriumo naviko ląstelių linijos. Pirmiausia spektrofotometriškai buvo įvertintas ląstelių linijų 2D ir 3D modelinių sistemų metabolinis aktyvumas po ikiklinikiniuose EV tyrimuose naudojamų junginių poveikio. Siekiant išsamiau charakterizuoti šių junginių biologinį poveikį, toliau analizė buvo papildyta fluorescencinės mikroskopijos duomenimis, leidžiančiais atskirti ląstelių metabolinį aktyvumą ir žūtį 3D kultūrose. Toks metodologinis išplėtimas suteikia galimybę išsamiau įvertinti taikinių terapijos veikimą ir geriau suprasti EV ląstelių atsaką į gydymą.

Padėka. Šį darbą finansavo VU Mokslo skatinimo fondas (projekto nr. MSF-JM-17/2022), Ateities biomedicinos fondas (projekto nr. (1.78) SU-442) ir Lietuvos mokslo taryba (projekto nr. S-ST-24-101).

Literatūros sąrašas:

1. F. Bray et al., "Global cancer statistics 2022: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries," *CA a Cancer Journal for Clinicians*, Apr. **2024**, 74, no. 3, p. 229–263.
2. V. Makker et al., "Endometrial cancer," *Nature Reviews Disease Primers*, Dec. **2021**, 7, 1, p. 88.
3. M. Remmerie and V. Janssens, "Targeted therapies in Type II endometrial cancers: Too little, but not too late," *International Journal of Molecular Sciences*, Aug. **2018**, 19, 8, p. 2380.
4. Y. M. Salinas-Vera et al., "Three-Dimensional 3D culture models in gynecological and breast cancer research," *Frontiers in Oncology*, May **2022**, 12, p. 826113.

ANGLIES ŠALTINIŲ ĮTAKA BAKTERINIO KSANTANO SUSIDARYMUI IR PRODUKTO ANTIOKSIDACINĖMS SAVYBĖMS

Tomas Vaičiulis*, Ilona Jonuškienė

Cheminės technologijos fakultetas, Kauno technologijos universitetas, Kaunas, Lietuva

*tomvai16@ktu.lt

Ksantanas yra vienas svarbiausių mikrobinės kilmės polisacharidų, plačiai taikomas įvairiose pramonės srityse dėl savo išskirtinių fizikocheminių savybių. Jis sintetinamas bakterijų *Xanthomonas campestris* fermentacijos metu ir pasižymi didele molekuline mase bei gebėjimu sudaryti klampus, pseudoplastinius tirpalus net esant mažoms koncentracijoms [1]. Ksantano struktūrą sudaro į celiuliozę panaši pagrindinė grandinė prie kurios prisijungusios trisacharidinės šoninės grandinės, kurios lemia jo stabilumą esant įvairioms pH ir temperatūros sąlygoms bei didelėms druskų koncentracijose [2].

Šiuo metu ksantanas yra plačiai naudojamas maisto, farmacijos, kosmetikos, naftos bei kitose pramonės srityse kaip tirštiklis, stabilizatorius ir emulsiklis [2, 6]. Didėjanti paklausa skatina ieškoti efektyvesnių ir ekonomiškesnių gamybos būdų, ypač naudojant atsinaujinančius žaliavų šaltinius [3]. Dėl netoksiškumo, biologinio suderinamumo ir biodegradacijos savybių jis laikomas saugiu maisto priedu ir atitinka šiuolaikinius ekologiškų produktų kūrimo principus [1, 5].

Ksantano biosintezė priklauso nuo daug veiksnių, iš kurių ypač svarbūs yra parinkti anglies ir azoto šaltiniai, fermentacijos sąlygos bei mikroorganizmų padermės savybės. Įvairūs anglies šaltiniai gali reikšmingai paveikti tiek ksantano išėigą, tiek jo struktūrines bei funkcines savybes. Be to, nustatyta, kad naudojant atsinaujinančius substratus galima ne tik padidinti produkto išėigą, bet ir pagerinti jo antioksidacines (redukcines) savybes [5].

Ksantano gamybos optimizavimas, parenkant tinkamus anglies šaltinius, yra svarbus siekiant efektyvesnės ir tvaresnės biotechnologinės gamybos. Šiame darbe nagrinėjama skirtingų anglies šaltinių (gliukozės, sacharozės, fruktozės, arabinozės, sorbitolio, galaktozės, ksilozės, ksilitolio, eritritolio ir manitolio) bei jų skirtingos koncentracijos (20, 40 ir 60 g/l) įtaka bakterinio ksantano susidarymui ir jo antioksidacinėms savybėms, siekiant įvertinti jų reikšmę produkto kokybei ir pritaikomumui pramonėje.

Literatūros sąrašas:

1. M.K. Gowthaman, M.S. Prasad, N.G. Karanth. Encyclopedia of Food Microbiology, **2014**, 1 tomas, p. 816-821.
2. G. Sworn. Food Stabilisers, Thickeners and Gelling Agents, **2010**, p. 325-334.
3. M. H. A. Elellaa, E. S. Godab, M. A. Gab-Allahd, S. E. Hongb, B. Pandite, S. Leef, H. Gamalg, A. Rehmanh, K. R. Yoon. Journal of Environmental Chemical Engineering, **2021**, p. 1-3.
4. H. Habibi, K. Khosravi-Darani. Biocatalysis and Agricultural Biotechnology, **2017**, p. 130-140.
5. I. Jonuškienė, E. Davicijonaitė, M. Vaškevičiūtė, I. Kala, R. Stankevičienė, K. Kantminienė, I. Tumosienė. Sustainable Production and Antioxidant Activity of Bacterial Xanthan Gum, Lithuania, **2025**.

VIRUSINIAIS VEIKSNIAIS STIMULIUOTŲ KVĖPAVIMO TAKŲ UŽLĄSTELINIŲ PŪSLELIŲ POVEIKIS SMEGENŲ KAPILIARŲ ENDOTELIO LĄSTELIŲ BARJERINEI FUNKCIJAI IR UŽDEGIMINIAM ATSAKUI

Nikolas Žumbakis^{1*}, Radvilė Gailiūnaitė¹, Aistė Jekabsone¹, Deimantė Puzinová¹

¹ Vaistinių medžiagų ikiklinikinių tyrimų laboratorija, Kardiologijos institutas, Lietuvos sveikatos mokslų universitetas, Kaunas, Lietuva

* nikolas.zumbakis@stud.lsmu.lt

Ivadas. Šiuolaikinėje biomedicinoje plaučių–smegenų ašis laikoma svarbiu komunikacijos keliu, per kurį kvėpavimo takų uždegiminiai signalai veikia CNS homeostazę. Smegenų kapiliarų endotelio ląstelės, sudarančios kraujo–smegenų barjerą (KSB), yra itin jautrios sisteminiam uždegimui. Naujausi tyrimai rodo, kad periferinės virusinės infekcijos, kaip SARS-CoV-2, gali sukelti ilgalaikius neurovaskulinius pažeidimus, tiesiogiai neinfekuojuodami smegenų audinio [1]. Manoma, kad šio proceso tarpininkai yra užląstelinės pūslelės (UP), kurios perneša pro-uždegiminius veiksnius. **Šio tyrimo tikslas** – įvertinti virusiniais veiksniais stimuliuotų kvėpavimo takų epitelio ląstelių UP poveikį žmogaus smegenų kapiliarų endotelio ląstelių barjerinei funkcijai ir uždegiminių atsakui.

Metodai. Žmogaus bronchų epitelio ląstelės (HBEC3-KT) buvo stimuliuojamos viruso mimetiku poli I:C ir SARS-CoV-2 spyglio baltymo receptorių surišančiu domenu (RBD). UP buvo išskirtos iš ląstelių terpės taikant polimerinės precipitacijos metodą ir charakterizuotos pagal dydį –nanodalelių sekimo analize (NTA) ir specifinius paviršiaus žymenis (Luminex). Tyrimams naudota hCMEC/D3 endotelio ląstelių linija (kaip *in vitro* KSB modelis). Barjero vientisumas vertintas matuojant transendotelinę elektrinę varžą (TEER) ir atliekant glaudžiųjų jungčių analizę (imunocitochemijos būdu). Uždegiminis atsakas vertintas analizuojant citokinų sekreciją (Luminex) ir oksidacinį stresą, nustatant bendrą bei mitochondrijų reaktyviųjų deguonies formų (ROS) kiekį, atitinkamai DCFH-DA ir MitoSOX fluorescuojančiais dažais.

Rezultatai. Atlikus nanodalelių sekimo analizę ir įvertinus specifinius paviršiaus žymenis, patvirtintas kvėpavimo takų UP išskyrimas bei jų endosominė kilmė; dalelių dydis svyravo nuo 50 iki 400 nm. Nustatyta, kad virusiniais veiksniais stimuliuotų ląstelių kilmės UP visose tirtose grupėse reikšmingai mažino TEER, rodydamos endotelio barjero vientisumo sutrikimą, ir sukėlė glaudžiųjų jungčių persitvarkymą. Taip pat stebėtas reikšmingas ROS lygio padidėjimas ir sustiprėjusi uždegiminių citokinų sekrecija.

Išvados. Nustatyti pokyčiai rodo endotelio barjerinės funkcijos sutrikimą ir uždegiminio atsako aktyvaciją, atspindinčius KSB disfunkciją *in vitro*, bei leidžia manyti, kad UP gali prisidėti prie plaučių–smegenų ašies signalinių mechanizmų virusinių infekcijų metu.

Literatūros sąrašas:

1.S. M. Buzhdygan et al. Biochemica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes, **2020**, 183, p. 104951.

**Studentų mokslinės konferencijos
„Chemija ir cheminė technologija 2026“ pranešimų
Medžiaga**

ISSN 2538-7332 (online)

Išleido Kauno technologijos universitetas,
K. Donelaičio g. 73, LT- 44029 Kaunas

**The Abstract Book of the Student’s Scientific Conference
„Chemistry and Chemical Technology 2026“**

ISSN 2538-7332 (online)

Published by Kaunas University of Technology,
K. Donelaičio str. 73, LT- 44029 Kaunas