



# Studentų moksliniai tyrimai 2019/2020

Konferencijos pranešimų santraukos



Lietuvos  
mokslų  
taryba



Kuriame  
Lietuvos ateitį  
2014–2020 metų  
Europos Sąjungos  
fondų investicijų  
veiksmų programa

ES investicijos – mokslui ir inovacijoms  
Finansuoja Europos socialinis fondas

# TURINYS

## I. GAMTOS MOKSLAI BIOCHEMIJA

---

<b>D. Daunoraitė, D. Matulis</b> <i>TRYPANOSOMA CRUZI</i> HSP90 N GALO DOMENO GAVIMAS IR STABILUMO TYRIMAS.....	10
<b>D. Galalytė, S. Vaitkienė</b> <i>CANDIDA ALBICANS</i> FORMUOJAMŲ BIOLĖVELIŲ SLOPINIMAS PANAUDOJANT NAUJAI SUSINTETINTUS PIRIDINŲ KLASĖS JUNGINIUS.....	11
<b>R. Ivanickaitė, G. Sasnauskas</b> CRISPR-CAS SISTEMŲ ADAPTACIJOS BALTYMŲ TYRIMAI IN VITRO .....	13
<b>G. Janulevičiūtė, A. Kanopka</b> SPLAISINGO VEIKSNIO U2AF JTAKA SU NEURODEGENERACINĖMIS LIGOMIS SIEJAMŲ APP IR TAU IRNRN IZOFORMŲ SUSIDARYMUI HIPOKSIDINĖSE SMEGENŲ LAŠTELĖSE .....	15
<b>A. Juškauskas, L. Truncaitė</b> <i>ESCHERICHIA COLI</i> TRANSLIACIJOS BALTYMŲ IR LIZINIŲ FAGŲ BALTYMŲ SĄVEIKOS.....	18
<b>K. Keda, G. Tamulaitis</b> III TIPO CRISPR-CAS EFEKTORINIO KOMPLEKSO OPTIMIZAVIMAS TYRIMAMS PAVIENIŲ MOLEKULIŲ METODAIS .....	21
<b>A. Kopūstas, M. Zaremba</b> ENDONUKLEAZIŲ SĄVEIKOS SU DNR TYRIMAI PAVIENIŲ MOLEKULIŲ LYGMENyje.....	22
<b>J. Martinkus, R. Krasauskas, E. Sužiedėlienė</b> <i>ACINETOBACTER BAUMANNII</i> VI TIPO SEKRECIJOS SISTEMOS VAIZDINIMO TYRIMAI.....	25
<b>I. Ragaišis, R. Krasauskas</b> <i>CHRYSEOBACTERIUM SP.</i> METALO BETA LAKTAMAZĖS IND CHARAKTERISTIKA.....	28
<b>G. Rimkutė, J. Razumienė, I. Šakinytė</b> TREČIOS KARTOS BIOJUTIKLIŲ, SUKURTŲ NAUDOJANT TRGO FRAKCIJAS IR GLIUKOZĖS DEHIDROGENAZĘ, EFEKTYVUMO IR SUBSTRATINIO ATRANKUMO TYRIMAI.....	30
<b>J. Ritmejeris, R. Žilionis</b> PAVIENIŲ LAŠTELIŲ RNA-SEQ BIBLIOTEKOS KONSTRAVIMAS .....	32
<b>I. Rokaitis, R. Meškys</b> HIPERMODIFIKUOTŲ OLIGONUKLEOTIDŲ SINTEZĖ DNR POLIMERAZIŲ PAGALBA.....	35
<b>G. Skliutė, R. Navakauskienė</b> ŽMOGAUS KAMIENINIŲ LAŠTELIŲ IŠ ALTERNATYVIŲ ŠALTINIŲ CHARAKTERIZAVIMAS.....	37
<b>R. Statkevičiūtė, R. Rutkienė</b> BIOLOGIŠKAI AKTYVIUS INDOLO DARINIUS ATAKUOJANČIŲ FERMENTŲ TYRIMAS .....	40
<b>L. Škiudaitė, L. Baranauskienė</b> SULFONAMIDINIŲ DIURETIKŲ SĄVEIKOS SU ŽMOGAUS KARBOANHIDRAZĖMIS TIKRINIŲ PARAMETRŲ NUSTATYMAS .....	42
<b>D. Vaitkus, J. Stankevičiūtė</b> TIRPIOS GELEŽIES MONOOKSIGENAZĖS PML PAGRINDU SUKURTŲ MUTANTINIŲ IR HIBRIDINIŲ FERMENTŲ TYRIMAS.....	45

## BIOFIZIKA

---

<b>N. Barauskaitė, P. Ruzgys</b> „BYSTANDER“ EFEKTO JTAKA LAŠTELIŲ GYVYBINGUMUI PO NEGRĮŽTAMOS ELEKTROPORACIJOS BEI PRIEŠVĖŽINIO VAISTO BLEOMICINO ELEKTROPERNAŠOS IN VITRO.....	47
<b>D. Baronas, A. Zubrienė</b> MODIFIKUOTŲ KARBOANHIDRAZĖS II IZOFORMŲ GAVIMAS BEI JŲ KOMPLEKSŲ SU LIGANDAIS BIOFIZIKINIAI IR KRISTALOGRAFINIAI TYRIMAI .....	50

<b>A. Rimgailaitė, S. Šatkauskas</b> PLAZMIDINĖS DNR EKSPRESIJOS REGULAVIMAS NAUDOJANT BLEOMICINO SUKELTĄ CITOTOKSIŠKUMO EFEKTĄ PO VIENALAIKĖS ABIEJŲ MOLEKULIŲ ELEKTROPERNAŠOS .....	53
<b>K. Vitkutė, A. Alaburda, U. Neniškytė</b> HIPOKAMPO PIRAMIDINIŲ NEURONŲ ELEKTROFIZIOLOGINIŲ SAVYBIŲ KITIMAS POSTNATALINIO VYSTYMOSI LAIKOTARPIU LAUKINIO TIPO PELĖSE .....	56

## BIOLOGIJA

<b>M. Bytautas, A. S. Maruška, K. Bimbiraitė-Survilienė</b> ANALYSIS OF THUJA (THUJA SPP.) BIOLOGICAL ACTIVITY .....	57
<b>G. Bumbulytė, V. Būda</b> REPELENTINIŲ CHEMINIŲ JUNGINIŲ DIDŽIAJAM MILČIUI ( <i>TENEbrio MOLITOR</i> ) PAIEŠKA MĖTOS ( <i>MENTHA SPICATA</i> ), ČIOBRELIO ( <i>THYMUS VULGARIS</i> ) ETERINIUIOSE ALIEJUOSE .....	58
<b>L. Dobrovolskis, Ž. Strazdaitė-Žielienė, E. Servienė</b> MIELIŲ BIOĖVAIROVĖ IR PAPLITIMAS LIETUVOS GĖLO VANDENS TELKINIUISE .....	60
<b>N. Jonutytė, E. Lastauskienė</b> [PSI+] PRIONO VARIANTŲ ĮTAKA MIELIŲ LAŠTELIŲ AUGIMUI IR VIDULĄSTELINIŲ BALTYMŲ KAUPIMUI .....	62
<b>G. Juknevičiūtė, N. Kuisienė</b> POLIKETIDŲ IR NERIBOSOMINIŲ PEPTIDŲ SINTEZĖJE DALYVAUJANČIŲ GENŲ RAIŠKOS TYRIMAI <i>PAENIBACILLUS</i> SP. KAMIENUOSE, IŠSKIRTUOSE IŠ POŽEMINIO URVO .....	65
<b>R. Lapickis, A. Paulauskas</b> HOLŠTEINŲ VEISLĖS KRAUJO DALIŲ TURINČIŲ PIENINIŲ GALVIJŲ GENETINĖS ĮVAIROVĖS ANALIZĖ ..	68
<b>R. Maleckaitė, K. Daniūnaitė</b> IMUNINĖS SISTEMOS PATIKROS TAŠKŲ GENŲ RAIŠKOS REGULIACIJOS TYRIMAI PROSTATOS NAVIKUOSE .....	71
<b>U. Meškauskaitė, V. Tatarūnas</b> TIKAGRELORO POVEIKIS ŽMOGAUS IR MIKROORGANIZMO LAŠTELĖMS .....	74
<b>D. Narauskaitė, A. Jekabsonė</b> POLI I:C VEIKIAMŲ KVĖPAVIMO TAKŲ EGZOSOMŲ REIKŠMĖ SMEGENŲ LAŠTELIŲ IMUNO- METABOLIZMUI .....	78
<b>K. Normantaitė, K. Sužiedėlis</b> GENOMO RĖDAGAVIMAS METASTAZAVIMO PROCESO MOLEKULINEI ANALIZEI .....	81
<b>G. Rakauskienė, I. Uzielienė</b> VIDULĄSTELINIO KALCIO KONCENTRACIJOS POKYČIO ĮTAKA ŽMOGAUS MENSTRUACIJŲ KRAUJO KAMIEINIŲ LAŠTELIŲ PAJĖGUMUI DIFERENCIJUOTI Į KREMZLINĮ AUDINĮ .....	83
<b>A. Rimkūnas, K. Malakauskas</b> EOZINOFILŲ SUTRIKDYTOS UŽPLAŠTELINIO UŽPILDO BALTYMŲ APYKAITOS ĮTAKA PLAUCIŲ STRUKTŪRINIŲ LAŠTELIŲ PROLIFERACIJAI SERGANT ASTMA .....	86
<b>A. Savickaitė, R. Gudikaitė</b> TERMOSTABIILIŲ LIPOLIZINIŲ FERMENTŲ PAGRINDU VEIKIANČIOS NEPERTRAUKIAMOS RIEBALŲ RŪGŠČIŲ ESTERIŲ SINTEZEI IR/AR HIDROLIZEI SKIRTOS SISTEMOS KŪRIMAS .....	88
<b>G. Šakalytė, J. Armalytė</b> ACETILTRANSFERAZĖ <i>ACINETOBACTER BAUMANNII</i> STRESO ATSAKE .....	90

## CHEMIJA

<b>V. Aukščionis, A. Ramanavičius</b> MODIFIKUOTŲ SACCHAROMYCES CEREVISIAE TYRIMAS AMPEROMETRINIAIS IR IMPEDANSO SPEKTROSKOPIJOS METODAIS .....	92
<b>R. Aukštakojytė, J. Gaidukevič</b> TERMINĖ GRAFENO OKSIDO REDUKCIJA MALONO RŪGŠTIES IR FOSFORO PENTOKSIDO MIŠINYJE: SINTEZĖS SĄLYGŲ OPTIMIZAVIMAS IR STRUKTŪRINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS .....	95
<b>E. Baliūnaitė, A. Ramanavičienė</b> ANALIZĖJE NAUDOJAMŲ MAGNETINIŲ AUKSO SLUOKSNIU DENGŲ NANODALELIŲ MODIFIKAVIMO ANTIKŪNAIS OPTIMALIŲ SĄLYGŲ NUSTATYMAS .....	97
<b>E. Bučmys, A. Popov, A. Adamonytė, I. Plikusienė</b> ZNO NANOSTRUKTŪRŲ MODIFIKAVIMAS BIOMOLEKULĖMIS KURIANT OPTINIUS BIOLOGINIUS JUTIKLIUS .....	99

<b>E. Dauškaitė, A. Kaušaitė-Minkštienė</b> PPR IMUNINIS JUTIKLIS PIKTYBINIŲ T LAŠTELIŲ BIOŽYMENS CD5 NUSTATYMUJ	102
<b>K. Dabrovolškas, G. Krušaitė, D. Gudeika</b> ORGANINIŲ PUSLAIDININKIŲ SINTEZĖ, SAVYBIŲ TYRIMAS IR TAIKYMAS ORGANINIUISE ŠVIESTUKUOSE	105
<b>A. Drevilkauškaitė, A. Al-Ashouri, E. Kasparavičius, T. Malinauskas, S. Albrecht, V. Getautis, A. Magomedov</b> SKYLĖMS SELEKTYVŲS MONOSLUOKSNIŲ SKIRTI SAULĖS ELEMENTAMS	108
<b>E. Ežerskytė, A. Katelnikovas</b> ĮPRASTINĖS IR AUKŠTYNVERTĖS LIUMINESCENCIJOS BIPO <sub>2</sub> YB, TB, EU JUNGINIUISE TYRIMAS	110
<b>S. Gailiūnaitė, S. Budrienė</b> NESOTIEJI POLIESTERIAI – BIOAUDINIAMS KURTI: PDMS IR DAUGIAFUNKCINIŲ HIDROKSIJUNGINIŲ ĮTAKA STRUKTŪRAI IR SAVYBĖMS	112
<b>A. Ilčiukaitė, V. Getautis</b> TEIGIAMŲ KRŪVININKUS TRANSPORTUOJANTYS KETURIS KARBAZOLILCHROMOFORUS TURINTYS FLUORENO DARINIAI EFEKTYVIEMS PEROVSKITINIAMS SAULĖS ELEMENTAMS	114
<b>G. Inkrataitė, R. Skaudžius</b> LUTECIO OKSIORTOSILIKATO SINTEZĖ BEI STUKTŪROS MODIFIKAVIMAS LEGIRUOJANT MAGNIŲ IR BORŲ	117
<b>A. Jurys, E. Orentas</b> CIKLINIŲ SULFENAMIDŲ TAIKYMAS S, N-HETEROCIKLŲ SINTEZĖJE, FOTOREDOKSO IR BROENSTED RŪGŠČIŲ KATALIZĖS SĄLYGOMIS	119
<b>G. Kavaliauskaitė, A. Valiūnienė</b> IMPEDIMETRINIO URĖJOS JUTIKLIO FORMAVIMAS BERLYNO MĖLYNOJO PAGRINDU MAGNETINĖMIS IR ANTIBAKTERINĖMIS SAVYBĖMIS PASIŽYMINČIO BETA-TRIKALCIO FOSFATO SINTEZĖ IR TYRIMAS	121 124
<b>M. Koplūnaitė, D. Tauraitė</b> MODIFIKUOTŲ PIRIMIDINO NUKLEOTIDŲ SINTEZĖ IR JŲ ĮJUNGIMAS Į DNR	126
<b>P. Luižys, M. Daškevičienė</b> NAUJO KETURIS KARBAZOLILCHROMOFORUS SU DIFENILAMINO FRAGMENTAIS TURINČIO ORGANINIO PUSLAIDININKIO PEROVSKITINIAMS SAULĖS ELEMENTAMS SINTEZĖ IR SAVYBĖS	128
<b>M. Marčinskas, T. Malinauskas</b> ORGANOMETALINIŲ PREKŪRSORIŲ, SKIRTŲ NEORGANINIO PUSLAIDININKIO VARIO TIOCIANATO SLUOKSNIŲ FORMAVIMUI, SINTEZĖ IR TYRIMAS	131
<b>R. Minickaitė, V. Mickevičius</b> FUNKCIONALIZUOTŲ AMINOTIAZOLŲ SU AROMATINIAIS IR HETEROCIKLINIAIS PAKAITAIS SINTEZĖ IR TYRIMAS	133
<b>I. Misiūnaitė, R. Bukšnaitienė</b> BENZIMIDAZOL-2-ILALKINIŲ ELEKTROFILINIŲ CIKLIZACIJOS REAKCIJŲ TYRIMAS	135
<b>A. Pakalniškis, R. Skaudžius, Ž. Stankevičiūtė</b> SKIRTINGŲ PAREMTŲ GDPO4 „ŠERDIS – APVALKALAS“ STRUKTŪRŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS	137
<b>D. Palinauskas, G. Bagdžiūnas</b> ELEKTROAKTYVIŲ MOLEKULIŲ SAVITVARKIŲ MONOSLUOKSNIŲ ANT SKAIDRIŲ ELEKTRODŲ FORMAVIMAS IR TAIKYMAS	139
<b>G. Snarskis, L. Vilčiauskas</b> NA-MN-TI-PO4 SISTEMOS FAZINĖS DIAGRAMOS ANALIZĖ NAUDOJANTIS PIRMINIŲ PRINCIPŲ SKAIČIAVIMAIS	142
<b>L. M. Svirskaitė, E. Kasparavičius, T. Malinauskas</b> NAUJŲ NEIGIAMUS KRŪVININKUS PERNEŠANČIŲ ORGANINIŲ PUSLAIDININKIŲ SU „INKARINIAIS“ FRAGMENTAIS SINTEZĖ IR TYRIMAS	144
<b>A. Zinovičius, I. Morkvėnaitė-Vilkončienė, A. Kisieliūtė, A. Ramanavičius</b> LOKALIZUOTO ELEKTROCHEMINIO IMPEDANSO TAIKYMO BIOLOGINIAME GLIUKOZĖS JUTIKLYJE GALIMYBIŲ TYRIMAS	147
<b>TRANSPORTO INŽINERIJA</b>	
<b>E. Bučinskas, A. Rimkus</b> AUTOMOBILIŲ TRANSPORTO TARŠOS EMISIJŲ MAŽINIMO GALIMYBIŲ TYRIMAS IŠKASTINIUS DEGALUS PAKEIČIANT IŠ BIOATLIEKŲ GAMINAMAIS DVIGUBAIS BIODEGALAIS	150

## EKOLOGIJA IR APLINKOTYRA

---

<b>L. Bučinskas, A. Garbaras</b> PAVIRŠINIO IR POŽEMINIO VANDENS SĄVEIKOS TYRIMAS NERIES BASEINO APLINKOJE, NAUDOJANT STABILIŲJŲ O IR H IZOTOPŲ SANTYKIO MATAVIMO METODUS .....	154
<b>E. Petrauskaitė, E. Šimoliūnas</b> PANTOEA GENTIES BAKTERIJAS INFEKUOJANČIŲ BAKTERIOFAGŲ IDENTIFIKAVIMAS IR CHARAKTERIZAVIMAS .....	157

## FIZIKA

---

<b>M. Ambrozas, A. Juodagalvis</b> DRELL-YAN PROCESO TRIUKŠMO ĮVYKIŲ SKAIČIAUS ĮVERTINIMAS KLaidINGO ATPAŽINIMO METODU .....	160
<b>J. Banys, J. Vengelis</b> IMPULSŲ IŠSKYRIKLIŲ SU ĮVAIRIOS KONSTRUKCIJOS POKELSO ELEMENTAIS TEMPERATŪRINIŲ CHARAKTERISTIKŲ TYRIMAS .....	162
<b>J. Berškys, S. Orlovas</b> KOMPLEKSNIO ŠALTINIO VEKTORINIŲ SŪKURIJŲ SKLaida SUB-BANGINIO DYDŽIO DALELIŲ CHIRALINIAIS KLASTERIAIS IR JOS PRITAIKYMAS GEOMETRINĖS FAZĖS ELEMENTAMS .....	166
<b>J. Braver, A. Gelžinis</b> MOLEKULINIŲ SISTEMŲ FLUORESCENCIJOS SPEKTRŲ MODELIAVIMAS MIŠRIAIS KVANTINĖS-KLASIKINĖS DINAMIKOS METODAIS .....	168
<b>L. Butkus, R. Barisevičiūtė, J. Šapolaitė, E. Maceika, J. Mažeika, V. Rakauskas, V. Remeikis</b> STABILIŲJŲ ANGLIES IR AZOTO IZOTOPŲ KAITOS DRŪKŠIŲ EŽERE TYRIMAS .....	170
<b>V. Girdauskas, A. Michailovas</b> PIKOSEKUNDINIŲ KAUPINIMO IMPULSŲ LAIKINĖS FORMOS ĮTAKA OPTINIUI PARAMETRINIUI ČIRPUOTŲ IMPULSŲ STIPRINIMUI .....	172
<b>E. Gvozdiovas, V. Kažukauskas</b> PLONASLUOKSNIO HIDROGENIZUOTO AMORFINIO SILICIO SAULĖS ELEMENTŲ SU $V_{2O_{5-x}}$ SLUOKSNIU FOTOLEKTRINIŲ IR KRŪVIO PERNAŠOS SAVYBIŲ PRIKLAUSOMYBĖS NUO DEGUONIES DUJŲ SRAUTO GAMYBOS METU TYRIMAS .....	175
<b>G. Klimaitė, J. Mykolaitis, A. Tamulevičienė, T. Tamulevičius, D. Peckus</b> ULTRASPARTI PLAZMONŲ RELAKSACIJOS DINAMIKA SIDABRO, AUKSO IR VARIO NANODALELIŲ TIRPALUOSE .....	178
<b>K. Laurinavičius, T. Gertus</b> SUB-BANGINIO DYDŽIO DALELIŲ KLASTERIŲ TYRIMAS IR PRITAIKYMAS GEOMETRINĖS FAZĖS FOTONINIŲ ELEMENTŲ GAMYBAI .....	181
<b>D. Litvinas, S. Juršėnas</b> SAVAIMINĖS SPINDULIUOTĖS STIPRINIMAS DVIMAČIŲ PEROVSKITŲ SLUOKSNIUOSE .....	183
<b>G. Mickūnaitė, J. Čeponkus</b> PATOGENINIŲ GRYBELIŲ IDENTIFIKAVIMAS IR JŲ GYVYBĖS CIKLO TYRIMAS VIRPESINĖS SPEKTROMETRIJOS METODAIS .....	186
<b>P. Račkauskas, G. Juzeliūnas</b> OPTINĖS GARDELĖS PANAUDOJANT ŠUOLIUS TARP ŠALTŲJŲ ATOMŲ VIDINIŲ BŪSENŲ .....	190
<b>R. Šalaševičius, S. Balčiūnas, J. Banys, S. Wada</b> NANOKOMPOZITINIŲ BT KERAMIKŲ PLAČIAJUOSTĖ DIELEKTRINĖ SPEKTROSKOPIJA .....	192
<b>M. Tartėnas, K. Zubovas</b> PAUKŠČIŲ TAKO GALAKTIKOS AKTYVUMO EPIZODO IR JO POVEIKIO MODELIAVIMAS .....	194

## FIZINĖ GEOGRAFIJA

---

<b>K. Viršilaitė, D. Pupienis</b> PLŪSMO SRAUTO RIBŲ NUSTATYMAS JŪROS KRANTE REMIANTIS <i>IN SITU</i> IR NUOTOLINIAIS MATAVIMO METODAIS .....	196
---	-----

## II. TECHNOLOGIJOS MOKSLAI

### APLINKOS INŽINERIJA

---

<b>I. Gaidė, V. Makarevičienė</b> DOLOMITO PANAUDOJIMAS BIODYZELINO SINTEZĖJE .....	199
--	-----

## CHEMIJOS INŽINERIJA

---

<b>V. Adaškevičiūtė, V. Kaškonienė</b> FERMENTINĖS HIDROLIZĖS ĮTAKOS BIČIŲ SURINKTŲ ŽIEDADULKIŲ BIOLOGINIAM AKTYVUMUI ĮVERTINIMAS .....	203
<b>D. Armonavičius, A. Maruška, T. Drevinskas</b> MIELIŲ PRODUKUOJAMŲ KILERINIŲ TOKSINŲ BEI MAISTO FERMENTACIJOS TYRIMAI .....	205
<b>M. Baliukynas, I. Matijošytė</b> MIELIŲ <i>KLUYVEROMYCES LACTIS</i> HETEROLOGINIŲ BALTYMŲ SISTEMOS TAIKymo BAKTERINĖS B-KARBOANHIDRAZĖS RAIŠKOS TYRIMAS .....	208
<b>D. Blaževičius, S. Grigalevičius</b> NAUJOS KARTOS EMITERIAI ORGANINIAMS ŠVIESTUKAMS .....	209
<b>T. Budginas, I. Jonuškienė</b> CITRINŲ RŪGŠTIES GAMYBOS OPTIMIZAVIMAS IŠ ATSINAUJINANČIŲ ŠALTINIŲ MIKROBIOLOGINĖS FERMENTACIJOS BŪDU .....	212
<b>G. Čižauskaitė, J. Bendoraitienė</b> ĮVAIRIOS BOTANINĖS KILMĖS KRAKMOLO TINKLINIMAS EPICHLORHIDRINU IR TINKLINIMO LAIPSNIO NUSTATYMO METODIKA .....	216
<b>Ž. Gaižauskaitė, D. Žadeikė</b> PIENO RŪGŠTIES BAKTERIJŲ FUNKCIONALIZAVIMAS RYZIŲ MALIMO ATLIEKŲ IR UOGŲ IŠSPAUDŲ MODELINĖSE SISTEMOSE .....	219
<b>R. Glušinskaitė, K. Baltakis</b> KALIO IR ALIUMINIO JONŲ ĮTAKA DVIBAZIŲ KALCIO HIDROSILIKATŲ KRISTALIZACIJAI .....	223
<b>D. Jurevičiūtė, P. Kaškonas, A. Maruška, V. Tilvikienė</b> KORELIACIJOS TARP PAVĖSINIO KIEČIO ( <i>ARTEMISIA DUBIA WALL.</i> ) BIOLOGIŠKAI VEIKLIŲ JUNGINIŲ IR JŲ AKTYVUMO ĮVERTINIMAS .....	226
<b>I. Knabikaitė, A. Eišinas</b> CR JONŲ ĮTAKA KALCIO HIDROSILIKATŲ KRISTALIZACIJOS PROCESAMS BEI GAUTŲ PRODUKTŲ ADSORBCINĖMS SAVYBĖMS .....	229
<b>E. Ragauskaitė, D. Čižeikienė, R. Maždzierienė</b> BIOTECHNOLOGINIŲ PRIEMONIŲ TAIKYMAS IŠRŪGŲ BALTYMŲ PRODUKTŲ SAVYBIŲ MODIFIKAVIMUI .....	232
<b>A. Rastėnienė, J. Sereikaitė</b> PEDIOCINO NANO/MIKROKAPSULIAVIMO TYRIMAS .....	235
<b>Ž. Takulinskas, R. Šiaučiušas</b> RIŠAMOSIOS MEDŽIAGOS IŠ A-C <sub>2</sub> SH SINTEZĖ IR KIETĖJIMAS CO <sub>2</sub> APLINKOJE .....	236
<b>V. Tumasaitė, M. Stankevičius, T. Drevinskas, A. Maruška</b> AGAROŽĖS IR ŽELATINOS GELIO KOMPOZITAS KAPILIARINEI GEL-ELEKTROCHROMATOGRAFIJAI .....	239
<b>M. Žagunis, N. Tiso, J. Mikašauskaitė Tiso, A. Maruška</b> BASIDIOMYCETES GRYBŲ IZOLIATŲ IR JŲ FERMENTŲ TAIKymo TYRIMAS TEKSTILĖS DAŽŲ SKAIDYMOI <i>IN VITRO</i> .....	242

## ENERGETIKA IR TERMOINŽINERIJA

---

<b>J. Eimontas, N. Striūgas</b> JŪRŽOLIŲ IR JŲ DIGESTATŲ TERMINIO SKAIDYMO TYRIMAI .....	244
---	-----

## MECHANIKOS INŽINERIJA

---

<b>V. Kovalevskij, D. Viržonis</b> HORIZONTALIOSIOS ŠVYTUOKLĖS TIPO ENERGIJOS RINKTUVO CHAOTIŠKO ŽEMO DAŽNIO VIRPESIŲ TRANSFORMACIJOS EFEKTYVUMO TYRIMAS .....	247
<b>A. Petronis, V. Bučinskas</b> MAŠININIO MOKYMO SISTEMŲ TAIKymo ROBOTO DINAMINĖS TRAJEKTORIJOS PATAISOS NUSTATYMOI TYRIMAS .....	250
<b>P. Svilainis, A. Kilikevičius</b> PRECIZINĖS ILGIO MATAVIMO SISTEMOS DINAMINIŲ REIŠKINIŲ TYRIMAI .....	253
<b>P. Uvarovas, K. Kilikevičienė</b> AUKŠTOS SKYROS PRECIZINIŲ KEITIKLIŲ DINAMINIŲ REIŠKINIŲ TYRIMAI .....	255

## MEDŽIAGŲ INŽINERIJA

---

<b>D. Berenis, K. Kazlauskas</b> ORGANINIO ŠVIESTUKO SU IZOFTALONITRILU TADF SPINDUOLIŲ GAMYBA IR OPTIMIZAVIMAS .....	257
<b>P. Dolmantas, Š. Meškiniš</b> AMORFINĖS ANGLIES IR KOBALTO NANOKOMPOZITŲ KAITINIMO ĮTAKOS TYRIMAS IR TAIKYMAS TIESIOGINEI GRAFENO SINTEZEI .....	260
<b>M. Gužauskas, D. Volyniuk</b> MĖLYNŲ OLED SPINDUOLIŲ SU VIRŠUTINIŲ SINGLETŲ-TRIPLETŲ KONVERSIJOS PROCESO SUSTIPRINTA FLUORESCENCIJA TYRIMAS .....	263
<b>Š. Jankauskas, A. Lazauskas</b> TIESIOGIAI SINTEZUOTO GRAFENO OPTINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS IR TAIKYMAS DRAUSTINĖS ENERGIJŲ JUOSTOS PLOČIO ĮVERTINIMUI .....	264
<b>T. Jurkšas, M. Juodėnas, T. Tamulevičius, A. Vailionis, S. Tamulevičius</b> TRIMAČIŲ MIKROSTRUKTŪRŲ FORMAVIMAS ULTRATRUMPŲ IMPULSŲ LAZERIU POLIDIMETILSILOKSANE .....	266
<b>K. Leitonas, R. Keruckienė, D. Volyniuk, J. V. Gražulevičius</b> BENZOTRIFLUORIDO IR FENTIAZINO DARINIŲ KAMABRIO TEMPERATŪROS FOSFORENCENCIJOS JAUTRUMO DEGUONIIUI TYRIMAS .....	268
<b>A. Hernandez, N. Khinevich, T. Tamulevičius, S. Tamulevičius</b> POROUS SILICON DIFFRACTION GRATINGS WITH SILVER NANOPARTICLES AS SURFACE ENHANCED RAMAN SCATTERING SUBSTRATES .....	270
<b>S. Mačionis, D. Gudeika</b> NAUJŲ TIOKSANTONO GRUPES TURINČIŲ JUNGINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS.....	272
<b>M. Mikalkevičius, M. Juodėnas, T. Tamulevičius, A. Tamulevičienė</b> NERŪDIJANČIO PLIENO VILGUMO KAMPO VALDYMAS NAUDOJANT FEMTOSEKUNDINIŲ LAZERIŲ INDUKUOTAS PERIODINES STRUKTŪRAS IR AMORFINĖS DEIMANTO TIPO ANGLIES DANGŲ NUSODINIMĄ.....	274
<b>E. Svirplys, S. Indrišiūnas</b> PERIODINIŲ STRUKTŪRŲ GAMYBA THZ OPTINIAMS KOMPONENTAMS, NAUDOJANT FOKUSUOTŲ LAZERIO PLUOŠTŲ MASYVĄ.....	276
<b>T. Žutautas, A. Bučinskas</b> NAUJŲ EFEKTYVIA SKYLIŲ PERNAŠA PASIŽYMINČIŲ IR ORGANINĖJE ELEKTRONIKOJE PRITAikomŲ ORGANINIŲ PUSLAIDININKIŲ PAIEŠKA .....	278

## III. MEDICINOS IR SVEIKATOS MOKSLAI ODONTOLOGIJA

---

<b>E. M. Jonaitytė, V. Pečiulienė</b> DANTIES PULPOS REGENERACIJAI SKIRTŲ 3D POLIKAPROLAKTONO IR KOLAGENO KARKASŲ SUKŪRIMAS ELEKTROSPININGO BŪDU .....	278
--	-----

## MEDICINA

---

<b>R. Jonaitis, N. German</b> ĮVAIRIAI MODIFIKUOTI AUKSO DARINIAIS GLIUKOZĖS BIOLOGINIO JUTIKLIO KŪRIMAS BEI PRAKTINIS PRITAIKYMAS .....	283
<b>M. Pivoriūnaitė, A. Gulbinas</b> ŽMOGAUS ALFA-LAKTALBUMINO (HAMLET) CITOTOKSIŠKUMO Palyginimas tarp Vėžinių ir neVėžinių storosios žarnos ląstelių, <i>in vitro</i> .....	286

## IV. ŽEMĖS ŪKIO MOKSLAI AGRONOMIJA

---

<b>A. Bakšinskaitė, V. Tilvikienė</b> Biodujų gamybos procese perdirbto substrato naudojimas augalų tręšimui - įtaka šėsd emisijoms ir augalams .....	289
<b>L. Budginas, V. Stanys</b> Rekombinantinių peptidų raiškios tabako augaluose ir gryvinimo optimizavimas .....	292
<b>U. Stulpinaitė, V. Tilvikienė, M. Ayaz, D. Feizienė</b> Bioanglies įtaka dirvožemio vandens sulaišymui ir augalams.....	294



## MIŠKOTYRA

---

<b>D. Sidabrienė, A. Augustaitis</b> LIETUVOS MIŠKŲ PAGRINDINIŲ MEDŽIŲ RŪŠIŲ EKOFIZIOLOGINĖS REAKCIJOS EKSTREMALIAUS METEOROLOGINIO STRESO SĄLYGOMIS.....	296
---	-----

## V. SOCIALINIAI MOKSLAI

### EKONOMIKA

---

<b>R. Šiaulytė, A. Lakštutienė</b> FINANSINIO RAŠTINGUMO VERTINIMAS INOVATYVIŲ FINANSINIŲ PASLAUGŲ VYSTYMOSE KONTEKSTE.....	301
---	-----

### PSICHOLOGIJA

---

<b>G. Astrauskaitė, E. Kazlauskas</b> PSICHOLOGINIO ATSPARUMO MEDIUOJANTIS EFEKTAS POTRAUMINIO STRESO REAKCIJOMS PAAUGLYSTĖJE .....	304
<b>M. Aušraitė, K. Žardeckaitė-Matulaitienė</b> TĖVŲ BEI SU VAIKAIS DIRBANČIŲ PROFESIONALŲ KLAIDINGŲ ĮSITIKINIMŲ APIE VAIKŲ PSICHIKOS SVEIKATĄ YPATUMAI .....	306
<b>J. Janavičiūtė, L. Šinkariova</b> INSULTŲ PATYRUSIŲ PACIENTŲ KOGNITYVINIŲ FUNKCIJŲ SĄSAJOS SU DEPRESIŠKUMU IR SAVIVEIKSMINGUMU.....	309
<b>M. Marcinkevičiūtė, D. Gailienė</b> VYRŲ SUICIDIŠKUMO YPATUMAI ARTIMŲJŲ AKIMIS.....	311
<b>D. Šakinytė, R. Markšaitytė</b> SOCIALINIŲ REKLAMŲ, SKIRTŲ VAIRAVIMO IŠGĖRUS PREVENCIJAI, EFEKTYVUMO RODIKLIAI.....	313
<b>V. Šarkauskaitė, L. Bukšnytė-Marmienė</b> DARBUOTOJŲ NUOSTATŲ Į ORGANIZACINIUS POKYČIUS REIKŠMĖ DARBO ATLIKIMO KOKYBEI.....	315
<b>T. Vadvilavičius, A. Stelmokienė</b> KAIP MINUSAS GALI SUKURTI PLIUSĄ? RYŠYS TARP TAMSIOSIOS TRIADOS ASMENYBĖS SAVYBIŲ IR DARBO IR ŠEIMOS TEIGIAMOS SĄVEIKOS.....	318

### VADYBA

---

<b>M. Deikus</b> DESTRUKTYVIUS SANTYKIUS PATYRUSIŲJŲ MOTYVAI, INSPIRUOJANTYS DVASINĖS PAGALBOS PAIEŠKAS RELIGINĖSE ORGANIZACIJOSE .....	321
<b>E. Petrauskaitė, A. Šapkauskienė</b> BLOKŲ GRANDINĖS TECHNOLOGIJOS PRITAIKYMO FINANSŲ SEKTORIJE GALIMYBIŲ TYRIMAS.....	324
<b>A. Sabaliauskaitė, Ž. Stankevičiūtė</b> SKAITMENINIŲ TRANSFORMACIJŲ POVEIKIS ORGANIZACIJŲ ŽMONIŲ IŠTEKLIŲ VALDYMUI.....	327
<b>G. Tūskaitė, L. Dagilienė</b> APLINKOSAUGOS, SOCIALINĖS IR VALDYMO INFORMACIJOS ATSKLEIDIMO ĮTAKA FINANSINIAMS REZULTATAMS .....	330
<b>V. Vaseris, B. Švagždienė</b> VIEŠŲJŲ ERDVIŲ PRITAIKYMAS VIETOS BENDRUOMENĖS SVEIKATINGUMO POREIKIAMS.....	333

## VI. HUMANITARINIAI MOKSLAI

### ISTORIJA

---

<b>L. Leonavičiūtė, R. R. Trimonienė</b> TAUTINIAI SANTYKIAI GIEDRAIČIŲ DEKANATE XIX A. II P. –1914 M.: JONIŠKIO IR INTURKĖS PARAPIJŲ ATVEJIS.....	338
--	-----

### MENOTYRA

---

<b>K. Sadlauskaitė, L. Jablonskienė</b> LIETUVOS KULTŪRINIO AUTENTIŠKUMO DISKURSAS VIZUALIUOSIUOSE MENUOSE 1989–2004 M. ....	341
---	-----

### FILOLOGIJA

---

<b>R. Stakauskaitė, N. Keršytė</b> LIETUVOS DAINŲ ŠVENTĖS ANALIZĖ .....	344
--	-----

**D. Daunoraitė,  
D. Matulis**

*Biotechnologijos institutas,  
Gyvybės mokslų centras,  
Vilniaus universitetas*

## **TRYPANOSOMA CRUZI HSP90 N GALO DOMENO GAVIMAS IR STABILUMO TYRIMAS**

*Trypanosoma cruzi* – parazitinis pirmuonis, Čagaso ligos (dar vadinamos Amerikine tripanosomoze) sukėlėjas. Liga pasižymi gebėjimu pažeisti širdies raumenį, virškinamąjį traktą, kvėpavimo bei nervų sistemos organus, ir, jei negydoma, gali būti mirtina. Ligą perduodantys vabzdžiai – kraujasiurbės *Triatoma* genties blakės – veisiasi Lotynų Amerikos šalyse, tačiau dėl tarptautinio žmonių judėjimo liga pastaraisiais dešimtmečiais plinta ir į kitas pasaulio šalis. Vakcinas nuo Čagaso ligos nėra, o didelis esamų vaistų toksiškumas ir atsirandantis parazitų atsparumas sukuria naujų vaistų poreikį.

Molekulinis šaperonas Hsp90 – vienas iš galimų naujų vaistų taikinių. Šis baltymas, užtikrinantis ląstelės proteostazę, yra būtinas daugelio parazitų, įskaitant ir *T. cruzi*, išgyvenimui. Kadangi tiek ATP molekulės, tiek dominantys slopikliai, jungiasi baltymo N gale, projekto metu sukurtas genetinis konstruktas, koduojantis tik šį domeną. Atlikta rekombinantinio baltymo raiška *E. coli* bakterijose ir, po gryninimo afininės chromatografijos būdu, tirtas baltymo stabilumas ir jungimasis su Hsp90 slopikliais, pasitelkiant fluorescencinį terminio poslinkio metodą.

D. Galalytė,  
S. Vaitkienė

Vytauto Didžiojo universitetas

## CANDIDA ALBICANS FORMUOJAMŲ BIOPLĖVELIŲ SLOPINIMAS PANAUDOJANT NAUJAI SUSINTETINTUS PIRIDINŲ KLASĖS JUNGINIUS

**Ivadas.** Kandidozė – tai mieliagrybių, dažniausiai *Candida albicans* (*C. albicans*), sukeliamą infekciją, kuri pažeidžia odą, gleivinę ir nagus. Išsivysčiusi ir negydoma sunki grybelinė infekcija gali toliau plisti į kraujotaką bei žaloti vidaus organus [1, 2]. *C. albicans* ląstelės yra patogeniškos dėl gebėjimo prikibti prie įvairių paviršių, keisti fenotipą iš planktoninių ląstelių į pseudohifų ir hifų struktūras bei suformuoti bioplėvelę. Mokslininkai nustatė, kad bioplėvelę suformavusios ląstelės geba sumažinti membranoje esančio ergosterolio kiekį, kuris yra žinomo ir gydymui plačiai taikomo, priešgrybelinio azolų šeimos vaisto flukonazolo taikynas [3]. Dėl šios priežasties, grybelinių infekcijų gydymui skirtų vaistų pasirinkimas tampa ribotas, o mielių atsparumas gydymui naudojamiems vaistiniams preparatams sparčiai didėja. Kadangi bioplėvelę formuojančių *C. albicans* infekcijų gydymas, dėl didesnio atsparumo yra problematiškas, reikia efektyvesnių gydymo metodų, kurie padėtų kovoti prieš tokią savybę turinčius mikroorganizmus. Vienas iš potencialių *C. albicans* atsparumo mažinimo būdų – naujų priešgrybelinių medžiagų, galinčių slopinti bioplėvelės formavimąsi kūrimas ir pritaikymas.

**Tyrimo tikslas** yra įvertinti piridino junginių poveikį *C. albicans* planktoninėms ląstelėms bei bioplėvelėms ir nustatyti šių junginių citotoksiškumą žmogaus ląstelėms.

**Metodika.** Naudoti 9 nauji piridino junginiai: katijoniniai stirilpiridiniai (IB-385, IB-388, DSM, DSP-6), katijoniniai 4-pyridinio-1,4-dihidropiridiniai (IB-254, IB-308, IB-358), neutralūs 1,4-dihidropiridiniai (J-7-135, IOS-2469). Citotoksiškumo tyrimuose naudotos žmogaus embriono inkstų (HEK-293) ląstelės. Planktoninių ir bioplėvelės formuojančių mieliagrybių jautrumo tyrimuose naudotas klinikinis *C. albicans* izoliatas 11017, išskirtas iš žmogaus pilvo ascito skysčio ir laukinio tipo *C. albicans* ATCC® 10231™ ląstelės. Piridino junginių poveikis *C. albicans* planktoninėms ląstelėms nustatomas mikroskiedimo metodu, o bioplėvelėms MTT bei XTT metodais. Junginių citotoksiškumas įvertinamas MTT metodu.

**Rezultatai.** Priešgrybelinio vaisto flukonazolo atveju 1 µg/ml veiksmingai slopina standartinio *C. albicans* kamieno planktoninių ląstelių augimą, tuo tarpu bioplėvelės yra daug atsparesnės. Net esant 2048 µg/ml flukonazolo koncentracijai, šis vaistas visiškai nesustabdo bioplėvelės formavimosi. Šio tyrimo rezultatai pademonstravo, jog piridino junginių ir flukonazolo kombinacijos yra efektyvios prieš *C. albicans* planktonines ląsteles bei bioplėvelės, nes veikia sinergiškai. Taip pat pastebėtas mažas junginių citotoksiškumas žmogaus ląstelėms. Taigi piridino junginiai gali būti perspektyvūs kandidatai kuriant naujus priešgrybelinius vaistus bei derinant juos su jau plačiai naudojamu vaistu flukonazolu.

### **Išvados.**

1. Įvertinus tirtų piridino junginių citotoksiškumą žmogaus ląstelėms, nustatyta, kad fungicidiškai veikiantys junginiai yra mažai citotoksiški žmogaus ląstelėms;
2. Stipriausiu fungicidiniu poveikiu planktoninėms *C. albicans* ląstelėms pasižymėjo IB-388, IB-308 bei DSP-6 piridino junginiai, kurių  $\leq 8 \mu\text{g/ml}$  koncentracija efektyviai slopina šių mieliagrybių augimą;
3. Piridino junginiai IB-254, IB-358 ir IB-385 didina mieliagrybių *C. albicans* planktoninių ląstelių bei bioplėvelių jautrumą flukonazolui.

---

### **Literatūra**

- [1] Achkar, J. M., ir Fries, B. C. *Candida* Infections of the Genitourinary Tract. *Clinical Microbiology Reviews*, 2010, 23(2), p. 253–273.
- [2] Mayer, F. L., Wilson, D., ir Hube, B. *Candida albicans* pathogenicity mechanisms. *Virulence*, 2013, 4(2), p. 119–128.
- [3] Nobile, C. J., ir Mitchell, A. P. Genetics and genomics of *Candida albicans* biofilm formation. *Cellular Microbiology*, 2006, 8(9), p. 1382–1391.

**R. Ivanickaitė,  
G. Sasnauskas**

*Vilniaus universiteto  
Biotechnologijos institutas*

## **CRISPR-CAS SISTEMŲ ADAPTACIJOS BALTYMŲ TYRIMAI IN VITRO**

CRISPR-Cas yra bakterijų ir archėjų adaptyvios imuninės sistemos, svarbios ginantis nuo į ląstelę patenkančių virusų ar svetimų plazmidinės DNR. Bakterijai susidūrus su virusu, į jos CRISPR DNR regioną yra įstatomas bakteriofago genomines sekos fragmentas, kuris vadinamas skirtuku. Bakterijos, įgijusios skirtuką, tampa atsparios atitinkamą seką turintiems virusams. CRISPR lokusai nuolat kinta pagal tai, kokie virusai patenka į bakterijų aplinką, ir taip ląstelės įgauna specifinį imunitetą [1].

CRISPR-Cas sistemos veikla susideda iš adaptacijos, CRISPR RNR brendimo ir interferencijos etapų [2]. Adaptacijos metu svetimų DNR fragmentas, proskirtukas, yra įterpiamas į bakterijos genomą tarp pasikartojančių seklų CRISPR regione, taip susidaro naujas skirtukas. Proskirtuko parinkimui reikalingas PAM (angl. *protospacer adjacent motif*) sekos, esančios fago DNR, atpažinimas, kurį atlieka Cas baltymai. CRISPR RNR brendimo metu nuo CRISPR lokuso, turinčio įstatytą skirtuką, nurašoma RNR seka, kuri veikia kartu su interferencijos etapo Cas baltymais, suteikdama šiems specifiskumą. Tai ląstelei leidžia atrankiai hidrolizuoti svetimas DNR sekas.

Projekto metu buvo tiriami Cas baltymai, dalyvaujantys adaptacijos stadijoje, kurios metu vyksta abiejų proskirtuko galų 3'-OH grupės nukleofilinė ataka į taikinio DNR fosfodiesterinį ryšį. Nauji skirtukai įstatomi CRISPR lokuse prie pirmo pasikartojimo nuo lyderinės sekos [3].

Daugumoje CRISPR-Cas sistemų už adaptaciją yra atsakingi Cas1 ir Cas2 baltymai. Cas2 dimeras, prisijungęs du Cas1 dimerus, sudaro heksamerinį kompleksą (Cas1)<sub>4</sub>(-Cas2)<sub>2</sub>, pasižymintį integraziniu aktyvumu [4]. Kai kurios CRISPR-Cas sistemos adaptacijos etape pasitelkia kitus Cas baltymus: pavyzdžiui, II-A tipo sistemoje nustatyta, kad adaptacijos metu sąveikauja visi keturi sistemos baltymai, t.y. Cas1, Cas2, Csn2 ir Cas9 [5].

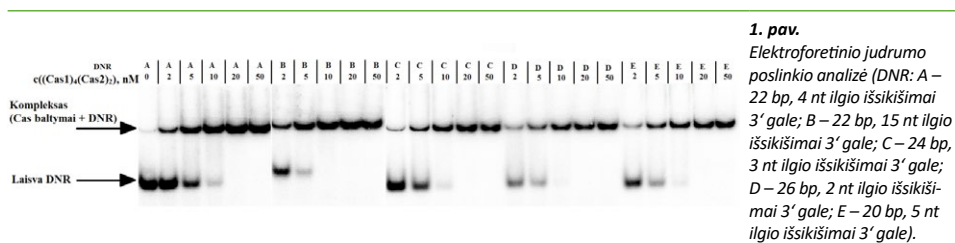
Projekto metu pradėti charakterizuoti Cas baltymai iš mažai tirtų II-B ir II-C tipų CRISPR-Cas sistemų. II-B tipo sistemoms būdingi baltymai Cas1, Cas2, Cas4 bei Cas9, o II-C tipo sistemos turi tik Cas1, Cas2 ir Cas9. Mūsų tikslas buvo klonuoti šiuos Cas baltymus į *E. coli* raiškos vektorius, optimizuoti jų raišką, o išgryninus geriausiu tirpumu/išieiga pasižyminčius baltymus iširti jų oligomeres formas bei gebėjimą surišti DNR substratus *in vitro*.

Tyrimo metu į *E. coli* raiškos vektorius buvo klonuoti Cas1, Cas2, Cas4 bei Cas9 baltymai iš pasirinktos II-B tipo CRISPR-Cas sistemos (iš viso sukonstruotos 7 plazmidės) ir Cas1, Cas2 bei Cas9 iš dviejų pasirinktų II-C tipo sistemų (18 plazmidžių). Prie

baltymų buvo prilieti inkarai grynimui (HisTag ir StrepII), o kai kuriais atvejais – tirpumą didinantys domenai (MBD - angl. *maltose binding domain*). Buvo optimizuota Cas baltymų raiška ir jie buvo gryninami skysčių chromatografijos metodu per HisTag ir StrepII inkarus.

Sėkmingai išgryninti buvo vienos iš II-C tipo CRISPR-Cas sistemų baltymai Cas1 (N gale turinti HisTag inkarą) bei Cas2 (C gale turintis HisTag inkarą). Atliekant šių baltymų mišinio analitinę gel-filtraciją, buvo tikėtasi aptikti kitose sistemose užfiksuojamą  $(Cas1)_4(Cas2)_2$  heteroheksamerinį integrazės kompleksą, tačiau buvo nustatyti tik atskiri Cas1 ir Cas2 homodimerai.

Su išgrynintais Cas1 ir Cas2 baltymais buvo atlikta elektroforetinio judrumo poslinkio analizė, kuri parodė, kad Cas1 ir Cas2 baltymų mišinys moliniu santykiu 2:1 gerai sąveikauja su proskirtuką imituojančiais DNR oligodupleksais pasirinktomis eksperimento sąlygomis. Vis dėlto nebuvo pastebėtas Cas baltymų mišinio specifškumas DNR, kadangi tirpale esant  $c((Cas1)_4(Cas2)_2) \geq 10$  nM buvo surišama beveik visa DNR, nepriklausomai nuo naudoto oligoduplekso ir jo galuose esančių viengrandinių iškyšų ilgio (1 pav.).



## Literatūra

- [1] Barrangou, R., Fremaux, C., Deveau, H., Richards, M., Boyaval, P., Moineau, S., ... Horvath, P. CRISPR Provides Acquired Resistance Against Viruses in Prokaryotes. *Science*, 2007, 315(5819), 1709–1712.
- [2] Van der Oost, J., Jore, M. M., Westra, E. R., Lundgren, M., & Brouns, S. J. J. CRISPR-based adaptive and heritable immunity in prokaryotes. *Trends in Biochemical Sciences*, 2009, 34(8), 401–407.
- [3] Nuñez, J. K., Lee, A. S. Y., Engelman, A., & Doudna, J. A. Integrase-mediated spacer acquisition during CRISPR–Cas adaptive immunity. *Nature*, 2015, 519(7542), 193-198.
- [4] Sasnauskas, G., & Siksnyš, V. CRISPR adaptation from a structural perspective. *Current Opinion in Structural Biology*, 2020, 65, 17–25.
- [5] Ka, D., Jang, D. M., Han, B. W., & Bae, E. Molecular organization of the type II-A CRISPR adaptation module and its interaction with Cas9 via Csn2. *Nucleic Acids Research*, 2018, 46(18), 9805-9815.

**G. Janulevičiūtė<sup>1</sup>,  
A. Kanopka<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Kauno technologijos  
universitetas*

<sup>2</sup>*Vilniaus universitetas*

## **SPLAISINGO VEIKSNIO U2AF ĮTAKA SU NEURODEGENERACINĖMIS LIGOMIS SIEJAMŲ APP IR TAU IRNR IZOFORMŲ SUSIDARYMUI HIPOKSIŠĖ SMEGENŲ LĄSTELĖSE**

**Įvadas.** Pre-iRNR splaisingo metu nekoduojančios sekos (intronai) yra pašalinamos, o koduojančios sekos (egzonai) sujungiamos, susidarant naujai iRNR. Apie 95% visų žmogaus genų vyksta alternatyvusis splaisingas. Šio proceso metu susidaro alternatyvios, funkciškai skirtingus baltymus koduojančios, iRNR izoformos. Alternatyviojo splaisingo metu susidarančių iRNR izoformų įvairovė kiekviename audinyje yra individuali, t.y. priklauso nuo audinio tipo. Splaisingo procesą katalizuoja splaisosoma – sudėtingas makromolekulinis kompleksas, sudarytas iš penkių mažų branduolinių ribonukleobaltyminių dalelių (U1, U2, U4, U5 ir U6 snRNP) ir daugiau nei 200 pagalbinių baltymų (SR ir hnRNP šeimos baltymai, heterodimerinis U2 pagalbinis veiksnys U2AF ir kt.) [1]. Heterodimerinis U2 pagalbinis veiksnys U2AF (angl. *U2 snRNP auxiliary factor*) sudarytas iš dviejų subvienetų: didžiojo 65 kDa, pavadintu U2AF65 ir mažojo 35 kDa – U2AF35. Abu veiksniai dalyvauja ankstyvajame splaisosomos E komplekso susidaryme, kur U2AF65 atpažįsta ir sąveikauja su polipirimidinine seka, o U2AF35 - su 3' taikinio sekos AG nukleotidais ir padeda stabilizuoti U2AF65 sąveiką su polipirimidinine sritimi [2].

Neurodegeneracinių ligų vystymasis, siejamas su visuomenės senėjimu, nepakankamai efektyviu gydymu ir ankstyvosios diagnostikos priemonių trūkumu, skatina išsamiau nagrinėti šių ligų patogenezės mechanizmus. Literatūroje skelbiama, kad dviejų labiausiai pasaulyje paplitusių neurodegeneracinių – Alzheimerio ir Parkinsono – ligų vystymąsi lemia: i) ekstraląstelinio amiloido beta (Aβ) peptidų, susidarančių proteolitiškai skaldant APP (angl. *amyloid precursor protein*) baltymą, susikaupimas smegenyse; ii) hiperfosforilinto *tau* baltymo sankaupos, suformuojančios neurofibrilių raizginius [3].

Neseniai literatūroje buvo parodyta, kad neurodegeneracinių ligų vystymuisi įtaką daro sumažėjęs deguonies kiekis (hipoksija) ląstelėje: ūmi hipoksija – sulėtina, tuo tarpu lėtinė hipoksija skatina šių ligų progresavimą. Tai siejama su ląstelei būdingu adaptaciniu atsaku į deguonies trūkumą [4]. Hipoksija ląstelėje stabilizuoja hipoksijos indukuojamus veiksnius (HIF), aktyvinančius ląstelei išgyventi pakitusių aplinkos sąlygomis reikalingų genų transkripciją [5]. Hipoksinėse ląstelėse vyksta ne tik ląstelių išgyvenimui reikalingų genų transkripcijos aktyvavimas, bet ir pokyčiai alternatyviajame pre-iRNR splaisinge. Alternatyviojo pre-iRNR splaisingo metu sujungiant vieną iš dviejų alternatyvių 5' ir 3' taikinių sekų, įjungiant ar praleidžiant koduojančias egzozonines sekas, iš vienos pre-iRNR gaunamos skirtingos iRNR izoformos, nuo kurių sintetunami baltymai padeda ląstelėms išgyventi sumažėjusiomis deguonies sąlygomis [6].

Žinduoliuose APP genas sudarytas iš 18 egzonų ir alternatyviojo pre-iRNR splaisingo būdu sudaro 11 APP izoformų, iš kurių trys pagrindinės: 1) APP770, gaunama sujungiant visus egzonus; 2) APP751, neturinti 8-o egzono, koduojančio OX-2 antigeno domeną; 3) APP695, neturinti 7 ir 8 egzonų, koduojančių Kunitz tipo serino proteazės inhibitoriaus ir OX-2 antigeno domenų. Nustatyta, kad Alzheimerio liga sergančių žmonių smegenyse sumažėja APP695 izoformos, o APP770 – padidėja. APP pre-iRNR splaisingo pokyčiai siejami su padidėjusiu Aβ susidarymu [7].

Žinoma, kad neuronuose *MAPT* (angl. microtubule-associated protein tau) genas, koduojantis Tau baltymą, dalyvauja mikrovamzdelių, kurie yra viena iš sudėtinių citoskeleto struktūros dalių, susidaryme ir jų stabilizavime. Tau pre-iRNR sudaryta iš 16 egzonų, kurie alternatyviojo splaisingo būdu sudaro 6 izoformas. Izoformas, kur 10-o egzono seka, koduojanti vieną iš sąveikos su mikrovamzdeliais domeną, įjungama (4R) ar praleidžiama į besiformuojančią iRNR (3R), vaidina svarbų vaidmenį vystantis neurodegeneracinėms, tokioms kaip Alzheimerio ar Parkinsono, ligoms. Nustatyta, kad sveiko suaugusio žmogaus smegenyse šių izoformų santykis yra lygus (1:1), tuo tarpu sergant Alzheimerio liga atsiranda pakitimai: padidėja 4R arba sumažėja 3R izoformos, atitinkamai susidarant 2:1 santykiui [8].

Tačiau kokią įtaką U2AF veiksnys daro alternatyviajam APP ir Tau pre-iRNR splaisingui sumažėjus deguonies kiekiui aplinkoje, iki šiol nėra žinoma.

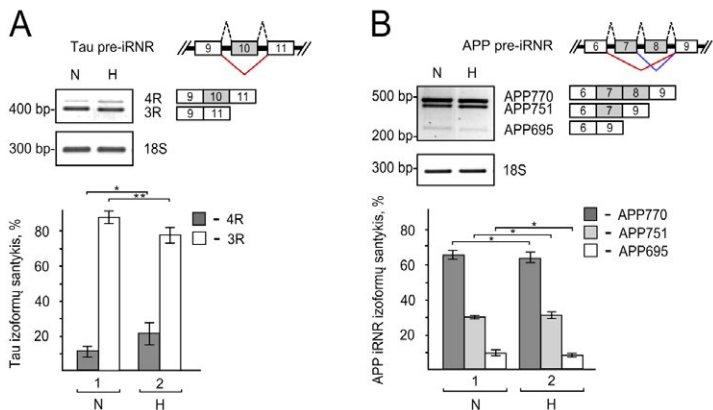
Projekto **tikslas** – nustatyti atskirų heterodimerinio splaisingo veiksnio U2AF subvienetų įtaką APP ir Tau iRNR izoformų, siejamų su neurodegeneracinėmis ligomis, susidarymui ląstelių aplinkoje sumažėjus deguonies kiekiui (hipoksijai).

**Rezultatai.** Tyrimai atlikti naudojant neuroblastomos SK-N-Be(2) ląstelių liniją, kuri buvo kultivuojama normaliomis deguonies (21% O<sub>2</sub>) ir hipoksinėmis (1% O<sub>2</sub>) sąlygomis. Iš ląstelių išskirta RNR analizuota naudojant atvirkštinės transkripcijos (AT-PGR) ir polimerazės grandininę reakciją (PGR).

Šiame tyrimo etape siekta išsiaiškinti kokią įtaką hipoksinė aplinka turi APP ir Tau iRNR izoformų susidarymui neuroblastomos ląstelėse (SK-N-Be(2)). Palyginus 4R/3R Tau iRNR santykį normaliomis ir hipoksinėmis sąlygomis kultivuotose ląstelėse pastebėta, kad hipoksinės sąlygos skatina 10-ojo egzono sekos įterpimą į sintetinamą iRNR. Nustatyta, kad hipoksinėse ląstelėse Tau 4R iRNR izoformos susidaro ~2 k. daugiau palyginus su ląstelėmis, kultivuotomis normaliomis deguonies sąlygomis (1 pav., A). Atlikus APP iRNR izoformų raiškos tyrimą SK-N-Be(2) ląstelėse, kultivuotose normaliomis ir hipoksinėmis sąlygomis paaiškėjo, kad hipoksinės sąlygos neturi įtakos APP770, APP751 ir APP695 iRNR izoformų raiškai (1 pav., B). Kadangi hipoksinėse ląstelėse APP770, APP751 ir APP695 iRNR izoformų raiška nekito, todėl tolimesniuose eksperimentuose nuo APP pre-iRNR alternatyviojo splaisingo būdu susidaranti iRNR izoformų tyrimai nebuvo vykdomi.

Norėdami sužinoti kokią įtaką daro atskiri U2AF65 ir U2AF35 subvienetai Tau iRNR izoformų susidarymui, buvo atlikti padidintos ir sumažintos šių baltymų raiškos tyrimai priklausomai nuo deguonies kiekio aplinkoje. Padidintai U2AF65 ir U2AF35 baltymų raiškai ląstelėse gauti, SK-N-Be(2) ląstelės buvo transfekuotos plazmidinėmis DNR, koduojančiomis U2AF65 ar U2AF35 baltymo sekas. Po transfekcijos ląstelės buvo kultivuotos normaliomis ir hipoksinėmis sąlygomis 24h. AT-PGR analizė parodė, kad padidinta U2AF65 baltymo raiška ląstelėse slopina 10-o egzono įterpimą į bręstančią iRNR seką tiek ląstelėse kultivuotose normaliomis (~1,3 karto), tiek hipoksinėmis (~1,2 karto) sąlygomis. Padidinta ląstelėse U2AF35 baltymo raiška normaliomis ir hipoksinėmis sąlygomis augintose ląstelėse taip pat (~1,2 – 1,3 karto) slopina 4R Tau iRNR izoformos susidarymą.





Sumažinta U2AF65 ar U2AF35 baltymų raiška ląstelėse buvo gauta SK-N-Be(2) transfekavus atitinkamomis siRNR: siRNR-U2AF65 ar siRNR-U2AF35 bei kontroline siRNR. Praėjus 24h po transfekcijos, vienos ląstelės toliau 24h buvo kultivuojamos normaliomis, kitos – hipoksinėmis sąlygomis. Gauti duomenys parodė, kad sumažinta baltymo U2AF65 raiška skatina 10-o egzono įterpimą į iRNR ląstelėse, kultivuotose normaliomis (~1,2 k.) ir hipoksinėmis (~1,1 k.) sąlygomis. U2AF35 raiškos ląstelėse sumažinimas, kaip ir U2AF65 baltymo sumažinimas, skatino 4R Tau iRNR izoformos susidarymą tiek ląstelėse kultivuotose normaliomis deguonies (~1,3 k.), tiek hipoksinėmis (~1,2 k.) sąlygomis.

**Išvados.** Hipoksija SK-N-Be(2) ląstelėse skatina 4R Tau iRNR izoformos susidarymą, tuo tarpu neturi įtakos APP770, APP751 ir APP695 iRNR izoformų raiškai. Rezultatai parodė, kad U2AF65 ar U2AF35 baltymų raiškos padidėjimas slopina, o šių baltymų sumažinimas – skatina Tau 4R izoformos susidarymą SK-N-Be(2) ląstelėse kultivuotose normaliomis deguonies ar hipoksinėmis sąlygomis.

**Padėka.** Šis tyrimas finansuotas pagal ES fondų investicijos veiksmų programą “Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą” Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0268.

## Literatūra

- [1] Will CL, Luhrmann R. *Spliceosome Structure and Function*. Cold Spring Harbor perspectives in biology 3, 2011.
- [2] Shao C, Yang B, Wu T, Huang J, Tang P, Zhou Y, Zhou J, Qiu J, Jiang L, Li H, Chen G, Sun H, Zhang Y, Denise A, Zhang DE, Fu XD. *Nature structural & molecular biology*, 2014, 21:997-1005.
- [3] Merelli A, Rodriguez JCG, Folch J, Regueiro MR, Camins A, Lazarowski A. *Current neuropharmacology*, 2018, 16:1484-1498.
- [4] Zhang F, Niu L, Li S, Le W. *ACS chemical neuroscience*, 2019, 10:902-909.
- [5] Nakayama K, Kataoka N. *Int J Mol Sci*, 2019, 20.
- [6] Sena JA, Wang L, Heasley LE, Hu CJ. *Molecular cancer research*, 2014, 12:1233-1243.
- [7] Matsui T, Ingelsson M, Fukumoto H, Ramasamy K, Kowa H, Frosch MP, Irizarry MC, Hyman BT. *Brain research*, 2007, 1161:116-123.
- [8] Chen S, Townsend K, Goldberg TE, Davies P, Conejero-Goldberg C. *Journal of Alzheimer's disease*, 2010, 22:1313-1329.

**A. Juškauskas<sup>1</sup>,  
L. Truncaitė<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Vilniaus Gedimino  
Technikos Universitetas*

<sup>2</sup>*Vilniaus Universitetas,  
Gyvybės Mokslų Centras,  
Biochemijos Institutas*

## **ESCHERICHIA COLI TRANSLIACIJOS BALTYMŲ IR LIZINIŲ FAGŲ BALTYMŲ SĄVEIKOS**

Virusus vienijanti savybė yra ta, kad jų dauginimuisi yra reikalinga gyva ląstelė-šeimininkė, kurios aplinka, medžiagos ir baltymai infekcijos metu yra nukreipiami virusų vystymuisi. Bakteriofagai, kaip ir kiti virusai, neturi savo translacijos aparato, todėl jie turi paveikti ląstelės šeimininkės translacijos aparatą taip, kad šis sintetintų viruso baltymus. Tai galima pasiekti įvairiais būdais, pavyzdžiui, kai kurių fagų ankstyvųjų baltymų mRNR transkriptai turi labai stiprią Shine-Dalgarno (SD) seką, todėl yra lengviau atpažįstami ribosomų, nei bakteriniai transkriptai [1]. Taip pat dauguma fagų modifikuoja ląstelės šeimininkės baltymus, dalyvaujančius transkripcijoje, tokius kaip RNR polimerazė ar  $\sigma$  veiksniai, tokiu būdu pasiekdami aukštą virusinių mRNR raiškos lygį ir nuslopindami bakterinių mRNR sintezę [2]. Vystymosi priklausomybė nuo ląstelės šeimininkės translacijos aparato yra būdinga visiems virusams, todėl šio proceso pajungimo mechanizmų tyrimai gali suteikti universalių žinių naujiems priešvirusiniams vaistams kurti.

Dėl nesugebėjimo vykdyti medžiagų apykaitos be ląstelės-šeimininkės virusai yra laikomi neląsteline gyvybės forma, tačiau sparčiai augantys genomų sekoskaitos mastai leidžia aptikti vis daugiau ląsteliniais organizmams būdingų genų, tokių kaip tRNR ir ribosominių baltymų genai, kurių produktai kai kada geba įsijungti į ribosomos struktūrą pakeisdami bakterinius homologus [3]. Manoma, kad ribosominius baltymus koduojančių genų paplitimas bakteriofagų genomuose yra susijęs su poreikiu valdyti ląstelės-šeimininkės translacijos aparatą, ir tokie baltymai suteikia fagai evoliucinį pranašumą. Mūsų pradiniai tyrimai rodo, kad *E. coli* ribosominiai baltymai lizinių fagų infekcijos metu gali būti modifikuojami fagų koduojamais baltymais, todėl šio darbo tikslas buvo toliau tirti pastebėtas baltymų sąveikas ir aptikti kitų lizinių fagų baltymus, sąveikaujančius su *E. coli* translacijos baltymais, tikintis, kad tai suteiks daugiau informacijos apie galimas jų funkcijas ir translacijos aparato reguliavimo mechanizmus virusinių infekcijų modelinėse sistemose.

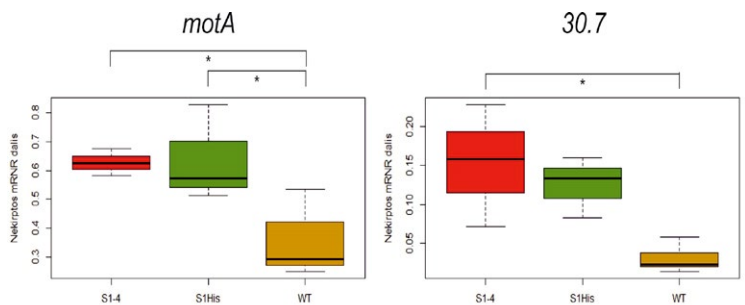
Tyrimo tikslui pasiekti buvo sukonstruotos rekombinantinės plazmidės, kuriose *E. coli* translacijos aparato baltymus S9, L2, EF-Tu ir HPF koduojantys genai buvo sulieti su 6His koduojančia seka. Taip pat buvo sukonstruoti *E. coli* mutantai, kurių genomuose *rpsA* genas, koduojantis ribosominį baltymą S1, buvo sulietas su 6His seka (mutantas S1-His) arba buvo pašalinta geno seka, koduojanti du C-galinius S1 domenų (mutantas S1-4). Mutantai buvo konstruojami tiek BL21, tiek BW25113 *E. coli* kamienų pagrindu, nes tai yra tipiniai B ir K-12 kamieniai. Sukonstruoti S1-His

mutantai ir rekombinantinės plazmidės buvo naudojami naujų baltymų-baltymų sąveikų paieškai indukuojant šių baltymų raišką ir infekuojant bakteriofagais, priklausančiais *Tevenvirinae* (T4 ir RB69), *Ounavirinae* (VpaE1 ir Alf5) ir *Vequintavirinae* (FV3) pošeimiams. Išgryninti 6His žymę turintys baltymai buvo skirstomi NDS-PAA geliuose, tikintis rasti infekcijos metu su jais kompleksus sudarančių fagų baltymų. Tokie baltymai buvo išgryninami iš gelio ir identifikuojami masių spektrometrijos būdu. Šiais metodais buvo nustatytos bei patvirtintos fagų VpaE1 ir RB69 atitinkamai gp45 ir RIII baltymų sąveikos su *E. coli* ribosominiu baltymu S1.

Taip pat buvo tiriama ribosominio baltymo S1 įtaka bakteriofago T4 endoribonukleazės RegB aktyvumui *in vivo*, kadangi yra žinoma, kad *in vitro* esant S1 baltymo šios endoribonukleazės aktyvumas padidėja iki 100 kartų [4]. Šiuo atveju buvo tiriama RegB taikinių, fago T4 genų *30.7* ir *motA*, mRNR karpymo efektyvumas T4 fagui infekuojant *E. coli* kamieną BL21 ir šiame darbe sukonstruotus jo mutantus BL21(S1-His) ir BL21(S1-4). Po infekcijos išskyrus suminę RNR, ji buvo analizuojama <sup>32</sup>P žymėto pradmens ilginimo metodu. Abiejų tirtų transkriptų atvejais, išskyrus juos tiek iš S1-His, tiek ir iš S1-4 mutantų, buvo stebimas sumažėjęs RegB RNazinis aktyvumas, nors S1-His atveju šis skirtumas buvo statistiškai reikšmingas tik *motA* mRNR atveju (1 pav).

**1. pav.**

Fago T4 RegB endoribonukleazės efektyvumas genų *motA* ir *30.7* transkriptų atžvilgiu *E. coli* BL21 ir jo mutantuose S1-4 bei S1His. Storos linijos nurodo medianą, spalvoti stačiakampiai riboja pirmą ir trečią kvartilius, o statmeni brūkšniai rodo minimalią ir maksimalią duomenų reikšmes. Žvaigždutės žymi grupes, tarp kurių yra statistiškai reikšmingas skirtumas ( $p < 0.05$ ).



BL21(S1-4) kamienne sumažėjusio RegB aktyvumo buvo tikėtasi, tačiau rezultatai parodė, kad net ir nedidelio His-inkaro fragmento prijungimas prie S1 baltymo BL21(S1-His) kamienne taip pat sumažina RegB aktyvumą *in vivo*. Gali būti, kad His-inkaras sudaro pakankamą sterinę kliūtį RegB baltymui priartėti prie S1, arba toks S1 baltymas yra netinkamos konformacijos RegB aktyvavimui.

Nors fagu T4 užkrėtus rekombinantinį S1-His turinčius kamienus ir po infekcijos išgryninus S1-His tiesioginė sąveika su RegB nebuvo stebima [5], tačiau gali būti, kad infekcijos metu RegB baltymo tiesiog yra labai mažai, nes RegB nukleazė pasižymi autoreguliacija, t.y. karmo savo pačios transkriptus Shine-Dalgarno srityje bei dar 3 taikinius koduojančioje dalyje [6]. Todėl, siekiant gauti daugiau baltymo, kryptingos mutagenezės būdu buvo sukonstruota rekombinantinė raiškos plazmidė su įklonuotu fago T4 *regB* genu, koduojančiu H48A RegB mutantinį baltymą, kuris turėtų būti neaktyvus [7]. Indukavus tokį geną buvo gauta gana didelė baltymo raiška, o išgryninus buvo stebimos dar 2 papildomos ~25kDa ir ~70kDa baltymų juostelės. Proteominių tyrimais buvo patvirtinta, kad su RegBH48A išsigryninanti ~70kDa juostelė yra ribosominis baltymas S1, o ~25kDa – ribosominis baltymas L1. Pastarasis baltymas

sąveikauja tiek su rRNR, tiek su mRNR ir ląstelėje veikia kaip RNR šaperonas [8,9], tuo tarpu S1 yra svarbus translacijos iniciacijai dėl savo gebėjimo denatūruoti antrines mRNR struktūras [10], todėl galimai RegB sąveikauja su šiais baltymais ne tiesiogiai, o per mRNR. Šio tyrimo metu gauti rezultatai rodo, kad *E. coli* ribosominis baltymas S1 yra panaudojamas skirtingų pošeimių bakteriofagų vystymosi metu. Nors gauti duomenys neatmeta galimybės, kad ir kiti ląstelės translacijos aparato baltymai gali būti modifikuojami ir panaudojami fagų vystymuisi, tačiau šiame darbe aptikti baltymų sąveikų su S1 atvejai yra tolimesniems tyrimams perspektyvūs procesai, galintys suteikti naujos informacijos apie translacijos procesų moduliavimo mechanizmus lizinių fagų infekcijų metu.

---

## Literatūra

- [1] Kutter, E., & Sulakvelidze, A. (2005). *Bacteriophages. Biology and Applications*: CRC Press.
- [2] Geiduschek, E. P., & Kassavetis, G. A. (2010). Transcription of the T4 late genes. *Virology*, 7, 288.
- [3] Mizuno, C. M., Guyomar, C., Roux, S., Lavigne, R., Rodriguez-Valera, F., Sullivan, M. B. & Krupovic, M. (2019). Numerous cultivated and uncultivated viruses encode ribosomal proteins. *Nat Commun*, 10(1), 752.
- [4] Ruckman, J., Ringquist, S., Brody, E., & Gold, L. (1994). The bacteriophage T4 regB ribonuclease. Stimulation of the purified enzyme by ribosomal protein S1. *J Biol Chem*, 269(43), 26655-26662.
- [5] Juškauskas, A. (2016). *Escherichia coli* ir bakteriofago T4 baltymų sąveikų tyrimai in vivo ir in vitro. (Bakalaurinis darbas), Vilniaus universitetas, Vilnius.
- [6] Ruckman, J., Parma, D., Tuerk, C., Hall, D. H., & Gold, L. (1989). Identification of a T4 gene required for bacteriophage mRNA processing. *New Biol*, 1(1), 54-65.
- [7] Saida, F., Uzan, M., & Bontems, F. (2003). The phage T4 restriction endoribonuclease RegB: a cyclizing enzyme that requires two histidines to be fully active. *Nucleic Acids Res*, 31(11), 2751-2758.
- [8] Ameres, S. L., Shcherbakov, D., Nikonova, E., Piendl, W., Schroeder, R., & Semrad, K. (2007). RNA chaperone activity of L1 ribosomal proteins: phylogenetic conservation and splicing inhibition. *Nucleic Acids Res*, 35(11), 3752-3763.
- [9] Schuwirth, B. S., Borovinskaya, M. A., Hau, C. W., Zhang, W., Vila-Sanjurjo, A., Holton, J. M., & Cate, J. H. (2005). Structures of the bacterial ribosome at 3.5 Å resolution. *Science*, 310(5749), 827-834.
- [10] Sorensen MA, Fricke J, Pedersen S. (1998) Ribosomal protein S1 is required for translation of most, if not all, natural mRNAs in *Escherichia coli* in vivo. *J Mol Biol*.280(4):561-9.

**K. Keda,  
G. Tamulaitis**

*Vilniaus universitetas,  
Biotechnologijos institutas*

## III TIPO CRISPR-CAS EFEKTORINIO KOMPLEKSO OPTIMIZAVIMAS TYRIMAMS PAVIENIŲ MOLEKULIŲ METODAIS

CRISPR-Cas yra bakterijų imuninė sistema. Specialiame CRISPR regione yra saugomos praeityje įveiktų užpuoliko nukleorūgščių sekos ir ši informacija naudojama nuslopinti antrines infekcijas. Mūsų laboratorijoje yra tiriamas *Streptococcus thermophilus* III-A tipo CRISPR-Cas efektorinis Csm kompleksas, susidedantis iš crRNR ir ją surišusių Cas baltymų, atsakingų už komplekso funkcijas [1]. Buvo pastebėta, kad Csm kompleksui atpažinus svetimą transkriptą aktyvinama komplekso DNazė, kuri hidrolizuoja užpuoliko DNR [2], tačiau šios reguliacijos mechanizmas nėra žinomas. Pasielkus pavienių molekulių tyrimų metodus būtų galima tiesiogiai stebėti komplekso sąveiką su fluorescenciškai pažymėtomis nukleorūgštimis ir nustatyti kokiu mechanizmu jis yra reguliuojamas. Planuodami šiuos eksperimentus susidūrėme su problema: *Streptococcus thermophilus* Csm komplekso sintezė vyksta per kelias stadijas ir susidaro kompleksai, kurie yra surišę skirtingo ilgio crRNR [3] dėl ko jie nėra homogeniški ir netinka tyrimams pavienių molekulių tyrimų metodais. Šio darbo metu mes išbandėme dvi taktikas, kad gautume homogenišką Csm kompleksą: naudojome crRNR sulietą su save iškerpančiais ribozimais, kurie galėtų apkarpyti crRNR iki vienodo ilgio bei mėginome kompleksą frakcionuoti pagal dydį jį gryninant gelfiltracijos būdu. Antroji taktika leido gauti 50% grynumo kompleksą. Toks kompleksas yra tinkamas objektas pavienių molekulių eksperimentams, šie tyrimai pradėti bendradarbiaujant su užsienio partneriais.

---

### Literatūra

- [1] Mogila, I., Kazlauskienė, M., Valinskaitė, S., Tamulaitienė, G., Tamulaitis, G. and Siksnys, V. (2019). Genetic Dissection of the Type III-A CRISPR-Cas System Csm Complex Reveals Roles of Individual Subunits. *Cell Reports*, 26(10), pp.2753-2765.e4.
- [2] Kazlauskienė, M., Tamulaitis, G., Kostiuik, G., Venclovas, Č. and Siksnys, V., 2016. Spatiotemporal Control of Type III-A CRISPR-Cas Immunity: Coupling DNA Degradation with the Target RNA Recognition. *Molecular Cell*, 62(2), pp.295-306.
- [3] Walker, F., Chou-Zheng, L., Dunkle, J. and Hatoum-Aslan, A. (2016). Molecular determinants for CRISPR RNA maturation in the Cas10–Csm complex and roles for non-Cas nucleases. *Nucleic Acids Research*, p.gkw891.

**A. Kopūstas,  
M. Zaremba**

*Vilniaus universitetas*

## **ENDONUKLEAZIŲ SĄVEIKOS SU DNR TYRIMAI PAVIENIŲ MOLEKULIŲ LYGMENYJE**

Baltymų ir DNR sąveikų tyrimai pavienių molekulių lygmenyje suteikia galimybę nagrinėti individualias šių biomolekulių kompleksų populiacijas, iš kurių kiekviena galimai pasižymi unikaliomis savybėmis. Pakankamai neseniai mes sukūrėme ir sėkmingai išplėtojome didelio našumo fiksuotų DNR molekulių platformą, skirtą baltymų ir DNR sąveikų tyrimams pavienių molekulių lygmenyje [1]. Taip pat kaip ir tradicinė „DNR užuolaidų“ technologija šis mūsų sukurtas eksperimentinis įrankis, remiantis visiškojo vidaus atspindžio fluorescencinės mikroskopijos metodu, leidžia vizualizuoti didelį kiekį sąveikų, vykstančių tarp pavienių tiriamojo baltymo molekulių ir šimtų ant stiklo paviršiaus imobilizuotų lygiagrečiai išlygiuotų ištiestų įvairaus ilgio individualių DNR molekulių, bei tokiu būdu vieno eksperimento metu sukaupti išties nemažą statistinių duomenų rinkinį. Lyginant su visais iki šiol sukurtais įprastinės „DNR užuolaidų“ technologijos variantais, iš kurių kiekvienas yra paremtas lipidinio dvisluoksnio ir difuzinių chromo barjerų naudojimu [2, 3], fiksuotų DNR molekulių platforma yra pagrįsta chemiškai modifikuoto stiklo paviršiaus nanostruktūrizavimu streptavidinu, ant kurio po to yra imobilizuojamos ir tuomet buferio tėkmės pagalba ištiesiamos pavienės biotinilintos DNR molekulės. Šis funkcionavimo principas užtikrina minėtos eksperimentinės platformos paprastumą, pigumą ir technologinį prienamumą.

Iš dviejų baltymų – restrikcijos endonukleazės R.NgoAVII ir helikazės/ATPazės H.NgoAVII – sudaryta, *Neisseria gonorrhoeae* bakterijose aptinkama naujo tipo restrikcijos endonukleazė NgoAVII, atpažįstanti asimetrinę pentanukleotidinę 5'-GCCGC-3' seką [4], bei šiuo metu genomo inžinerijoje plačiausiai naudojamai, bakterijose *Streptococcus pyogenes* funkcionuojančiai II tipo CRISPR-Cas sistemai priklausanti Cas9 endonukleazė yra puikūs tyrimo objektai, kadangi praktiškai beveik nėra jokių tyrimų, kuriuose šie fermentai būtų nagrinėjami pavienių molekulių lygmenyje [5]. Iš esmės visos apie šiuos baltymus iki šiol surinktos žinios buvo gautos pagrįdę naudojant standartinius biocheminius metodus ir įprastus molekulinės biologijos įrankius.

Taigi, naudojantis mūsų sukurta fiksuotų DNR molekulių eksperimentine platforma, pavienių molekulių lygmenyje atliktas endonukleazių R.NgoAVII ir Cas9 bei helikazės/ATPazės H.NgoAVII sąveikos su DNR ypatumų nustatymas bei vizualizacija galėtų suteikti ne tik naujų žinių apie šiuos baltymus, bet taip pat kartu atskleisti ir dar daugiau tik jiems būdingų, tradiciniais biocheminiais metodais neaptinkamų ypatybių.

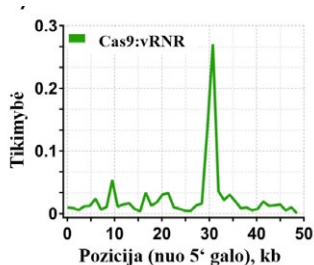
Šio projekto metu iš pradžių buvo patobulinta mūsų sukurta fiksuotų DNR molekulių platforma. Tai buvo atlikta modifikuojant bakteriofago λ DNR molekules skirtingo specifškumo žymenimis - prie kairiojo λ DNR molekulės galo buvo prijungtas biotinas, o prie dešiniojo – digoksigeninas. Ši λ DNR molekulių funkcionalizavimo strategija leido ant paviršiaus imobilizuoti nukleotidų sekos atžvilgiu vienodai orientuotas λ DNR molekules ir tokiu būdu dar labiau padidino fiksuotų DNR molekulių eksperimentinės platformos tinkamumą efektyviems pavienių baltymų ir DNR sąveikos tyrimams. Be to, į λ DNR molekules asimetriškai specifinėje vietoje (14711 bp atstumu nuo biotinilinto λ DNR molekulės galo) buvo įvesta ATTO647N fluorescencinė žymė, kas leido galutinai įsitikinti, jog dviem galais ant paviršiaus fiksuotų fago λ DNR molekulių, kurių galai buvo funkcionalizuoti biotinu ir digoksigeninu, orientacija yra tiksliai apibrėžta ir vienoda.

*E. coli* BL21 DE3 kamieno ląstelėse buvo atlikta streptavidino *Alive* (A) ir *Dead* (D) variantų bei traptavidino raiška. Iš atitinkamų subvienetų buvo surinkti šių baltymų tetrameriai – monovalentinis streptavidinas ir tetravalentinis traptavidinas, kurie po to buvo išgryninti remiantis giminingumo chromatografijos metodu. Tuomet monovalentinis streptavidinas buvo pažymėtas ATTO647N arba sulfo-Cy5 fluoroforu, šių dažiklių N-hidroksisukcinimido (NHS) esterius kovalentiškai prijungus prie baltymo paviršiuje esančių pirminių aminių. Atlikus pavienių molekulių fluorescencinės mikroskopijos matavimus, nustatyta, jog monovalentinis streptavidinas, sukongjuotas su minėtais organiniais fluoroforais, vis tik nėra itin tinkamas fluorescenciniam biotinilintų R.NgoAVII, H.NgoAVII ir Cas9 fermentų žymėjimui dėl sutrikdyto baltymo funkcionalumo (ATTO647N-NHS dažo atveju) arba dėl atsiradusio dažiklių tarpusavio sukkelto fluorescencijos gesinimo reiškinio (sulfo-Cy5-NHS fluoroforo atveju).

Restrikcijos endonukleazė R.NgoAVII buvo pažymėta fluorescenciškai prie jos paviršiuje esančių cisteinų tiolinių grupių kovalentiškai prijungus AF555-maleimido ir AF647-maleimido konjugatus. R.NgoAVII restrikcijos fermento fluorescencinio žymėjimo efektyvumas siekė maždaug 30%. Remiantis mūsų sukurta fiksuotų DNR molekulių platforma, pavienių molekulių lygmenyje buvo įgyvendinti minėtais fluoroforais pažymėtos restrikcijos endonukleazės R.NgoAVII sąveikos su individualiomis abiem galais ant paviršiaus imobilizuotomis bakteriofago λ DNR molekulėmis vizualizacijos eksperimentai. Jų metu buvo stebimas labai negausus R.NgoAVII jungimasis prie fiksuotų λ DNR molekulių ir pakankamai didelė šio baltymo nespecifinė adsorbicija ant chemiškai modifikuoto ir papildomai pasyvuoto stiklo paviršiaus.

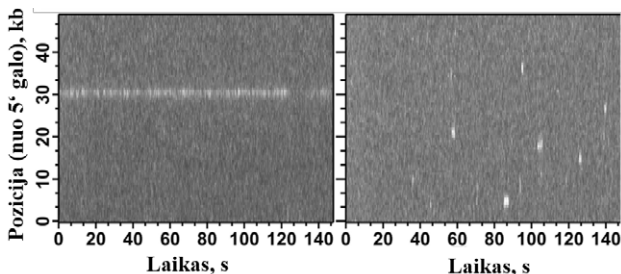
Cas9:vedančiosios RNR (vRNR) efektorinio komplekso fluorescencinis žymėjimas buvo atliktas modifikuotos tracrRNR 3' galą suhibridizavus su komplementariu kovalentiškai prijungtą ATTO647N fluoroforą turinčiu deoksiligonukleotidu. Komplekso fluorescencinio žymėjimo laipsnis siekė apie 80%. Atlikti bakteriofago λ DNR *in vitro* hidrolizės eksperimentai su skirtingos sudėties Cas9:vRNR kompleksais parodė, jog tracrRNR 3' galo modifikavimas ir fluoroforo prijungimas prie Cas9:vRNR komplekso stipriai nepažeidžia Cas9 baltymo nukleazinio aktyvumo.

Naudojantis mūsų išplėtotu alternatyviu "DNR užuolaidų" įrankiu, buvo atlikta pavienių Cas9 ribonukleoproteininių kompleksų, žymėtų ATTO647N fluoroforu, sąveikos su ant paviršiaus abiem galais fiksuotomis individualiomis bakteriofago λ DNR molekulėmis vizualizacija. Išanalizavus šių eksperimentų metu surinktus statistinius duomenis, nustatyta, jog Cas9:vRNR kompleksas didžiąja dalimi atvejų buvo tiksliai prisijungęs prie savo taikinio λ DNR molekulėje (Cas9 taikinytis yra išsidėstęs 31,3 kb atstumu nuo kairiojo (biotinilinto) λ DNR molekulės galo) (1 pav.). Kitose λ DNR molekulės vietose buvo stebimas ženkliai mažesnis Cas9:vRNR efektorinio komplekso prisijungimo įvykių skaičius, nors iš histogramos matyti, kad tiriamasis fermentas buvo labiau linkęs jungtis prie kairiosios λ DNR molekulės pusės galimai dėl to, jog šios λ DNR molekulės dalies GC sąstatas yra aukštesnis.



**1. pav.**  
Histograma, rodanti Cas9 ribonukleoproteininio kompleksa prisijungimo pasiskirstymą.

Ivertinus šio komplekso prisijungimo įvykių trukmę, išsiaiškinta, kad Cas9 baltymas prie savo taikinio išbuvo prisijungęs vidutiniškai ~52 sekundes (ilgi prisijungimo įvykiai), o prie bet kurios kitos λ DNR molekulės pozicijos - ~7 sekundes (trumpi prisijungimo įvykiai) (2 pav.).



**2. pav.**  
Reprezentatyvios kymogramos, atvaizduojančios ilgus (kairėje) ir trumpus (dešinėje) Cas9:vRNR komplekso prisijungimo įvykius.

## Literatūra

- [1] Tutkus M., Rakickas T., Kopūstas A., Ivanovaitė Š., Venckus O., Navikas V., Zaremba M., Manakova E., Valiokas R. *Langmuir*, 2019, 35(17), 5921-30.
- [2] Collins B. E., Ye L. F., Duzdevich D., Greene E. C. *Methods Cell Biol.*, 2014, 123, 217-34.
- [3] Gallardo I. F., Pasupathy P., Brown M., Manhart C. M., Neikirk D. P., Alani E., Finkelstein I. J. *Langmuir*, 2015, 31(37), 10310-7.
- [4] Zaremba M., Toliušis P., Grigaitis R., Manakova E., Šilanskas A., Tamulaitienė G., Szczelkun M. D., Šikšnys V. *Nucleic Acids Res.*, 2014, 42(22), 13887-13896.
- [5] Doudna J. A., Charpentier E. *Science*, 2014, 346(6213), 1258096.



**J. Martinkus,  
R. Krasauskas,  
E. Sužiedėlienė**

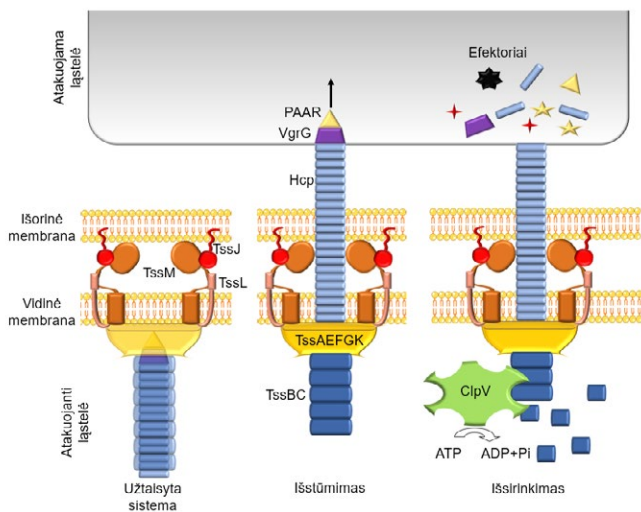
*Vilniaus universitetas*

## **ACINETOBACTER BAUMANNII VI TIPO SEKRECIJOS SISTEMOS VAIZDINIMO TYRIMAI**

*Acinetobacter baumannii* yra lignonėse plintanti ir daugeliui antibiotikų atspari Gram-neigiamų bakterijų rūšis. Šios bakterijos yra vadinamos oportunistiniais patogenais dėl sukeltų sunkiai gydomų hospitalinių infekcijų, kurios ypatingai pavojingos kritiniams ligoniams [1]. Gram-neigiamų bakterijų patogenezėi itin svarbios sekrecijos sistemos, kuriomis į aplinką ar kitą ląstelę gali būti sekretuojami įvairūs efektoriai, skatinantys patogenezę ir virulentiškas bakterijų savybes [2]. VI tipo sekrecijos sistemos (T6SS) yra plačiai paplitusios tarp Gram-neigiamų bakterijų rūšių, įskaitant ir *A. baumannii* [3]. T6SS yra molekulinės mašinos, kuriomis efektoriai pernešami į bakterijos išorę ar kitas bakterijas bei eukariotines ląsteles (1 pav.). T6SS sistemą sudaro abi Gram-neigiamų bakterijų membranas perveriantis 13 skirtingų baltymų kompleksas, kurio viduje yra nanovamzdelis (dar vadinamas adata). Adata yra oligomeras, sudarytas iš Hcp baltymo molekulių [4]. Adatos išstūmimo metu efektoriai bei Hcp baltymo molekulės yra sekretuojamos į išorę. Paprastai viena bakterijos ląstelė turi vieną arba kelias T6SS molekulinės mašinas, kurias galima vizualizuoti fluorescencinės mikroskopijos pagalba dėl jų didelio dydžio [5].

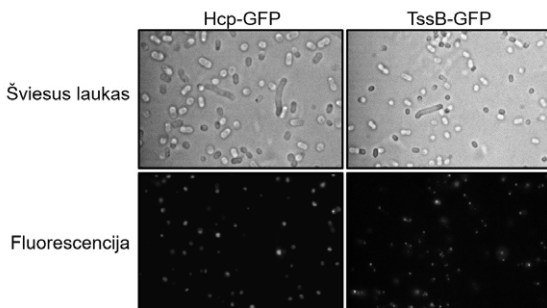
Ankstesnių laboratorijoje vykdytų darbu metu buvo nustatyta, kad bakterijose, kuriose išveiktas genas, koduojantis transkripcijos reguliatorių BfmR, sumažėja Hcp baltymo molekulių sekrecija į ląstelės išorę [6]. Iki šiol ryšys tarp *A. baumannii* BfmR reguliatoriaus ir Hcp sekrecijos nebuvo parodytas. Todėl šio darbo tikslas yra iširti *Acinetobacter baumannii* bakterijos T6SS ir BfmR reguliatoriaus ryšį, pasitelkiant Hcp baltymo formuojamos struktūros vaizdinimą bakterijos ląstelėje.

*A. baumannii* deleciniai mutantai buvo konstruojami panaudojant bakterijose natūraliai vykstančią dvigubą homologinę rekombinaciją [7]. Sulietiniai baltymai gauti PGR reakcijos metu naudojant pradmenis su persidengiančiomis sekomis, o jų funkcionalumas buvo patikrintas tarpbakterinės konkurencijos tyrimais [6]. Sulietinių baltymų sintezė nustatyta baltymų elektroforezės metodu denatūruojančiomis sąlygomis, o baltymų indukcija atlikta naudojant IPTG skystoje LB terpėje. Atsirinkty *A. baumannii* bakterijų su rekombinantinėmis plazmidėmis fluorescencija vertinta fluorescenciniu mikroskopu po indukcijos su IPTG.



**1 pav.**  
T6SS aparato struktūra, būsenos ir veikimo principas Gram-neigiamose bakterijose.

Žaliai fluorescuojantis baltymas (toliau – GFP) *A. baumannii* sekrecijos sistemos pažymėjimui buvo sulietas tiek Hcp baltymo N-gale (toliau – GFP-Hcp), tiek C-gale (toliau – Hcp-GFP). Kitas T6SS aparato komponentas – TssB, sulietas C-gale (toliau – TssB-GFP). Kadangi Hcp baltymas yra būtinas funkcionaliai T6SS, kuri atsakinga už kitų bakterijų žudymą, buvo patikrinta ar sukonstruoti sulietiniai baltymai atstato žudymo fenotipą *A. baumannii*  $\Delta hcp$  mutante. Nustatyta, kad Hcp suliejimas su GFP tiek baltymo N-gale, tiek C-gale sutrukdė susidaryti funkcionaliam T6SS aparatui, todėl žudymo fenotipas nebuvo atstatytas. Nefunktionalumo priežastims išsiaiškinti, pirmiausia, norėta įvertinti, ar vyksta baltymų sintezė, todėl vykdyta *A. baumannii* bakterijų visuminių baltymų elektroforezė. Baltymų elektroforezės rezultatai parodė, kad tik Hcp-GFP konstruktas yra sintetinamas. *A. baumannii* kamienuose, kurie turi plazmides, koduojančias GFP-Hcp ir TssB-GFP, tirpūs baltymai nesusidaro, nėra sintetinami iš viso arba sintetinami mažais kiekiais, kurių vizualizuoti mūsų naudotas metodus neleidžia.



**2 pav.**  
Mikroskopu vizualizuotos bakterijos ir jų fluorescencija *A. baumannii*  $\Delta hcp$  mutančiuose su plazmide, kurioje Hcp baltymas sulietas su GFP C-gale ir TssB baltymas sulietas su GFP C-gale.

Sulietiniai baltymų konstruktai *A. baumannii* buvo patikrinti fluorescencinės mikroskopijos pagalba. Eksperimentai *A. baumannii*  $\Delta hcp$  bakterijose parodė, kad Hcp-GFP ir TssB-GFP baltymai fluorescavo (2 pav.). Todėl toliau nuspręsta sekretijos sistemos aktyvumą tirti per TssB baltymą. Tam, kad būtų galima įvertinti pažymėjimo įtaką T6SS funkcionalumui, reikalingas  $\Delta tssB$  *A. baumannii* mutantas, kuris yra konstruojamas ir turėtų suteikti galimybę pažymėti funkcionalų T6SS aparatą.

---

### Literatūra

- [1] Howard A., Donoghue M. *Virulence*, 2012, 3, p. 243-250.
- [2] Navarro-Garcia F., Ruiz-Perez F. *Front. Microbiol.*, 2019, 10, p. 1965.
- [3] Records A. R. *Mol. Plant-Microbe Interact.*, 2011, 24, p. 751–757.
- [4] Vettiger A., Winter J. *Nat. Commun.*, 2017, 8, p. 16088
- [5] Cianfanelli F. R., Monlezun L. *Trends Microbiol.*, 2015, 24, p. 51-62.
- [6] Krasauskas R., Skerniškytė J. *BMC Microbiol.*, 2019, 19, p. 241.
- [7] Oh M. H., Lee J. C., *Appl. Environ. Microbiol.*, 2015, 81, p. 3357-3368.

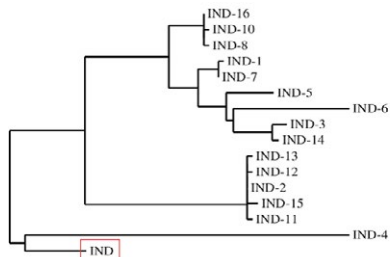
I. Ragaišis,  
R. Krasauskas

Vilniaus Universitetas,  
Gyvybės mokslų centras,  
Biomokslų institutas

## CHRYSEOBACTERIUM SP. METALO BETA LAKTAMAZĖS IND CHARAKTERISTIKA

Antibiotikai yra natūraliai grybų ar bakterijų sintetamos medžiagos, slopinančios bakterijų augimą ir nuo 1941-ųjų metų yra naudojamos klinikoje gydyti bakterines infekcijas. Tačiau dėl neatsakingo šių medžiagų naudojimo gydyme, gyvulininkystėje ir žemės ūkyje, pasaulyje sparčiai plinta antibiotikams atsparios bakterijos [1]. Atsparios patogeninės bakterijos kelia sunkiai pagydomas ligas ir kiekvienais metais dėl šio atsparumo vien Europos Sąjungoje miršta virš 30000 žmonių [2]. Dažniausiai klinikoje naudojamų antibiotikų klasė yra  $\beta$ -laktamai, kurie slopina ląstelės sienelės sintezę ir taip sukelia ląstelių žūtį. Bakterijos apsisaugoti nuo  $\beta$ -laktamų poveikio naudoja juos skaidančius fermentus –  $\beta$ -laktamazės. Šių fermentų genai gali būti horizontaliai perduodami tarp įvairių bakterijų, taip spartinant atsparumo  $\beta$ -laktamams plitimą [3].

Dauguma dirvos mikrobus natūraliai susiduria su antibiotikais ir per ilgą laiką yra išvystę įvairių atsparumo jiems mechanizmų. Kai kurios dirvoje gyvenančios bakterijos gali tapti oportunistiniais patogenais – kelti nusilpusio imuniteto žmonių infekcijas – ir tuo pačiu gali pernešti atsparumo antibiotikams genus iš dirvos svarbioms patogeninėms bakterijoms. Vienas tokių pavyzdžių – *Chryseobacterium* genties bakterijos yra dažnai sutinkamos dirvoje, sudariusios simbiotinius ryšius su augalais ir gerina šių augimą, tačiau trys rūšys – *C. indologenes*, *C. gleum* ir *C. oranimense* yra žinomos kaip oportunistiniai patogenai, jos kelia šlapimo takų infekcijas bei bakteremiją, pneumoniją, meningitą ir pan. Nuo 1996 m. virulentų *Chryseobacterium* genties bakterijų šaltinis buvo Taivanas, o per pastarąjį dešimtmetį šios bakterijos lėtai paplito visame pasaulyje [4]. Šios bakterijos turi genčiai specifiską IND  $\beta$ -laktamazę, kuri yra atsakinga už *Chryseobacterium* genties atstovų atsparumą  $\beta$ -laktamams [5].



### 1 pav.

Rastojų fermento filogenetiniai ryšiai su kitais IND  $\beta$ -laktamazių aprašytais variantais. Identifikaciniai numeriai: IND-1 AAD20273.1, IND-2 AAG29759.1, IND-3 AAG29763.1, IND-4 AAG29765, IND-5 AAS78754.1, IND-6 CAJ32373.2, IND-7 BAJ05825, IND-8 ACZ65152, IND-10 ADA13241, IND-11 ADK25050.1, IND-12 ADK25051.1, IND-13 ADK25052.1, IND-14 ADK38716.1, IND-15 BAJ14288.1 ir IND-16 ALP75901.1. Filogenetinio medžio vizualizacija padaryta naudojant Phylogeny.fr serverio Phylogeny analysis programą.

Tyrimo objektas – iš *Chryseobacterium* spp. funkcinės genų bibliotekos atrinkta nežinoma IND β-laktamazė. Kadangi šis fermentas nėra pakankamai panašus į kitus IND atstovus (1 paveikslas), bei suteikė bent 32 kartų padidėjusį atsparumą penicilinams, I, II ir III kartos cefalosporinams bei karbapenemams (1 lentelė), buvo nuspręsta jį charakterizuoti. Tam sukurtas IND β-laktamazės klonas su 6His gryninimo žyme prilieta prie fermento N galo. Gautas fermento klonas nebuvo funkciškai aktyvus – *Escherichia coli* ląstelėms nesuteikė atsparumo cefuroksimui.

**1 lentelė.** IND β-laktamazės suteikiamo atsparumo β-laktamams *E. coli* ląstelėms spektras. ND – nėra duomenų, NK – neigiama kontrolė (pET28b(+)).

Antibiotikas	Mažiausia slopinimo koncentracija, µg/ml		
	NK	pET_IND	pET_hisTEV_IND
ampicilinas	3	>3200	ND
cefazolinas	2	>64	ND
cefuroksimas	0,3	160	0,5
ceftazidimas	0,3	160	ND
ceftriaksonas	0,25	>64	ND
imipenemas	0,25	>256	ND
meropenemas	0,5	>256	ND

Tam prieš baltymo pradžia buvo įterpta TEV proteazės kirpimo sritis, kuri gali būti pašalinta kartu su 6His žyme. Kadangi baltymo raiška indukuojant nebuvo stebima, buvo nuspręsta baltymą gryninti iš didesnio kultūros kiekio. Toliau pagal planą fermentas bus gryninamas Ni-NTA gryninimo kolonėle. Gauta IND β-laktamazė bus charakterizuojama nustatant oligomerizacijos laipsnį, pI, Michaelio ir katalitinės konstantas įvairiems β-laktamams.

---

### Literatūra

- [1] Munita JM, Arias CA. *Microbiol Spectr.*, 2016, 4(2).
- [2] Cassini A., Diaz Högberg L., *The Lancet Infectious Diseases*, 2019, 19(1), 56-66 psl.
- [3] Bush K., Bradford P., *Cold Spring Harb Perspect Med.*, 2016, 6:a025247
- [4] Mukerji R., Kakarala R., *BMJ Case Reports.*, 2016:bcr2016214486.
- [5] Zeba B., De Luca F., *Antimicrobial Agents Chemotherapy.*, 2009, 53(10), 4320–4326 psl.

**G. Rimkutė,  
J. Razumienė,  
I. Šakinytė**

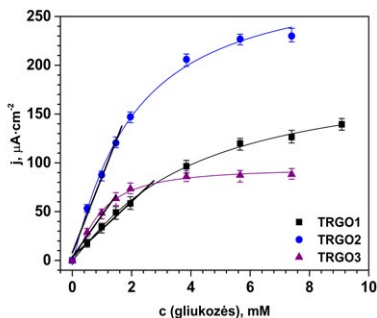
*Vilniaus universitetas*

## TREČIOS KARTOS BIOJUTIKLIŲ, SUKURTŲ NAUDOJANT TRGO FRAKCIJAS IR GLIUKOZĖS DEHIDROGENAZĘ, EFEKTYVUMO IR SUBSTRATINIO ATRANKUMO TYRIMAI

Pasaulinė biojutiklių rinka kasmet stabiliai auga ir prognozuojama, kad iki 2024 metų ji pasieks 31,5 milijardo JAV dolerių [1]. Šį augimą lemia tiek sparčiai didėjanti technologinė pažanga, tiek su ja susijęs greitėjantis gyvenimo tempas, dėl kurio kyla nebrangių, mobilių, nesudėtingai naudojamų bei rezultatus realiu laiku suteikiančių analizinių prietaisų paklausa. Ypatingai daug dėmesio sulaukia elektrocheminiai trečios kartos biojutikliai, kurių veikimas pagrįstas tiesiogine elektronų pernaša (TEP) tarp fermento aktyvaus centro ir elektrodo paviršiaus [2]. Tačiau sukurti efektyviai veikiančius trečios kartos biojutiklius nėra lengva. Dėl to atsigręžiama į anglines nanomedžiagas, kurios pasižymi puikiomis elektronų pernašos savybėmis bei gali būti gan nesudėtingai modifikuojamos įvairiomis funkcinėmis grupėmis, kurios taip pat užtikrina efektyvų ir ilgalaikį fermentų veikimą biojutikliuose.

**Šio tyrimo tikslas** – sukurti trečios kartos biojutiklius, naudojant termiškai redukuoto grafeno oksido (TRGO) frakcijas ir nuo pirolino chinolinchinono priklausomą gliukozės dehidrogenazę (PQQ-GDH) iš *Acinetobacter calcoaceticus* sp., ir iširti šių biojutiklių efektyvumą bei substratinį atrankumą. Darbo metu pradedant nuo daugiapakopės anglinių medžiagų sintezės atkartojamumo, toliau nustatant gautų medžiagų fizikochemines savybes ir optimizuojant amperometrinio biojutiklio veikimą, išvystomas trečios kartos biojutiklis (GDH-TRGO). Pirmiausiai modifikuotu Hummers'o metodu buvo susintetintas grafito oksidas (GO), kuris toliau termiškai redukuotas gaunant tris TRGO frakcijas (TRGO1, TRGO2, TRGO3). Nustačius anglinių medžiagų elektrinį laidumą bei ištyrus medžiagas TGA ir BET metodais, išsiaiškinta, kad atlikus redukciją, anglinės struktūros dalinai susigrąžino elektrinį laidumą, prarado didžiąją dalį deguoninių funkcinę grupių ir jų specifinis paviršiaus plotas išaugo. Mažiausiu deguoninių funkcinę grupių kiekiu pasižymėjo, t. y. labiausiai redukuota buvo TRGO3 frakcija.

Iširtos anglinės medžiagos – grafitas, GO ir TRGO frakcijos, buvo panaudotos konstruojant biojutiklius, kurių biologinę dalį sudarė PQQ-GDH. Didžiausias šio fermento privalumas yra tai, kad jo veikimui nėra būtinas deguonis, t. y. deguonis nėra natūralus šio fermento elektronų akceptorius [3]. TEP buvo realizuota tik su TRGO frakcijomis, o su grafitu bei GO, dėl jų netinkamų savybių, bioelektrokatalizė nevyko. Apie sukurtų amperometrinę fermentinių biojutiklių veikimo efektyvumą buvo sprendžiama iš generuojamos elektros srovės tankio priklausomybių nuo gliukozės koncentracijos, kurios pateiktos 1 pav.



**1 pav.**  
Biojutiklių su TRGO1, TRGO2, TRGO3 generuojamos srovės tankio priklausomybės nuo gliukozės koncentracijos.

Kaip matoma 1 pav., efektyviausiai veikė biojutiklis su TRGO2. Jo jautris siekė  $77,70 \pm 3,76 \mu\text{A} \cdot \text{mM}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$ , o apskaičiuota žemiausia nustatyto riba buvo  $0,0011 \text{ mM}$ . TRGO2 pasižymėjo aukščiausiu elektriniu laidumu ( $2,64 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$  logaritminėje skalėje), didžiausiu paviršiaus plotu ( $707,97 \pm 0,29 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ ) bei optimaliu deguoninių funkcinių grupių kiekiu, kas nulėmė didžiausią biojutiklio jautrumą.

Išanalizavus sukurtų biojutiklių substratinį atrankumą, nustatyta, kad visi biojutikliai buvo jautresni monosacharidams dėl mažesnio jų molekulių dydžio. Didžiausias biojutiklių generuojamas signalas gautas, kai substratai buvo ribozė ir ksilozė. Biojutiklių su TRGO1 ir TRGO2 jautris ribozei buvo 30 % didesnis nei gliukozei. Biojutiklio su TRGO3 jautris ksilozei buvo maždaug 8 % didesnis negu gliukozei. Nustatytas platus substratinis atrankumas atveria dideles biojutiklių pritaikymo galimybes pramoninėse technologijose, kur vykdoma įvairių sacharidų konversija.

Siekiant sukonstruoti biojutiklius ateityje pritaikyti neinvazinių metodų kūrimui medicinoje, darbe sukurtas GDH-TRGO biojutiklis buvo išbandytas įvertinant sacharidų koncentraciją realiose terpėse. Optimizavus bioelektrokatalizinę sistemą, nustatyta, kad GDH-TRGO yra tinkamas  $\beta$ -D-gliukozės bei  $\beta$ -D-maltozės nustatymui ūminiu pankreatitu (ŪP) sergančių pacientų šlapime, kai šlapimo mėginiai yra 10 kartų skiesti, o darbinio elektrodo potencialas yra  $0,1 \text{ V}$ . Biojutiklio įvertinus  $\beta$ -D-maltozės kiekio pokyčius ŪP sergančių pacientų šlapimo mėginiuose, būtų galima prognozuoti ligos eigą dar ankstyvoje stadijoje, taip užkertant kelią jos komplikacijoms.

### Literatūra

- [1] Maniya, N.H., Srivastava, D.N. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2020, 115, 105126.
- [2] Putzbach, W., Ronkainen, N.J. *Sensors*, 2013, 13, 4811–4840.
- [3] Ferri, S., Kojima, K., Sode, K. *Journal of Diabetes Science and Technology*, 2011, 5, 1068–1076.

**J. Ritmejeris,  
R. Žilionis**

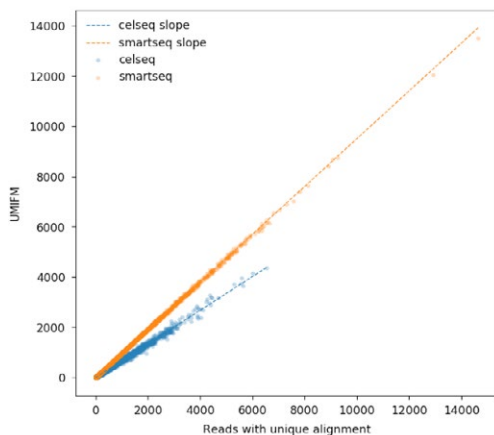
*Vilniaus universitetas,  
Biotechnologijų institutas,  
Mikrotechnologijų sektorius*

## PAVIENIŲ LĄSTELIŲ RNA-SEQ BIBLIOTEKOS KONSTRAVIMAS

Nors daugialąščiai organizmai yra sudaryti iš įvairių organų ir skirtingų ląstelių tipų, visos somatinės ląstelės turi identiškas genomo kopijas. Vykdoma savita genų reguliacija atskirose ląstelėse sukuria kompleksiskus organizmus. Ilgą laiką audiniai arba didelės ląstelių populiacijos buvo analizuojamos stebint visų tiriamų ląstelių genų raiškos vidurkį. Atlikus RNR sekoskaitos (RNA-seq) tyrimus, buvo parodyta reikšmingas genų ekspresijos heterogeniškumas [1]. Pirmieji eksperimentai, kuriuose buvo atliekami RNA-seq tyrimai pavienių ląstelių lygmenyje, tyrinėjant embrioninių ląstelių vystymąsi [2]. Siekiant suprasti kompleksiską daugialąščių organizmų vystymąsi atsirado poreikis tyrinėti dideles ląstelių populiacijas. Dėl šios priežasties prasi-dėjo aukšto našumo technologijų kūrimas pavienių ląstelių genų raiškos tyrimams. Šių metodų kūrimą labiausiai limitavo dvi problemos: sudėtingas ląstelių atskyrimas į atskirus kompartmentus ir mažas informacinių RNR (iRNR) molekulių kiekis pavienėse ląstelėse.

Per pastarąjį dešimtmetį buvo sukurti įvairūs pavienių ląstelių RNR sekoskaitos (scRNA-seq) metodai, įgalinantys efektyviai stebėti eukariotinių ląstelių transkriptomą [3]. Pavienių ląstelių tyrimų našumą ženkliai padidino mikroskysčių technologijos, kurių pagalba ląstelės atskiriamos į lašelius. Lašeliuose yra vykdomas ląstelių lizavimas bei atvirkštinės transkripcijos reakcija sugaunant informacinę RNR [4]. Gauta kopijinė DNR (kDNR) toliau yra amplifikuojama dvejais skirtingais būdais: in vitro transkripcijos (IVT) arba polimerazės grandinės reakcija (PGR). Nors šie cDNR padauginimo būdai pasižymi skirtingais principais, tačiau jie yra konkurencingi ir sprendžia tą pačią scRNA-seq problemą – išsaugoti kuo didesnę kiekį atskirose ląstelėse koduojamų transkriptų. Pritaikant IVT dauginimo metodą buvo sukurta CEL-seq (angl. Cell Expression by Linear Amplification Sequencing) technologija [5]. Tuo tarpu PGR dauginimo principu buvo sukurta Smart-seq2 (angl. Switch Mechanism at the 5' End of RNA Templates) technologija [6]. Taikant IVT reakciją kDNR yra transkribuojama linijiniu principu, taip išsaugant teisingus sekų santykinius kiekius, tačiau šis metodas reikalauja papildomo atvirkštinės transkripcijos žingsnio. PGR principu dauginamos sekos yra amplifikuojamos nelinijishiškai ir padauginimo efektyvumas yra priklausomas nuo dauginamos sekos, dėl to gali būti prarandama informacija apie teisingą transkriptų pasiskirstymą ląstelėse, tačiau šis metodas yra ženkliai greitesnis ir reikalaujantis mažiau etapų.





**1 pav.**

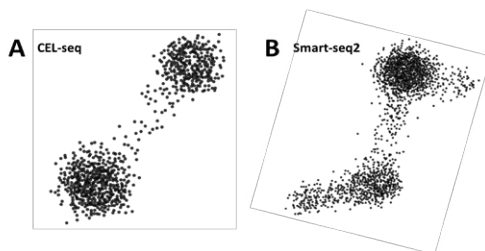
*Pavienių ląstelių duomenų analizė vaizduojanti atskirų ląstelių sugaunamų unikalių transkriptų dažnį kas kartą sekvenuojant atskirą molekulę. Atskiri taškai vaizduoja individualius barkodus turinčias ląsteles. Punktyrinės linijos vaizduoja ląstelių pasiskirstymo x,y ašyse regresinę analizę.*

kDNR padauginimo technologijos yra pastoviai tobulinamos, siekiant gauti kuo didesnį metodo jautrumą, mažesnę kainą bei sutrumpinti mėginių paruošimo laiką. Naudojant turimą mikroskysčių technologiją pavienėms ląstelėms atskirti, bus siekiama palyginti IVT reakcijos ir PGR būdu paruoštų bibliotekų sekoskaitos efektyvumą tyrinėjant imortalizuotas žmogaus ląstelių linijas.

1 pav. pateikti duomenys padeda geriau suprasti atskirų sekoskaitos bibliotekų kompleksiskumą, vaizduojant kiek unikalių molekulių galima sugauti sekvenuojant šias analizuojamas bibliotekas. Atliekant regresinę analizę galima kiekybiškai įvertinti šių bibliotekų kokybę. Smart-seq2 metodu paruoštos bibliotekos kreivės (slope) laipsnis yra lygus 0.95, tuo tarpu CEL-seq kreivės laipsnis lygus 0.67. Kuo kreivės laipsnis yra artimesnis vienetui, tuo bibliotekos kompleksiskumas yra geresnis, kitaip tariant, Smart-seq2 bibliotekos kompleksiskumas yra 28 % aukštesnis, todėl atliekant sekoskaitą tam pačiam kiekiui sekų abejais metodais, su Smart-seq2 metodu bus sugaunama 28 % daugiau unikalių sekų.

**2 pav.**

*Pavienių ląstelių vizualizavimas naudojant SPRING įrankį. Įrankio pagalba sekoskaitos duomenys gauti iš pavienių ląstelių sekoskaitos gali būti vizualizuojami pagal ląstelių genų raiškos panašumus ir skirtumus. Šiuo būdu ląstelės pagal panašumus grupuojasi į dvi atskiras sankaupas.*



2 pav. matomi SPRING įrankio grafikai leidžia teigti, kad abi sekoskaitos bibliotekos leidžia atskirti dviejų skirtingų ląstelių linijų sankaupas vieną nuo kitos. Šios praktikos metu buvo tirta K562 ir SW-620 ląstelių linijos, kurių atsiskyrusios sankaupos yra matomos 2 pav. Tokiu būdu patvirtinama, kad abi bibliotekos yra tinkamos skirtingų ląstelių tipų klasterizavimui.

---

## Literatūra

- [1] A. Mortazavi, B. A. Williams, K. McCue, L. Schaeffer, and B. Wold, "Mapping and quantifying mammalian transcriptomes by RNA-Seq," *Nat. Methods*, vol. 5, no. 7, pp. 621–628, Jul. 2008, doi: 10.1038/nmeth.1226.
- [2] F. Tang *et al.*, "mRNA-Seq whole-transcriptome analysis of a single cell," *Nat. Methods*, vol. 6, no. 5, pp. 377–382, May 2009, doi: 10.1038/nmeth.1315.
- [3] A. A. Kolodziejczyk, J. K. Kim, V. Svensson, J. C. Marioni, and S. A. Teichmann, "The Technology and Biology of Single-Cell RNA Sequencing," *Mol. Cell*, vol. 58, no. 4, pp. 610–620, May 2015, doi: 10.1016/j.molcel.2015.04.005.
- [4] A. M. Klein *et al.*, "Droplet barcoding for single-cell transcriptomics applied to embryonic stem cells," *Cell*, vol. 161, no. 5, pp. 1187–1201, May 2015, doi: 10.1016/j.cell.2015.04.044.
- [5] T. Hashimshony, F. Wagner, N. Sher, and I. Yanai, "CEL-Seq: Single-Cell RNA-Seq by Multiplexed Linear Amplification," *Cell Rep.*, vol. 2, no. 3, pp. 666–673, Sep. 2012, doi: 10.1016/j.celrep.2012.08.003.
- [6] S. Picelli, O. R. Faridani, Å. K. Björklund, G. Winberg, S. Sagasser, and R. Sandberg, "Full-length RNA-seq from single cells using Smart-seq2," *Nat. Protoc.*, vol. 9, no. 1, pp. 171–181, Jan. 2014, doi: 10.1038/nprot.2014.006.

I. Rokaitis,  
R. Meškys

Vilniaus universitetas

## HIPERMODIFIKUOTŲ OLIGONUKLEOTIDŲ SINTEZĖ DNR POLIMERAZIŲ PAGALBA

Sintetinės nukleorūgštys yra chemiškai modifikuoti natūralių nukleorūgščių analogai. Nors pirma jos pradėtos kurti, siekiant tirti nukleorūgštis, per paskutinius dešimtmečius jų įvairovė ir pritaikymo sritys gerokai išsiplėtė [1-3]. Modifikacijų pasirinkimas leidžia nukleorūgštims suteikti specifines savybes, nebūdingas natūraliems jų variantams. Pritaikant sintetines nukleorūgštis tikslinei užduočiai atskirai ar kartu gali būti modifikuojamos nukleobazės, ribofuranozės žiedas ir/ar fosfato grupė [4, 5]. Modifikacijų naudojimas gali reikšmingai pakeisti fizikines, biologines ir geometrinės nukleorūgščių savybes, be to, padidinta cheminė įvairovė gali suteikti papildomų funkcijų ir sąveikų. Padidintas modifikuotų nukleorūgščių kompleksiskumas ir stabilumas panaudojamas, kuriant vaistus, aptamerus, biosensorius, nanostruktūras ir kataliziškai aktyvius nukleorūgštis.

Pastoviai didėjantis modifikuotų nukleorūgščių panaudojimo spektras lemia ir augančią jų paklausą, todėl atliekant jų sintezę svarbu užtikrinti aukštą kokybę, didelę sintezės išėigą ir platų modifikacijų pasirinkimą. Cheminei sintezei nepilnai pateisinus šių lūkesčių bei ieškant naujų būdų vis daugiau dėmesio skiriama fermentinei nukleorūgščių sintezei. Platesnis biokatalizinių metodų taikymas, deja, ribojamas fermentų, šiuo atveju polimerazių, mechanizmų, kurie užtikrina didelį jų tikslumą: tiksliai ir efektyviai įjungiami natūralių nukleorūgščių monomerai, tačiau apribotas modifikuotų nukleotidų panaudojimas.

**Projekto tikslas** – fermentiniais metodais susintetinti hipermodifikuotus (t.y. savo sudėtyje turinčius daugiau negu trijų tipų skirtingas modifikuotas bazes) oligonukleotidus ir tirti jų savybes. Hipermodifikuotų oligonukleotidų sintezei pasirinkta dviejų atskirų reakcijų strategija: naudojant modifikuotus nukleotidus (2-tio-dTTP, 4-tio-dTTP, 5-(3-aminoalil)-dUTP; 5-etinil-dUTP, 5-(okta-1,7-diinil)-dUTP, 7-etinil-7-deaza-dATP, 6-tio-dGTP, 2-tio-dCTP, 5-(okta-1,7-diinil)-dCTP; 5-metil-dCTP, 5-hidroksimetil-dCTP, N4-acetil-dCTP, N4-heksanoil-dCTP, N4-nikotinoil-dCTP, N4-(4-acetil-benzoil)-dCTP, N4-(4-benzoil-benzoil)-dCTP) prailginamas su matrica suldytas pradmuo, o atskiros reakcijos metu lambda egzonuskleazės pagalba atrankiai pašalinama matrica.

Buvo įvertintas phi29 DNR polimerazės gebėjimas polimerizacijos metu įjungti modifikuotus nukleotidus. Šiam tikslui naudotas 5'-33P žymėtas pradmuo ir nukleotidui specifinės matricos. Dėl phi29 DNR polimerazės 3'-5' egzonuskleazinio aktyvumo tarp 4 paskutinių pradmens nukleotidų fosfodiesterinė jungtis buvo pakeista

egzonukleazei atsparia fosforotioato jungtimi. Kiekvienoje matricoje vienas po kito eina bent keturi vienodi nukleotidai, todėl pilno prailginimo atveju nukleotidas turi būti įjungiamas ir įjungimo atveju modifikacija neturi trukdyti įjungti tolimesnį nukleotidą.

Iš minėtų išbandytų modifikuotų nukleotidų phi29 DNR polimerazė efektyviai neįjungė 2-tio-dCTP ir 4-tio-dTTP nukleotidų. Tikėtina, kad 4-tio-dTTP modifikacija, T:A sudaromų ryšių kontekste, destabilizuoja šią bazių porą, nes susidaro nepalanki erdvinė sąveika tarp 4-tio modifikacijos ir adenino amino grupės. Be to 4-tio-dTTP gali stabiliai egzistuoti enetiolinėje tautomerinėje formoje, kuri trukdo susidaryti T:A bazių porai. Kaip ir 4-tio-dTTP taip ir 2-tio-dCTP atveju polimerazė nesugeba panaudoti nukleotido pradmens prailginimui. Tikėtina, kad tai lemia pakitęs vandenilinis ryšys.

Nuo matricos nepriklausomos modifikuotos DNR sintezės metu buvo remiamasi terminalinės deoksinukleotidil transferazės (TdT) aktyvumu prijungti įvairius nukleotidus prie oligonukleotido 3'-galo. Paaiškėjo, kad TdT gebėjo naudoti visus naudotus modifikuotus nukleotidus, tačiau TdT buvo ne itin aktyvi, naudojant stipriai modifikuotus oligonukleotidus. Norint įvertinti, kurie oligonukleotidai yra geresni substratai TdT polimerazei, bandymus reikėtų tęsti. Reaktyvias grupes turintys oligonukleotidai yra tinkami tiesioginiam kovalentiniam sujungimui su įvairiais substratais. Kovalentinių kompleksų sudarymas gali būti vykdomas naudojant DNR, turinčią 4-tiouridino atitikmenį arba acetilbenzoil/benzoilbenzoil modifikuotus dCAcITP. Šiuo atveju, kryžminis sujungimas yra įmanomas dėl minėtų modifikacijų fotoaktyvavimo apšviečiant UVA (365 nm) šviesa. Taip modifikuoti oligonukleotidai buvo imobilizuojami ant polistireno ir polipropileno, tačiau imobilizacijos efektyvumas buvo menkas, tai sietina su nedideliu fotoaktyvių grupių skaičiumi modifikuotuose oligonukleotiduose.

---

### Literatūra

- [1] Shivalingam, A., Brown, T., *Biochemical Society Transactions*, 2016, 44, 709–715.
- [2] Kuwahara, M., Hasegawa, M., Tamura, T., Sawai, H., *Nucleic Acids Research*, 2006, 34, 5383–5394.
- [3] Gremlich, P., Wirges, C., Carell, T., *Organic Letters*, 2008, 10, 2, 249–251.
- [4] Linck, L., Bier, F., Genger, U., *Analytical Methods*, 2012, , 4, 1215–1220.
- [5] Zhu, G., Hu, R., Zhao Z., Chen, Z., Zhang X., *Journal of the American Chemical Society*, 135(44), 16438–16445.

**G. Skliutė,  
R. Navakauskienė**

*Vilniaus universitetas,  
Gyvybės mokslų centras,  
Biochemijos institutas,  
Ląstelės molekulinės biologijos skyrius*

## **ŽMOGAUS KAMIENINIŲ LĄSTELIŲ IŠ ALTERNATYVIŲ ŠALTINIŲ CHARAKTERIZAVIMAS**

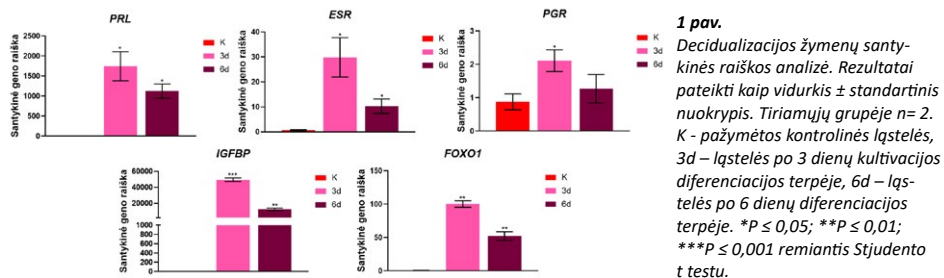
Žmogaus kamieninės ląstelės gali būti skirstomos į embrionines, perinatalines ir suaugusio organizmo audinių. Embrioninės kamieninės ląstelės, nors ir turi didžiausią diferenciacijos potencialą, kelia daug etinių problemų [1], todėl visame pasaulyje plačiai tyrinėjamos suaugusio žmogaus audinių kamieninės ląstelės. Vienos labiausiai ištirtų ir naudojamų medicinoje – kaulų čiulpų bei riebalinio audinio mezenchiminės kamieninės ląstelės. Jos laikomos multipotentinėmis, t.y. gali diferencijuoti į mezoderminius audinius – kremzlinį, kaulinį, riebalinį bei raumeninį [2] ir yra naudojamos tokių ligų kaip artrito, GvHD (transplantato prieš šeimininką liga, *angl., graft versus host disease*), diabeto, išsėtinės sklerozės gydyme bei organų, pvz. širdies, kepenų funkcijų atstatyme [3]. Tačiau naudojant šias kamienines ląsteles iškyla keletas problemų: 1) mezenchiminių kamieninių ląstelių, kurios yra ne hematopoetinės kilmės, kaulų čiulpuose aptinkama labai mažai (0,01 – 0,001 %) [4], tad norint gauti klinikoje reikalingus ląstelių kiekius, jas reikia padauginti laboratorijoje, o ilgo kultivavimo metu ląstelės pradeda senti, trumpėja telomeros, mažėja jų diferenciacijos potencialas ir kamieniškuo charakteristikos [5,6,7]; 2) riebalinio audinio kamieninių ląstelių savybės (augimo kinetika, morfologija, diferenciacijos potencialas, senėjimas) labai priklauso nuo donoro, iš kurio jos paimtos, amžiaus, taip pat dauginant šias ląsteles prastėja jų regeneracinės savybės [8].

Pastaraisiais metais didelis dėmesys skiriamas dar pakankamai naujam kamieninių ląstelių šaltiniui – menstruaciniam kraujui, kurio gavimas nereikalauja jokių specifinių procedūrų, yra paprastas, pigus ir nekelia etinių problemų [9]. Menstruacijų kraujyje aptinkamos kamieninės ląstelės, kilusios atsiluoksnuojant ir atsinaujinant gimdos sienelėi, jos pasižymi dideliu dalijimosi ir proliferacijos dažniu, dauginant išlaiko stabilų kariotipą, yra neimunogeniškos bei neformuoja teratomų [10]. Visos šios savybės sudaro puikų pagrindą potencialiam jų terapiniam panaudojimui įvairių ligų gydymui ar transplantacijai. Tokios ląstelės yra patrauklios, nes jų paėmimas yra neinvazinis ir nesukelia skausmo, gali būti paimtas pakartotinai esant poreikiui, todėl tai turėtų tapti puikia alternatyva žmogaus kamieninių ląstelių šaltiniui. Tačiau prieš naudojant šias kamienines ląsteles klinikuose tyrimuose ar ląstelių terapijoje, reikia daugiau tyrimų siekiant jas visapusiškai charakterizuoti *in vitro*.

Šio projekto metu vykdėme tyrimus charakterizuojant kamienines ląsteles, išskirtas iš menstruacinio kraujo. Pasielkiant tėkmės citometrijos analizę tyrėme būdingus ląstelių paviršiaus žymenis. Taip pat tyrėme menstruacinio kraujo

mezenchiminių kamieninių ląstelių kamieniškumą, atlikome ląstelių proliferacijos, apoptozės ir senėjimo vertinimą, ląstelių diferenciacijos nustatymą miogenine bei chondrogenine kryptimis pagal specifinius morfologinius požymius bei genų raišką. Atlikome menstruacinio kraujo mezenchiminių kamieninių ląstelių diferenciacijos į epitelio ląsteles tyrimą, analizavome diferenciacijos indukciją naudojant 8-brom-cAMP ir MPA agentus, diferenciaciją vertinome pagal morfologinius pokyčius bei specifinius genus-žymenis ir baltymų, charakteringų diferencijuotoms ląstelėms analizę.

Tyrimo metu kamieninių ląstelių proliferacija ir dvigubėjimo laikas buvo vertinami tripano mėlio testu, apoptozė – akridino oranžo ir etidžio bromido testu, senėjimas buvo vertinamas  $\beta$ -galaktozidazės testu. Ląstelių diferenciacija buvo vertinama morfologine analize ir pagal specifinius žymenis. Paviršiaus žymenų raiška nustatyta tėkmės citometrijos metodu, genų raiška įvertinta AT-kPGR metodu, o baltymų analizė atlikta Western blot ir fluorescencinės analizės metodais. Ištyrus 2 sveikų donorių menstruacines kamienines ląsteles nustatėme, kad sveikų donorių menstruaciniame kraujyje aptinkamos ląstelės pasižymi CD44, CD166, CD16, CD15, BMSC, CD56, CD13 ir HLA-ABC paviršiaus žymenų raiška. Po 6 dienų kultivacijos auginimo terpėje, sveikų donorių menstruacinės kilmės kamieninių ląstelių kiekis padidėja nuo  $0,5 \times 10^6$  iki  $2,5\text{--}3 \times 10^6$ , o dvigubėjimo laikas vidutiniškai yra apie 3,4 dienos. Ląstelės geba diferencijuoti chondrogenine ir miogenine kryptimis. Indukavus diferenciaciją naudojant 8-brom-cAMP ir MPA agentus, nustatyta, kad sveikų donorių menstruacinės kamieninės ląstelės geba decidualizuotis, tai patvirtino morfologiniai stebėjimai (ląstelių forma per 6 kultivacijos dienas pakinta iš verpstės formos į ovalias), genų raiškos pokyčiai: nustatyta padidėjusi decidualizacijos žymenų hormono prolaktino (PRL), progesterono receptoriaus geno (PGR), estrogeno receptoriaus (ESR), IGFBP, FOXO1 (žr. 1 pav.) ir kitų decidualizacijai svarbių genų raiška, atitinkamai pakito ir decidualizacijai svarbių baltymų raiška. Tiriant apoptozės ir senėjimo procesus decidualizacijos metu reikšmingų pokyčių sveikų donorių menstruacinėse kamieninėse ląstelėse nenustatyta.



Apibendrinant gautus rezultatus galime teigti, kad iš menstruacinio kraujo išskirtos kamieninės ląstelės efektyviai proliferuoja ir geba diferencijuotis bent 3 kryptimis: chondrogenine, miogenine ir epiteline. Nepaisant nedidelės tiriamųjų imties nustatėme, kad iš menstruacinio kraujo išskirtos mezenchiminės kamieninės ląstelės galėtų būti naujas potencialus ląstelių šaltinis terapijos ir gydymo tikslams, tačiau to patvirtinimui būtini tolesni tyrimai.

---

## Literatūra

- [1] Antonucci, I. et al. *International Journal of Molecular Sciences*, 2016, 17, 607.
- [2] Oreffo, R. O. C et al. *Stem Cell Reviews and Reports*, 2005, 1, 169–178.
- [3] Gao, L. et al. *Journal of Clinical Oncology*, 2016, 34, 2843–2850.
- [4] Wexler, S. A. et al. *British Journal of Haematology*, 2003, 121, 368–374.
- [5] Bonab, M. M. et al. *BMC Cell Biology*, 2006, 7, 14.
- [6] Wagner, W. et al. *PLoS ONE*, 2008, 3, e2213.
- [7] Alessio, N. et al. *Oncotarget*, 2018, 9, 19328–19341.
- [8] Kornicka, K. et al. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, 2015, 309169.
- [9] Lv, H. et al. *Stem Cell Research & Therapy*, 2018, 9, 325.
- [10] Rossignoli, F. et al. *BioMed Research International*, 2013, e901821.

**R. Statkevičiūtė<sup>1</sup>,  
R. Rutkienė<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas

<sup>2</sup> Vilniaus universiteto  
Biochemijos institutas

## **BIOLOGIŠKAI AKTYVIUS INDOLO DARINIUS ATAKUOJANČIŲ FERMENTŲ TYRIMAS**

Indolas yra azoto atomą turintis heterociklinis aromatinis junginys, sudarytas iš benzeno žiedo bei penkianario pirolo žiedo. Jis plačiai paplitęs augalų ir bakterijų užimamose nišose: dirvoje, vandens telkiniuose, gyvūnų virškinamajame trakte. Dabar jau žinoma, jog indolas, ilgai laikytas teršalu bei bakterinio užterštumo žymeniu, organizmuose veikia kaip svarbi signalinė molekulė, daranti įtaką ne tik prokariotų, bet ir eukariotų fiziologiniams procesams [1]. Kai kurios bakterijos naudoja indolą ne tik kaip bakterijų tankio (angl. *quorum sensing*) jutimo signalą, bet ir kaip priemonę slopinant bakterijų-konkurenčių daugumos pojūtį bei stabdant šių bakterijų gyvybines funkcijas [2]. Negana to, keliamos hipotezės, jog indolui jautrios bakterijos geba ne tik oksiduoti šį junginį iki nekenksmingų darinių, bet ir panaudoti indolą kaip anglies ir energijos šaltinį [3].

Tarp aromatinių heterociklinių junginių ypatingą biologinę reikšmę turi trečioje padėtyje pakaitą turintys indolo dariniai. Indolil-3-acto rūgštis (IAA) yra svarbus augalų augimą skatinantis hormonas auksinas, o indolil-3-butano rūgštis (IBA) taip pat yra augalų hormonas auksinas, skatinantis šaknų formavimąsi. Indolil-3-propioninė rūgštis (IPA), sintetinama simbiotinių žarnyno bakterijų, aktyviai dalyvauja tam tikruose biologiniuose procesuose: skatina IL-10 (priešuždegiminio citokino) sekreciją ir slopina TNF- $\alpha$  (prouždegiminio citokino) gamybą, apsaugo peles nuo dekstrano sulfato sukkelto opinio kolito ir pagerina žarnyno sienelės gebėjimą atrankiai įsiurbti ir taip nukenksminti įvairias toksiškas medžiagas, be to, mažina II tipo diabeto riziką [4]. Patekusi į smegenis, IPA ir čia pasižymi apsauginėmis funkcijomis: mažina oksidacinį stresą, slopina beta-amiloidinių fibrilių formavimąsi bei apsaugo neuronus nuo lėtinės smegenų išemijos [5]. Taip pat, jau yra duomenų, jog IPA pasižymi prieštuberkulioziniu aktyvumu *in vitro* bei slopina *Mycobacterium tuberculosis* sukeltą infekciją *in vivo* [6].

Dėl indolo ir kitų jo bioaktyvių darinių paplitimo įvairiose nišose organizmai evoliucijos eigoje išvystė kelius, padedančius prisitaikyti prie aplinkos sąlygų ar panaudoti indolo heterociklinę molekulę kaip energijos šaltinį. Žinoma, jog indolo oksidaciją aerobinėmis sąlygomis gali vykdyti fermentai oksigenazės. Ankstesnių darbų metu buvo sukaupta flavininių monoooksigenazių kolekcija, kurių dalis dalyvauja indolo arba indolil-3-acto rūgšties skaidyme bakterijose, tačiau gebėjimas atakuoti kitus trečioje padėtyje pakeistus indolo darinius iki šiol nebuvo žinomas. Taip pat parodyta, jog indolo molekulės skaidymas gali vykti ir anaerobinėje aplinkoje, tad siekiant



padidinti indolą atakuojančių baltyminių katalizatorių įvairovę, yra ieškoma nuo deugonies nepriklausančių fermentų. Perspektyvus tokių fermentų šaltinis - *Thauera aromatica* K172 kamieno bakterijos, anaerobiškai skaidančios indolą, tačiau šiame procese dalyvaujantys baltymai iki šiol nėra identifikuoti. Taigi, šio tyrimo tikslas buvo nustatyti oksidoreduktazių lacA ir lacE substratinį savitumą su indolu ir jo dariniais (indolil-3-acto rūgštimi, indolil-3-propionine rūgštimi ir indolil-3-butano rūgštimi) bei nustatyti, ar nuo molibdeno kofaktoriaus priklausančios oksidoreduktazės iš *Thauera aromatica* geba konvertuoti indolą.

Siekiant išsiaiškinti indolil-3-acto rūgšties skaidyme dalyvaujančių fermentų substratinį savitumą, buvo sėkmingai atlikta nuo flavino priklausomos oksigenazės lacA ir trumpų grandinių reduktazės lacE heterologinė biosintezė *Escherichia coli* ląstelėse. Išgrynintas lacA fermentas buvo aktyvus, tačiau lacE – ne. Nepaisant to, lacE fermentas buvo aktyvus *E. coli* ląstelėse, todėl substratinio savitumo tikrinimui buvo pasirinkta biokonversijos sistema su intaktinėmis ląstelėmis, turinčiomis lacA ir lacE baltymus. Nustatyta, jog lacA oksiduoja indolil-3-acto rūgštį iki 2-oksindolo-3-acto rūgšties (Ox-IAA), o lacE pastarąjį junginį toliau paverčia 3-hidroksi-2-oksindolo-3-acto rūgštimi (DOAA). Taip pat buvo parodyta, jog lacA konvertuoja IPA iki 2-oksindolo-3-propano rūgšties ir IBA iki 2-oksindolo-3-butano rūgšties, o lacE pastarusius junginius geba paversti atitinkamai 3-hidroksi-2-oksindolo-3-propano rūgštimi ir 3-hidroksi-2-oksindolo-3-butano rūgštimi.

Anaerobinio indolo skaidymo tyrimai buvo atliekami vykdant heterologinę nuo molibdeno kofaktoriaus priklausančių oksidoreduktazių sintezę. Taikant PGR metodą, buvo pagausinti trys *T. aromatica* genome koduojamų fermentų genai ir įklonuoti į raiškos vektorius. Atlikus šių tikslinių oksidoreduktazių biosintezės optimizaciją *E. coli* bakterijose, tirpjoje baltymų frakcijoje buvo aptinkami labai maži fermentų kiekiai. Biokonversijos reakcijos vykdytos naudojant intaktines ląsteles, sintetinančias tikslinius fermentus, tačiau, remiantis masių spektrometrijos rezultatais, indolo suvartojimas nebuvo nustatytas. Darome prielaidą, jog tokie duomenys buvo gauti dėl per mažo tirpių oksidoreduktazių kiekio ląstelėse.

---

## Literatūra

- [1] Lee, J. H., Wood, T. K., Lee, J. *Trends in Microbiology*, 2015, 23, 707–718.
- [2] Kim, J., Park, W. J. *Microbiol.*, 2015, 53, 421–428.
- [3] Sadauskas, M., Vaitėkūnas, J., Gasparavičiūtė, R., Meškys, R. *Appl. Environ. Microbiol.*, 2017, AEM.01453-17.
- [4] de Mello, V. D., Paananen, J., Lindström, J., Lankinen, M. A., Shi, L., Kuusisto, J., Pihlajamäki, J., Auriola, S., Lehtonen, M., Rolandsson, O. *Sci Rep*, 2017, 7, 46337.
- [5] Hwang, I.K., Yoo, K. Y., Li, H., Park, O.K., Lee, C.H., Choi, J.H., Jeong, Y. G., Lee, Y. L., Kim, Y. M., Kwon, Y. G. *J. Neurosci. Res.*, 2009, 87, 2126–2137.
- [6] Negatu, D. A., Liu, J. J. J., Zimmerman, M., Kaya, F., Dartois, V., Aldrich, C. C., Gengenbacher, M., Dick, T. *Antimicrob. Agents Chemother.*, 2018, 62.

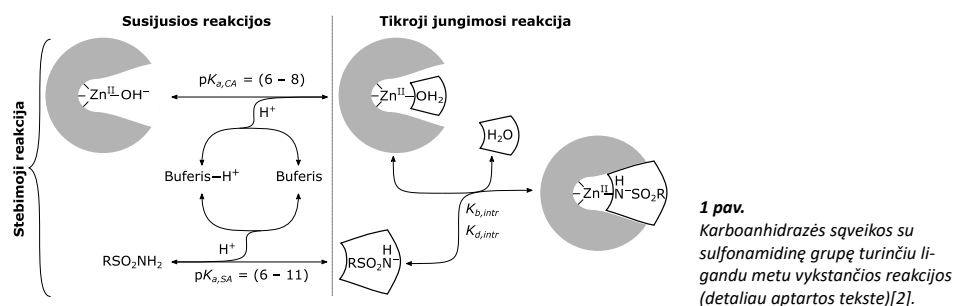
L. Škiudaitė,  
L. Baranauskienė

Vilniaus universitetas

## SULFONAMIDINIŲ DIURETIKŲ SĄVEIKOS SU ŽMOGAUS KARBOANHIDRAZĖMIS TIKRINIŲ PARAMETRŲ NUSTATYMAS

Žmogaus karboanhidrazės – 12-os kataliziškai aktyvių, struktūriškai itin panašių baltymų šeima, dalyvaujanti esminiuose fiziologiniuose procesuose – kvėpavime, pH palaikyme, skysčių sekrecijoje ir kt. Dalies šios šeimos narių aktyvumo slopinimas taikomas tam tikroms ligoms gydyti ar kontroliuoti.

Yra nustatyta, kad žmogaus karboanhidrazėms sąveikaujant su mažamolekuliais junginiais, turinčiais nepakeistą sulfonamido grupę, tiesioginė jungimosi reakcija vyksta tarp junginio, kurio sulfonamido grupė yra deprotonizuota, ir karboanhidrazės, kai jos aktyviajame centre prie cinko jono yra koordinuotas ne hidroksido jonas, o vandens molekulė [1]. Tad greta tiesioginės jungimosi reakcijos, vyksta dar trys susijusios reakcijos: 1) junginio sulfonamidinės grupės deprotonizacija; 2) su baltymo aktyviajame centre esančiu cinko jonu koordinuoto hidroksido jono protonizacija, ir 3) kompensuojanti buferio (de)protonizacija (pav. 1)[2].



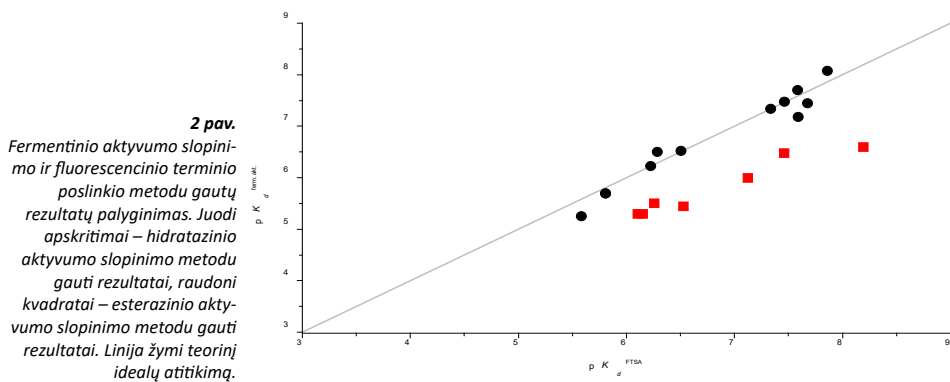
Stebimieji sąveikos parametrai labai priklauso nuo naudojamos buferinės medžiagos prigimties ir mėginio pH. Visi eksperimentiniai sąveikų tyrimo metodai leidžia nustatyti tik stebimuosius parametrus, kurie atspindi suminį visų keturių kartu vykstančių susijusių reakcijų energetinį efektą. Stebimieji jungimosi parametrai yra labai svarbūs atliekant naujų junginių vertinimą ar tiriant esamus vaistus, visgi norint sąveikos energetinius parametrus sieti su struktūromis ir naudoti gautą informaciją naujų tam tikrai izoformai atrankių junginių kūrimui, tam prasminga naudoti tik

tikrinis, t.y. nuo reakcijos sąlygų nepriklausančius parametrus.

Šiame darbe tęsiami vasaros praktikos metu pradėti sulfonamidinę grupę turinčių diuretikų sąveikos su žmogaus karboanhidrazėmis tyrimai. Pirminė sulfonamido grupė laikoma optimaliu karboanhidrazių aktyvumą slopinančių junginių komponentu, nes struktūriškai imituoja aktyvios fermento formos (su vandens molekule prie cinko jono) sąveiką su substratu (anglies dioksido molekule). Daugelis dabar vartojamų diuretikų pradėti vartoti labai seniai, dar iki atrandant daugumą iš dvylikos dabar žinomų aktyvių žmogaus karboanhidrazių izoformų, todėl informacijos apie tokių vaistų įtaką aptariamiesiems baltymams literatūroje trūksta.

Šio darbo užduotis – nustatyti tikrinius jungimosi parametrus sąveikaujant visoms žmogaus karboanhidrazių izoformoms su pirminę sulfonamido grupę turinčiais diuretikais bei palyginti stebimuosius jungimosi ir fermentinio aktyvumo slopinimo parametrus. Darbe buvo tiriama dvidešimt junginių: devyniolika nepakeistą sulfonamido grupę turinčių vaistų ir kontrolinis junginys 2-chlorobenzensulfonamidas.

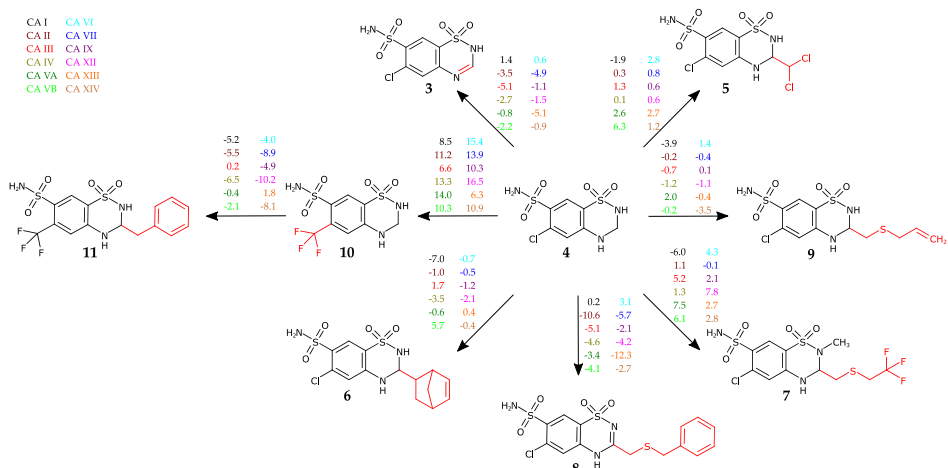
Darbe buvo taikyti du karboanhidrazių fermentinio aktyvumo matavimo metodai: CO<sub>2</sub> hidratazinis, kai reakcijos eiga stebima pagal pH indikatoriaus fenolio raudonojo spalvos pokytį, ir esterazinis – kai matuojamas spalvoto produkto susidarymas vykstant p-nitrofenilacetato hidrolizei. Abiem fermentinio aktyvumo matavimo metodais gauti rezultatai palyginti su vasaros praktikos metu gautais rezultatais fluorescencinio terminio poslinkio metodu (pav. 2).



Hidratazinio aktyvumo slopinimo metodu gauti rezultatai (juodi simboliai pav. 2) gerai koreliavo su fluorescencinio terminio poslinkio metodu gautais rezultatais, tuo tarpu esterazinio aktyvumo slopinimo rezultatus žymintys raudoni simboliai buvo toliau nutolę nuo idealų atitikimą rodančios tiesės, nors tendencija tarp skirtingų junginių išliko panaši. Tai gali lemti kelios priežastys – pavyzdžiui, tai, kad šiame metode naudojama daug didesnė fermento koncentracija, kas apriboja metodo jautrumą stipriai besijungiančių junginių tyrimui. Gali įtakos absoliučių verčių nustatymui turėti ir konkuruojanti tirpale ištirpusio CO<sub>2</sub> hidratacija.

Tirtų junginių sulfonamidinės grupės  $pK_o$  vertės buvo apskaičiuotos teoriškai naudojant ChemAxon grupės programą MarvinSketch (19.4.0) ir išmatuotos eksperimentiškai pagal Snyder et al. aprašytą metodiką [3], t. y. užrašant tos pačios koncentracijos junginio absorbcijos spektrus universaliame (t.y. daugiakomponentčiame, kai visose pH vertėse yra visi tie patys komponentai) buferiniame tirpale skirtingo pH tirpaluose.

Tikrinių sąveikos parametru skaičiavimams buvo naudojami vasaros praktikos metu išmatuoti stebimieji termodinaminiai parametrai, anksčiau laboratorijoje nustatytos visų karboanhidrazij izoformų prie cinko jono koordinuojamos vandens molekulės  $pK_a$  vertės, ir šiame darbe nustatytos visų junginių sulfonamidinės grupės  $pK_a$  vertės. Suskaičiuoti tikriniai parametrai 12-os baltymų sąveikai su 20 junginių. Struktūriškai panašių junginių sąveiką su visomis žmogaus karboanhidrazėmis palyginome skaičiuodami tikrinių Gibso energijų pokyčių skirtumus ( $\Delta\Delta G$ , kJ/mol). Pav. 3 pateiktas darbe gautų rezultatų pavyzdys. Skirtingų spalvų skaičiai prie rodyklių žymi dvylikos skirtingų izoformų parametrus. Raudonai formulėse paryškinti pagrindiniai struktūriniai skirtumai.



### 3 pav.

Tikrinių Gibso energijos pokyčių skirtumų ( $\Delta\Delta G$ , kJ/mol) palyginimas (tiazidų klasės junginiai).

Apskaičiuotos tikrinės Gibso energijos pokyčio vertės buvo didesnės negu stebimosios, jų skirtumai parodė kurių grupių pakeitimai buvo naudingesni atitinkamoms izoformoms.

### Literatūra

- [1] Krishnamurthy V.M., Kaufman G.K., Urbach A.R., Gitlin I., Gudiksen L., Weibel D.B., Whitesides G.M. *Chem. Rev.* (2008), 108: 946–1051.
- [2] Linkuvienė V., Zubrienė A., Manakova E., Petrauskas V., Baranauskienė L., Zakšauskas A., Smirnov A., Gražulis S., Ladbury J.E., Matulis D. Q. *Rev. Biophys.* (2018), 51
- [3] Snyder P.W., Mecinovic J., Moustakas D.T., Thomas III S.W., Harder M., Mack E.T., Lockett M.R., Heroux A., Sherman W., Whitesides G.M. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* (2011), 108: 17889–17894.

**D. Vaitkus,  
J. Stankevičiūtė**

*Vilniaus universitetas,  
Gyvybės mokslų centras*

## TIRPIOS GELEŽIES MONOOKSIGENAZĖS PML PAGRINDU SUKURTŲ MUTANTINIŲ IR HIBRIDINIŲ FERMENTŲ TYRIMAS

Dėl paskutiniaus dešimtmečiais stipriai išaugusių globalinio atšilimo bei natūralių nišų ir gyvųjų organizmų rūšių nykimo problemų, didžiosios pasaulio valstybės kasmet skiria vis daugiau lėšų ir dėmesio aplinkai nekenksmingų pramonės inovacijų kūrimui ir diegimui. Šiais žingsniais seka ir šiuolaikinė chemijos ir maisto pramonė, ieškanti „žalių“ alternatyvų dabartiniams cheminės sintezės metodams, kurie generuoja milžiniškus toksiškų atliekų kiekius. Biokatalizė, kaip alternatyva, atitinka visus aplinkosaugos standartus, tačiau jos progresą stabdo nepakankamas fermentų efektyvumas, didelė kaina ir nestabilumas. Kita vertus, dabartinė molekulinės biologijos ir bioinformatikos mokslų pažanga vis dažniau leidžia spręsti šias problemas taikant baltymų inžinerijos metodus [1].

Aromatiniai *N*-oksidai yra paklausios medžiagų grupė, plačiai taikoma medicinoje, žemės ūkyje, dažų ir sprogmenų gamyboje [2], tačiau įprastai šių medžiagų sintezė atliekama cheminiais metodais, naudojant kenksmingus tirpiklius ir pavojingus, stiprius oksidatorius [3]. Mokslinėje literatūroje tik retkarčiais atsiranda biokatalizinių metodų, skirtų tokių junginių gamybai [4, 5, 6] ir iki šiol nėra aprašyta atvejų, kuomet kryptinga evoliucija būtų pritaikyta aromatinis *N*-oksidus sintetinančių fermentų tobulinimui. *Escherichia coli* ląstelės gaminančios PML monooksigenazę yra naujas, išskirtinai biokatalizinis metodas aromatinis *N*-oksidų sintezei, pasižymintis dideliu substratų spektru, geru našumu ir aukštu oksidacijos specifiskumu.

PML monooksigenazės pagrindu kuriami mutantai ir hibridiniai fermentai labiausiai domina dėl jų panaudojimo sintetinti aromatinis *N*-oksidus, kurie turėtų pritaikymo perspektyvą. Tokie nauji mutantiniai ir (arba) hibridiniai biokatalizatoriai būtų svarbūs biotechnologiniui požiūriui, kadangi pasiūlytų unikalių reakcijos produktų. Jie galėtų būti pritaikyti gaminant svarbius *N*-heteroaromatinis junginius, kuriuos būtų sunku gauti įprastais cheminiais metodais.

Iš daugybinio sekų palyginio su homologiškomis ir gerai charakterizuotomis monooksigenazėmis bei trimačio struktūrinio modelio mutagenezei nustatytos 6 PML katalizinio subvieneto aminorūgščių pozicijos (I106, G109, A113, F181, F200, F209). Mutagenezės vykdytos sulietinės PGR metodu, sukurtos dvi įsotinosios trigubų mutantų bibliotekos (I106/G109/A113 SM bei F181/F200/F209 SM). Iš pirmosios bibliotekos atrinkti du nauji mutantai, gebantys oksiduoti indolą iki spalvotų pigmentų ir sintetinti chinoksalin-1,4-dioksidą (I106N/A113G ir I106V/G109S/A113G), su jais atlikta daugiau biokonversijų. Gauti rezultatai parodė, kad šių mutantų katalizinės

savybės pasikeitė penkių substratų atžvilgiu, lyginant su laukinio tipo PML monooksigenaze: pasikeitusi reakcijų išeiga su 2,3,5-trimetilpirazinu, chinoksalinu ir pirazinu patvirtina, kad egzistuoja galimybė tobulinti oksidacijos našumą bei didinti substratų spektrą gerinant substrato prieinamumą prie aktyviojo centro; gebėjimas sintetinti 2,5-dimetilpirazin-1,4-dioksida ir chinoksalin-1,4-dioksida parodo, kad, keičiant aktyviojo centro aminorūgštis, galima praplėsti PML oksidacines galimybes; pakitusi oksiduojamo azoto pozicija reakcijoje su chinazolinu parodo, kad, pritaikant *in vitro* baltymų evoliuciją, galima visiškai pakeisti PML monooksigenazės *N*-oksidacijos regiospecifiškumą.

Daryti eksperimentai taip pat leidžia daryti prielaidą, kad substratų specifiškumui esminė yra A113 aminorūgštis. Lyginant biokonversijų rezultatus tarp A113G mutanto ir I106N/A113G bei I106V/G109S/A113G mutantų nebuvo pastebimi jokie katalizės parametrai, regiospecifiškumo ar substratų specifiškumo skirtumai. Tai parodo, kad A113G mutacija yra esminė ir fermento savybės nekito, nepaisant mutacijų kitose pozicijose.

F181/F200/F209 įsotinamojoje bibliotekoje nebuvo rastas nei vienas aktyvus mutantas. Tai leidžia manyti, jog šių aminorūgščių konservatyvumas yra svarbus bendrai fermento funkcijai ir struktūrai. Siekiant atrasti aktyvių mutantų šių pozicijų atžvilgiu, ateityje bus bandoma kurti mažesnes, labiau koncentruotas bibliotekas, kurios galėtų įvesti tik ribotą kiekį skirtingų aminorūgščių.

Pritaikius DNR maišymo metodą sukurtos ir padaugintos dvi hibridinių fermentų bibliotekos, naudojant PML bei kitų trijų homologiškų monooksigenazių katalizinių subvienetų genus. Pirminių tyrimų metu visi iš bibliotekų atrinkti variantai atitiko laukinio tipo genus, todėl tolesniuose tyrimuose bus bandoma atrasti aktyvių hibridų bei optimizuoti bibliotekų kūrimą.

---

### Literatūra:

- [1] Turner NJ, Kumar R. *Curr. Opin. Chem. Biol.* 2018, 43, A1–A3.
- [2] Mfuh AM, Larionov OV. *Curr. Med. Chem.* 2015, 22, 2819–57.
- [3] Rozen S. *Acc. Chem. Res.* 2014, 47, 2378–89.
- [4] Ullrich R, Dolge C, Kluge M, Hofrichter M. *FEBS Lett.* 2008, 582, 4100–6.
- [5] Mitsukura K, Hayashi M, Yoshida T, Nagasawa T. *J. Biosci. Bioeng.* 2013, 115, 651–3.
- [6] Zhao Y, Qian G, Ye Y, Wright S, Chen H, Shen Y, Liu F, Du L. *Org. Lett.* 2016, 18, 2495–8.

N. Barauskaitė,  
P. Ruzgys

Vytauto Didžiojo universitetas

## „BYSTANDER“ EFEKTO ĮTAKA LĄSTELIŲ GYVYBINGUMUI PO NEGRĮŽTAMOS ELEKTROPO- RACIJOS BEI PRIEŠVĒŽINIO VAISTO BLEOMICINO ELEKTROPERNAŠOS IN VITRO

Pasaulio sveikatos organizacijos 2018 metų duomenimis [1], vėžys yra 9,6 milijonų žmonių mirties priežastimi, tad intensyviai tiriama kontroliuojama vaistų ir genų pernaša į ląsteles bei audinius. Egzogeninių molekulių pernašai į ląstelę gali būti naudojami įvairūs fizikiniai metodai, kurie pasižymi efektyvesne didelių molekulių pernaša bei nesukelia tokio intensyvaus imuninio atsako, kaip virusiniai [2]. Vienas iš galimų lokalių priešvėžinės terapijos būdų, naudojant fizikinius vaistų pernašos metodus, yra elektrochemoterapija (ECT) [3]. ECT metu, vykstant elektroporacijai, ląstelių plazminė membrana tampa laikinai laidi įvairioms hidrofilinėms medžiagoms, tokioms, kaip priešvėžiniam vaistui bleomicinui (BLM), taip padidinant lokalių priešvėžinių vaistų poveikį. Membranos pralaidumo padidėjimą lemia elektrinių laukų sukeltas porų atsiradimas, kai indukuotas transmembraninis potencialas viršija kritinę ribą [4]. Į ląstelę patekęs BLM, susiformuoja aktyviosios deguonies formos (ROS). Patekęs į ląstelę BLM sukelia užprogramuotą (apoptotinę) ląstelės žūtį, taip sukeliama daug viengrandžių ir dvigrandžių genomines DNR trūkių, lemiančių nekrotinę arba apoptotinę ląstelės žūtį [5].

Vėžio gydyme naudojant jonizuojančiąją spinduliuotę, ląstelėse-taikiniuose taip pat susidaro ROS, kurios šiose ląstelėse suformuoja daug viengrandžių ir dvigrandžių genomines DNR trūkių, sukeliančių ląstelės žūtį. Yra žinoma, kad radiacija paveiktos ląstelės žūdamos į aplinką išskiria signalines molekules, kurios paveikia šalia esančias, tačiau tiesiogiai jonizuojančia spinduliuote nepaveiktas, ląsteles. Toks reikšmingas pavardintas „Bystander“ efektu [6].

Nors „Bystander“ efektas yra žinomas radioterapijoje, tačiau elektrochemoterapijoje jis yra beveik netyrinėtas – nėra atlikta duomenų, parodančių, kad elektrochemoterapijos metu galimas šis reikšmingas. Tad šio **tyrimo tikslas** – įvertinti „Bystander“ efekto įtaką ląstelių gyvybingumui po negrįžtamos elektroporacijos bei priešvėžinio vaisto bleomicino elektropernašos *in vitro*.

**Tyrimo metodika.** Tyrimai atliekami naudojant sukultūrintas kininio žiurkėnuko kiaušidžių CHO-K1 ląsteles. Šios ląstelės elektroporuojamos naudojant komerciškai prieinamą, mikrosekundinės trukmės ir aukštos amplitudės elektrinius impulsus generuojantį, BTX T-820 elektroporatorių. Priešvėžinio vaisto bleomicino (20nM) elektropernaša pasiekiami naudojant vieną 1400 V/cm amplitudės ir 100 μs trukmės elektrinį impulsą. Negrįžtama elektroporacija pasiekiami naudojant vieną 2800 V/cm amplitudės ir 100 μs trukmės elektrinį impulsą. „Bystander“ efektas sukuriamas tiek po bleomicino

elektropernašos, tiek po negrįžtamos elektroporacijos, ląsteles (2 mln/ml) inkubuojant 24 šulinėlių plokštelėje, 0,2 ml DMEM auginimo terpėje, 24 valandas (galutinė BLM koncentracija – 5nM). Po inkubacijos auginimo terpė surenkama iš 10 šulinėlių ir centrifuguojama 2 kartus. Galiausiai, ši auginimo terpė užpilama ant ląstelių, kurios prieš tai nebuvo niekuo paveiktos. Su šiomis ląstelėmis atliekamas kolonijų formavimo testas – tokios ląstelės auginamos lėkštelėse 6 dienas, 37 °C temperatūroje, o praėjus laikui, dažomos ir įvertinamas kolonijų dydis (mm) bei jų skaičius.

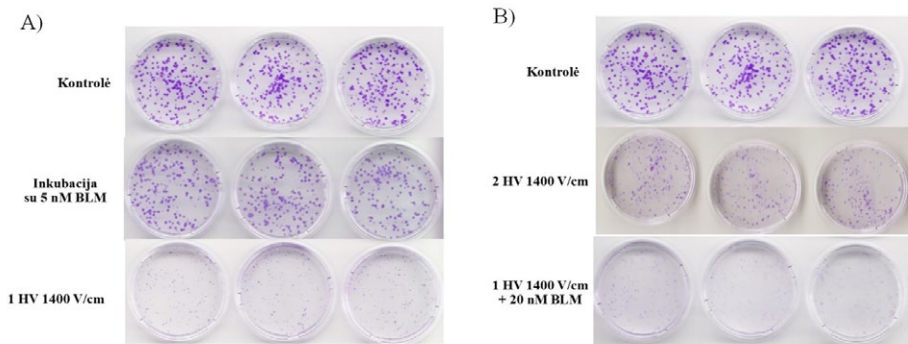
Norint įvertinti, ar BLM neturėjo įtakos neelektroporuotų ląstelių gyvybingumui, tokios ląstelės inkubuojamos 6 dienas su 5 nM BLM, o praėjus laikui įvertinamas ląstelių suformuotas kolonijų dydis bei jų skaičius.

Norint įvertinti, ar elektriniai impulsai neturėjo įtakos ląstelių gyvybingumui, kolonijų testas atliekamas su ląstelėmis, kurios elektroporuotos be bleomicino, naudojant vieną 1400 V/cm amplitudės ir 100 μs trukmės elektrinį impulsą.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** Tyrimo metu, naudojant ląstelių kolonijų formavimo testą, įvertinta „Bystander“ efekto įtaka ląstelių gyvybingumui po negrįžtamos elektroporacijos ir priešvėžinio vaisto bleomicino elektropernašos.

Įvertinus ląstelių, kurios prieš tai buvo paveiktos tik vienu elektriniu impulsu, kolonijų skaičių, gauta, kad 99,36 % ląstelių, lyginant su kontrolinėmis, sugebėjo formuoti kolonijas, kurių dydis buvo 6 % didesnis, nei kontrolinių ląstelių dydis (1 pav., 2 pav.). Remiantis šiais rezultatais galime spręsti, kad tokios amplitudės elektriniai laukai įtakos ląstelių gyvybingumui neturi.

Įvertinus ląstelių, kurios nebuvo elektroporuotos, o tik inkubuotos su 5 nM BLM, gyvybingumą, gauta, kad tokios ląstelės gebėjo formuoti 12 % daugiau ir 6 % didesnes kolonijas, lyginant su kontrolinėmis (1 pav., 2 pav.). Remiantis šiais rezultatais galime spręsti, kad 5 nM koncentracijos BLM neelektroporuojant į ląsteles nepatenka ir jų gyvybingumo neveikia.



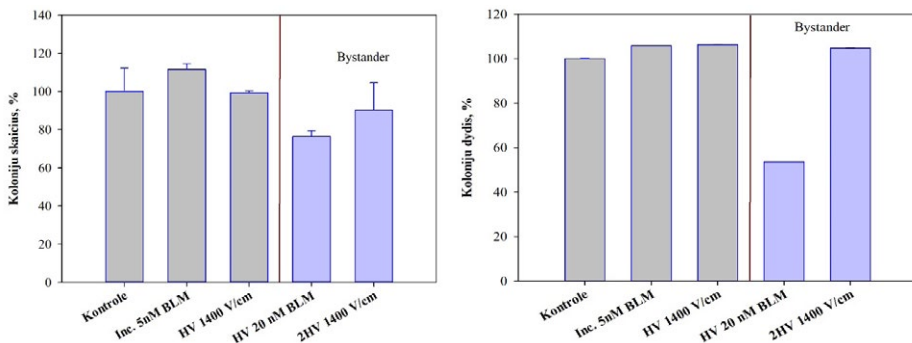
**1 pav.**

Ląstelių kolonijų formavimo testo rezultatai. A) Ląstelės, inkubuotos 6 dienas su 5nM bleomicinu (neelektroporuojama); ląstelės, elektroporuotos su vienu 1400 V/cm amplitudės ir 100 μs trukmės elektriniu impulsu. B) „Bystander“ efekto rezultatai – ląstelės, elektroporuotos su vienu 2800 V/cm amplitudės ir 100 μs trukmės elektriniu impulsu (negrįžtama elektroporacija) arba vienu 1400 V/cm amplitudės ir 100 μs trukmės elektriniu impulsu su 20nM BLM.

Tiriant „Bystander“ efekto įtaką ląstelių gyvybingumui po negrįžtamos elektroporacijos, gauta, kad tiesiogiai neveiktų ląstelių gyvybingumas nežymiai pakito (1 pav., 2 pav.) – nors kolonijos ir buvo formuojamos panašaus dydžio kaip ir kontrolės, tačiau jų skaičius buvo 10 % mažesnis nei kontrolinių ląstelių suformuotų kolonijų. Tiriant



šio reiškinio įtaką ląstelių gyvybingumui po priešvėžinio vaisto bleomicino elektropernašos, gauta, kad tik 76,5 % ląstelių, lyginant su kontrolinėmis, suformavimo kolonijas, o jų dydis buvo net 46 % mažesnis nei kontrolinės grupės ląstelių.



## 2 pav.

A) Kolonijų skaičius po 6 dienų inkubacijos, % nuo kontrolinių ląstelių kolonijų skaičiaus. Grafike pateikiami vidurkiai ( $n=600$ )  $\pm$  standartinė paklaida. Pilka dalimi pažymėtas neveiktų ląstelių kolonijų skaičius, o mėlyna – „Bystander“ eksperimento rezultatai. B) Kolonijų dydis po 6 dienų inkubacijos, % nuo kontrolinių ląstelių kolonijų dydžio. Grafike pateikiami vidurkiai ( $n=600$ )  $\pm$  standartinė paklaida. Pilka dalimi pažymėtas neveiktų ląstelių kolonijų dydis, o mėlyna – „Bystander“ eksperimento rezultatai.

**Išvados.** Remiantis gautais rezultatais galime teigti, kad po priešvėžinio vaisto bleomicino elektropernašos yra paveikiamas aplinkinių, tačiau tiesiogiai elektriniais laukais neveiktų, ląstelių gyvybingumas (statistiškai patikimai pakinta ir jų dydis, ir gyvybingumas). Nors „Bystander“ efektas turi įtakos ląstelių gyvybingumui po bleomicino elektropernašos, tačiau po negrįžtamos elektroperacijos ši įtaka labai nežymi – nors ir sumažėja kolonijų skaičius, tačiau jų dydis išlieka nepakitęs.

## Literatūra

- [1] Pasaulio sveikatos organizacija. *Cancer. Key facts*, 2018. World health organization. Prieiga per: <http://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer>
- [2] Kotterman, M. A., Chalberg, T. W., ir Schaffer, D. V. Viral Vectors for Gene Therapy: Translational and Clinical Outlook. *Annual Review of Biomedical Engineering*, 2015, 17 (1), 63–89.
- [3] Miklavčič, D., Mali, B., Kos, B., Heller, R. ir Serša, G. Electrochemotherapy: From the drawing board into medical practice. *BioMedical Engineering Online*, 2014, Vol. 13 (1), 1–20.
- [4] Kotnik, T., Rems, L., Tarek, M., ir Miklavčič, D. Membrane Electroporation and Electropermeabilization: Mechanisms and Models. *Annual Review of Biophysics*, 2018, 1–25.
- [5] Bigi, L., Galdo, G., Cesinaro, A. M., Vaschieri, C., Marconi, A. ir Fantini, F. *Electrochemotherapy induces apoptotic death in melanoma metastases: a histologic and immunohistochemical investigation*, 2016, 451–459.
- [6] Hall, E. J., Giaccia, A. J. *Radiobiology for the radiologist*. Lippincott Williams & Wilkins, 2006, 35–36.

**D. Baronas,  
A. Zubrienė**

*Vilniaus universitetas  
Gyvybės mokslų centras  
Biotechnologijos institutas  
Biotermodinamikos  
ir vaistų tyrimų skyrius*

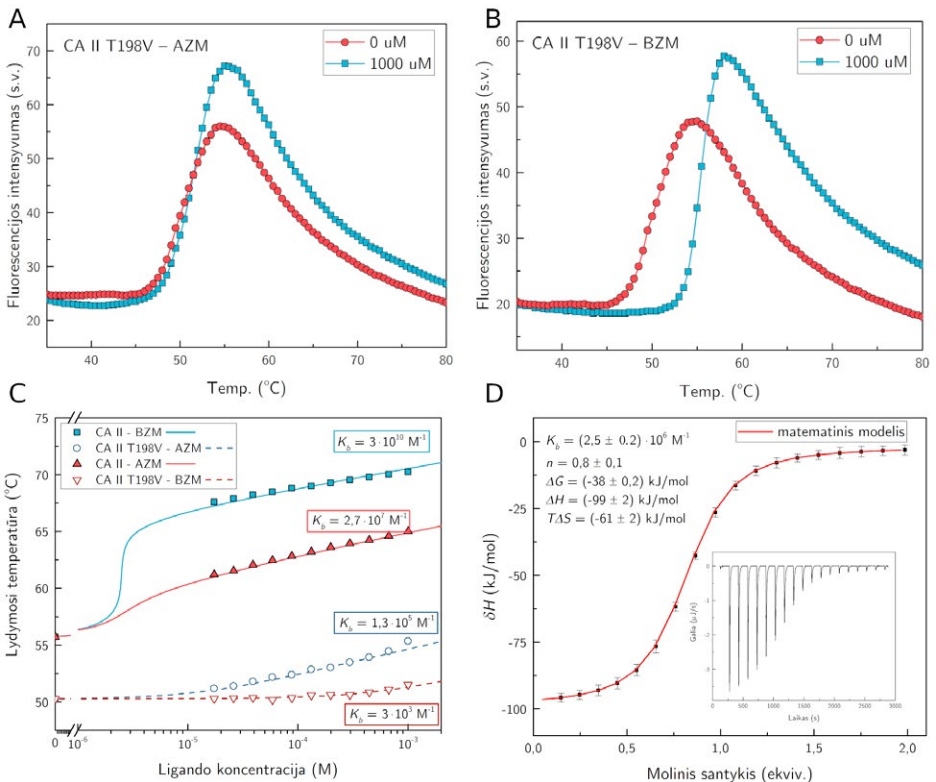
## **MODIFIKUOTŲ KARBOANHIDRAZĖS II IZOFORMŲ GAVIMAS BEI JŲ KOMPLEKSŲ SU LIGANDAIS BIOFIZIKINIAI IR KRISTALOGRAFINIAI TYRIMAI**

Kuriant vaistus racionaliai siekiama identifikuoti įvairias sąveikas bei sąveikos energijas priskirti tam tikriems struktūriniais baltymo ir ligando elementams. Molekulinis baltymo-ligando atpažinimas priklauso nuo specifinių sąveikų tarp dviejų sąveikaujančių molekulių: elektrostatinės, vandenilinių ryšių, hidrofobinės, van der Waals ir kt. sąveikų. Todėl svarbu priskirti energijos indėlių šioms sąveikoms kas įgalintų kurti baltymui-taikiniui didelio giminingumo ir atrankumo vaistinius junginius. Siekiant įvertinti priežastis lemiančias junginių giminingumą karboanhidrazių (CA) izoformoms yra atliekamos įvairios tiriamojo baltymo modifikacijos, pavyzdžiui įvedant įvairias aminorūgščių mutacijas baltymo aktyviajame centre, kurios yra atsakingos už baltymo-ligando atpažinimą (Krishnamurthy *et al.*, 2007).

Karboanhidrazės (CA) yra fermentai, katalizuojantys CO<sub>2</sub> hidratacijos reakciją. Žmogaus organizme yra 12 šio fermento kataliziškai aktyvių izoformų, kurių aktyvumo pokyčiai organizme lemia įvairias patologijas, tokias kaip glaukoma (CA II, CA IV, CA XIV), nutukimas (CA VA, CA VB), epilepsija (CA VII), vėžys (CA IX, CA XII) ir kt ligos. Šių fermentų inhibavimas, panaudojant slopiklius, stabdo minėtų ligų vystymąsi. Pirminiai sulfonamidai yra svarbiausia CA slopiklių klasė, apie 20 sulfonamidinių junginių jau yra naudojami kaip vaistai, tačiau dėl mažo atrankumo tam tikrai su liga siejami CA, turi daug pašalinių poveikių (Alterio *et al.*, 2012). Biotechnologijos institute Biotermodinamikos ir vaistų tyrimo skyriuje jau daugiau kaip 10 metų sintetinami įvairius pakaitus turintys benzonsulfonamidai, siekiant gauti vienai CA izoformai atrankius ir didelio giminingumo junginius. Pavyzdžiui, susintetinti fluorinti benzonsulfonamidai turintys hidrofobinius pakaitus meta padėtyje labai dideliu giminingumu jungiasi su CA IX izoforma ( $K_d$  siekia 50 pM) (Dudutienė *et al.*, 2014). Šios izoformos slopiklių kūrimui skiriamas ypatingas dėmesys, nes tai yra pripažintas taikiny vėžio gydymui. Tačiau faktoriai lemiantys stiprų slopiklių jungimąsi nėra gerai suprantami, nes iki šiol nėra eksperimentiškai nustatyti jungimosi parametrai, priskiriami skirtingiems struktūriniais junginio sąveikos su CA elementams (Zn-N ryšiu, hidrofobiniams ir vandenilinių ryšių kontaktams tarp baltymo ir ligando).

Yra žinoma, jog pirminę sulfonamidinę grupę turinčių junginių sulfonamidinė grupė koordinuoja su Zn<sup>2+</sup> jonu, kuris su trimis histino liekanomis ir viena vandens molekule, sudaro tetraedrinę geometriją, bei sudaro vandenilinius ryšius su treoninu, esančiu 198 padėtyje, o benzeno žiedas sąveikauja su hidrofobinėmis baltymo aminorūgštimis (Krishnamurthy *et al.*, 2007). CA-sulfonamidų sąveikoje svarbų vaidmenį

atliekančios treonino aminorūgšties, esančios 198 pozicijoje, hidroksilo grupė sudaro vandenilinį ryšį su sulfonamido azoto atomu. Todėl treonino pakeitimas kita aminorūgtimi, neturinčia funkcinę grupių (valinu) leido įvertinti vandenilinio ryšio indėlį tenkantį CA-sulfonamido sąveikos energijai.



**1 pav.**

A ir B - CA II T198V terminio išsivyniojimo kreivės, nepridėjus ligando (raudoni taškai) ir pridėjus 1000 μM ligando (mėlyni taškai). A – AZM koncentracijos įtaka, B – BZM koncentracijos įtaka baltymo stabilumui. C – CA II ir CA II T198V lydymosi temperatūros priklausomybė nuo ligandų koncentracijos. D – ITC eksperimento metu gauti pirminiai (paveikslėlio apačioje, dešinėje pusėje) bei suintegruoti duomenys titruojant ligandą BZM (200 μM) į baltymą CA II T198V tirpalą (20 μM), esantį matavimo celėje.

Šio mokslinio tyrimo metu buvo gauti du modifikuoti CA II baltymai: metalo jono aktyviajame centre neturinti CA II izoforma (apoCA II) ir mutantinis CA II baltymas, kuriame treoninas 198 padėtyje buvo pakeistas valinu (CA II T198V) bei įvertinta CA II aktyviajame centre esančio cinko bei treonino, esančio 198 padėtyje, svarba sąveikos energetikai. FTSA metodu buvo įvertintas šių baltymų terminis stabilumas. CA II T198V baltymo stabilumas panašus kaip natyvios CA II, tuo tarpu apoCA II stabilumas žymiai mažesnis, jo lydymosi temperatūra apie 7 °C mažesnė nei CA II.

Taip pat, šios praktikos metu buvo atlikti natyvios CA II ir mutantinio baltymo CA II T198V sąveikos su brinzolamidu (BZM), acetazolamidu (AZM), VD17-26 ir VD19-11 ligandais FTSA metodu tyrimai bei nustatytos jungimosi konstantos ( $K_b$ ). Pirminę

sulfonamidinę grupę turintis slopiklis BZM su natyvia CA II jungėsi iki 100000 kartų stipriau nei su mutantine CA II T198V. Šis jungimosi konstantų skirtumas sąlygojo 31,8 kJ×mol<sup>-1</sup> Gibso energijos pokytį, susijusį su vandenilinio ryšio nutraukimu tarp slopiklio ir 198 treonino. ITC metodu gauta  $K_b$  buvo apie 10 kartų didesnė nei FTSA metodu. Antriniai sulfonamidai (VD17-26 ir VD19-11) nesijungė su CA II T198V (1 pav.) FTSA metodu išmatuota BZM ir dorzolamido (DZM) sąveika su apoCA II. Jungimosi konstatų vertės palygintos su natyvios CA II jungimosi konstantomis. ApoCA II su tirtais junginiais jungėsi nuo 10<sup>5</sup> iki 10<sup>6</sup> kartų silpniau nei su natyvia CA II. Jungimosi konstantų sumažėjimą galima susieti su Zn-N ryšio sąveikos energijos praradimu. Taip pat būtų galima teigti, jog cinko jono buvimas CA II aktyviajame centre yra labai svarbi, tačiau nėra būtina sąlyga sulfonamidų-CA sąveikoje.

Taigi, metalo ištraukimas iš CA II aktyviajo centro leido įvertinti koordinacinio ryšio (Zn-N) indėlį sąveikos energijai, o treonino pakeitimas valinu CA II izoformoje leido įvertinti vandenilinio ryšio tarp slopiklio ir baltymo įtaką sąveikos stiprumui.

---

### Literatūra

- [1] Alterio, V. *et al.* (2012) 'Multiple Binding Modes of Inhibitors to Carbonic Anhydrases: How to Design Specific Drugs Targeting 15 Different Isoforms?', *Chemical Reviews*, 112(8), pp. 4421–4468. doi: 10.1021/cr200176r.
- [2] Dudutienė, V. *et al.* (2014) 'Discovery and characterization of novel selective inhibitors of carbonic anhydrase IX', *Journal of Medicinal Chemistry*, 57(22), pp. 9435–9446. doi: 10.1021/jm501003k.
- [3] Krishnamurthy, V. M. *et al.* (2007) 'Thermodynamic parameters for the association of fluorinated benzenesulfonamides with bovine carbonic anhydrase II', *Chemistry, an Asian Journal*, 2(1), pp. 94–105. doi: 10.1002/asia.200600360.

**A. Rimgailaitė,  
S. Šatkauskas**

*Vytauto Didžiojo universitetas,  
Gamtos mokslų fakultetas,  
Biofizikos tyrimų laboratorija*

# PLAZMIDINĖS DNR EKSPRESIJOS REGULIAVIMAS NAUDOJANT BLEOMICINO SUKELTĄ CITOTOKSIŠKUMO EFEKTĄ PO VIENALAIKĖS ABIEJŲ MOLEKULIŲ ELEKTROPERNAŠOS

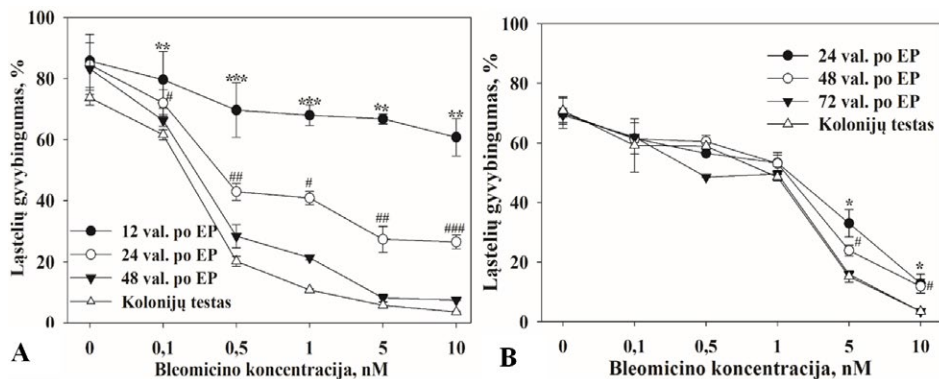
**Ivadas.** Vėžys - viena iš sunkiausiai išgydomų ligų grupių kuri pagal mirčių skaičių užima antrą vietą pasaulyje po širdies ir kraujagyslių susirgimų. Remiantis pasaulio sveikatos organizacijos duomenimis per ateinančius 20 metų, pacientų, sergančių onkologinėmis ligomis, skaičius visame pasaulyje padidės 23 procentais ir 2030 metais pasieks 13 milijonų. Siekiant sumažinti sergančiųjų skaičių ateityje, įvairių gydymo nuo vėžio metodologijų plėtojimas yra ypač aktualus. Pacientų gydymui pasitelkiami konvenciniai metodai, tokie kaip radioterapija, chemoterapija, chirurginė intervencija, imunoterapija [1, 2]. Tačiau naudojant šias gydymo technikas susiduriama su pašalinio poveikiu – sukeliama žymus sisteminis atsakas. Dėl šios priežasties, ieškoma alternatyvių, lokalių, didelio šalutinio poveikio nesukeliančių, vėžio gydymo metodų.

Vienas iš vėžio gydymo būdų lokaliai paveikti navikus, yra elektrochemoterapija (ECT) [3]. Elektrochemoterapija (ECT) apima priešvėžinių vaistų ir elektrinių laukų panaudojimą. Veikiant išoriniais elektriniais laukais, destabilizuojama ląstelės membrana – formuojasi laikinos hidrofilinės elektroporos [4]. Dėl susidariusių elektroporų padidėja ląstelės plazminės membranos pralaidumas hidrofilinėms medžiagoms. Tada pasirinktas chemoterapinis vaistas, kuris normaliomis sąlygomis sunkiai prasišverbia į ląstelės vidų, lengviau pasiekia taikinį. Dažniausiai elektrochemoterapijos metu naudojamas priešvėžinis vaistas – bleomicinas. Šiuo metu ieškoma būdų, kaip sustiprinti elektrochemoterapijos (ECT) veiksmingumą. Vienas iš galimų būdų gali būti viena laikis DNR elektropernašos panaudojimas. Tačiau dar nėra pilnai ištirta, ar DNR buvimas terpėje gali padidinti bleomicino pernašą ir tuo pačiu citotoksišką poveikį. Taip pat nežinoma, ar priešvėžinio vaisto buvimas gali keisti geno raiškos stiprumą ir laiką. Dėl šios priežasties, siekta iširti priešvėžinio vaisto bleomicino citotoksinio poveikio efektyvumą ir genų raiškos dinamiką naudojant viena laikę plazmidinę DNR ir bleomicino elektropernašą.

**Metodika.** Kaip tyrimo objektas pasirinktos dažniausiai elektroporacijos srityje naudojamos kininio žiurkėnuko kiaušidžių (CHO) ląstelės. Tyrimo metu buvo naudojamos žaliai fluorescuojančią baltymą koduojančios plazmidės. Viena jų – pEGFP-N1 (4,7 kb), o kita – piggyBack (7,1 kb) plazmidė. Tyrimams pasirinkta 200 μg/ml plazmidės koncentracija, nes jos pakanka, kad būtų gautas aukštas skaičius žaliai fluorescuojančių ląstelių išlaikant ląstelių gyvybingumą. Eksperimentų metu buvo naudojamas priešvėžinis vaistas bleomicinas. Pasirinktas koncentracijų intervalas nuo 0,1 nM iki 10 nM.

Ląstelėms elektroporuoti buvo naudojamas BTX T820 elektroporatorius su nerūdijančio plieno elektrodais ir laboratorijoje pagaminta EP terpe (pH 7,1, laidumas – 0,1 S/m, osmosinis slėgis – 270 mOsm). Elektroporacijai pasirinkti šie parametrai: vienas 100  $\mu$ s trukmės, 1400 V/cm stiprio elektrinis impulsas. CHO ląstelių žuvimo dinamika bei transfekcijos parametrai matuoti naudojant tėkmės citometrą, o ląstelių gyvybingumas įvertintas naudojant kolonijų formavimo testą.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** Tyrimo metu ląstelių kolonijų formavimo testu ir naudojant tėkmės citometriją buvo įvertintas CHO ląstelių gyvybingumas po kombinuotos bleomicino ir skirtingo dydžio plazmidinių DNR (pEGFP-N1 ir piggyBack) elektropernašos (1 pav.).



1 pav.

CHO ląstelių žuvimo dinamikos ir gyvybingumo įvertinimas po skirtingų koncentracijų bleomicino elektropernašos ir skirtingo dydžio plazmidinių DNR (pEGFP-N1, piggyBack) transfekcijos. A – naudota 4,7 kb pEGFP-N1, B – 7,1 kb piggyBack plazmidė. Statistinis reikšmingumas apskaičiuotas taikant dvipusio Student'o t-testą lyginant kolonijų formavimo testą su skirtingu laiku praėjusiu po elektroperacijos, kur \* –  $p < 0,05$ , \*\* –  $p < 0,01$ , \*\*\* –  $p < 0,001$ . # –  $p < 0,05$ , ## –  $p < 0,01$ , ### –  $p < 0,001$ .

1 paveiksle A dalyje, CHO ląstelių gyvybingumo rezultatai gauti panaudojus kolonijų formavimo testą po bleomicino ir pEGFP-N1 elektropernašos yra labai panašūs į rezultatus, gautus po elektroperacijos praėjus 48 valandoms tėkmės citometru. Pateiktame grafike matoma, kad didžiausias pokytis pastebimas ties 0,5 nM bleomicino koncentracija. Po 24, 48 ir 144 valandų (6 dienų) yra nužudoma daugiau nei 50 procentų ląstelių. Tuo tarpu po elektroperacijos praėjus 12 valandų, ties didžiausia bleomicino koncentracija, ląstelių gyvybingumas siekia  $60,79 \pm 6,10$  %. Remiantis gautais rezultatais matoma, kad esant žemoms bleomicino koncentracijoms ir pEGFP-N1 plazmidei, sukeltas ląstelių žuvimas yra lėtas procesas.

Atlikus eksperimentus su pEGFP-N1 plazmide, buvo nuspręsta pakeisti matavimo laiką iš 12 į 72 valandas, nes po elektroperacijos praėjus 12 valandų, ląstelių gyvybingumas išlieka aukštas, o reikšmingi skirtumai nustatyti po 24 bei 48 valandų. Toliau eksperimentai buvo tęsiami su piggyBack plazmide, kuri yra 7,1 kb dydžio (beveik dvigubai didesnė už pEGFP-N1) (1 pav. B dalyje). Kontroliniame taške ląstelių gyvybingumas siekė apie 70 %. Padidinus bleomicino koncentraciją, ląstelių gyvybingumas mažėjo. Lyginant tarpusavyje ląstelių gyvybingumą skirtingais momentais iki 5 nM bleomicino koncentracijos, reikšmingų skirtumų nebuvo nustatyta.

Tolimesnių tyrimų metu buvo išmatuotas transfekcijos efektyvumas po kombinuotos bleomicino, skirtingo dydžio plazmidinių DNR elektropernašos. Nustatyta, kad

didžiausias transfekcijos efektyvumas buvo išmatuotas naudojant mažesnę (4,7 kb) plazmidę (pEGFP-N1). Praėjus 24 valandoms po elektroporacijos transfekcijos, efektyvumas buvo lygus  $36,61 \pm 3,26$  %. Didėjant bleomicino koncentracijai, transfekcijos efektyvumas mažėjo. To priežastis - didėjant priešvėžinio vaisto koncentracijai ląstelės buvo žudomos. Tuo tarpu naudojant didesnę (7,1 kb) piggyBack plazmidę, transfekcijos efektyvumas po elektroporacijos kontroliniame taške neviršijo 20 procentų, o didinant bleomicino koncentraciją – mažėjo. Remiantis gautais duomenimis, galima teigti, kad mažesnis skaičius didesnės plazmidės molekulių praeina pro CHO ląstelių plazminę membraną, todėl matomas mažesnis transfekcijos efektyvumas.

**Išvados.** Remiantis eksperimentų rezultatais, galima teigti, kad didesnės plazmidės elektropernaša lemia mažesnį ląstelių gyvybingumą ir transfekcijos efektyvumą panaudojus elektrinius laukus. Po elektrinių laukų panaudojimo, išgyvenusių ląstelių, kurios ekspresavo žaliai fluorescuojantį baltymą (GFP), skaičius mažėjo didėjant plazmidės dydžiui. Taigi, galima teigti, kad įmanoma kontroliuoti ląstelių žuvimo dinamiką, naudojant skirtingas bleomicino koncentracijas. Taikant šį kombinuotą bleomicino ir plazmidinės DNR metodą kartu su EP, būtų galima laikinai ekspresuoti norimus genus ląstelėse, kurie vėliau bus „nutildyti“, nes paveiktos ląstelės praėjus ilgesniam laikui po elektroporacijos žus. Gauti rezultatai ateityje gali būti pritaikyti kombinuotoje imunochemoterapijoje bei didinant elektrochemoterapijos efektyvumą.

---

### Literatūra

- [1] Sudhakar, A. *Journal of Cancer Science & Therapy*, 2009, 1(2), p. 1-4.
- [2] Baskar, R., V.A. Lee, R. Yeo, K.W. YEOH. *International Journal of Medical Sciences*, 2012, 9(3), p. 193-199.
- [3] Giardino, R. *Biomedicine and Pharmacotherapy*, 2006, 60(8), p. 458–462.
- [4] Teissie, J., M.P. Rols. *Biophysical Journal*, 1993, 65(1), p. 409-413.

**K. Vitkutė,  
A. Alaburda,  
U. Neniškytė**

*Biomokslų institutas,  
Gyvybės mokslų centras,  
Vilniaus universitetas*

## **HIPOKAMPO PIRAMIDINIŲ NEURONŲ ELEKTROFIZIOLOGINIŲ SAVYBIŲ KITIMAS POSTNATALINIO VYSTYMO SI LAIKOTARPIU LAUKINIO TIPO PELĖSE**

Postnatalinis vystymasis yra kritinis hipokampo piramidinių neuronų vystymuisi ir neuroninių tinklų formavimuisi. Šiuo laikotarpiu nebrandžių piramidinių neuronų membranos plotas smarkiai išauga, o membranoje esančių joninių kanalų skaičius, sudėtis bei kinetinės savybės smarkiai persitvarko. Tai lemia tolygų neuronų spontaneo aktyvumo pasikeitimą į neurono tipui charakteringą neuroninį aktyvumą. Tuo pat metu piramidinių neuronų dendritinės ataugos smarkiai šakojasi ir sudaro gausybę naujų sinapsinių kontaktų. Šis sinapsių perteklius yra pašalinamas ar pertvarkomas nuo aktyvumo priklausomais mechanizmais taip formuojant tipinius hipokampo neuroninius tinklus.

Daug žinių apie neuroninių kelių vystymąsi surinkta anatomiinių bei imunohistocheminių tyrimų metu, tačiau daug tinklo ypatybių, tokių kaip vidinės neurono savybės ar funkcinis sinapsinis aktyvumas, gali būti įvertinta tik elektrofiziologiniais tyrimais gyvuose neuronuose. Deja, dauguma elektrofiziologinių vystymosi tyrimų atlikti su žiurkėmis. Nauji pelių genetinės modifikacijos metodai suteikia galimybę detalai tyrinėti su vystymosi susijusius molekulinis mechanizmus. Dėl to natūralu, jog elektrofiziologiniai pelių vystymosi profiliai bus būtini tolimesniems smegenų brandos tyrimams.

Šio tyrimo tikslas buvo įvertinti sinapsinį aktyvumą bei vidines neurono savybes postnataliniu vystymosi periodu pelių hipokampo CA1 piramidiniuose neuronuose. Šiam tikslui pasiekti mes naudojome įvairias patch-clamp technikas bei įdiegėme ir optimizavome metodą, tinkamą įvairaus postnatalinio amžiaus ūmių smegenų pjūviams paruošti, palaikyti bei registruoti.

Šio tyrimo metu atskleidėme žymius sinapsinio aktyvumo pakitimus vystymosi metu: sinapsinių įvykių dažnis tolygiai didėjo, o sinapsinis perdavimas sustiprėjo. Tuo pat metu hipokampo piramidiniai neuronų vidinės savybės reikšmingai keitėsi: membranos įėjimo varža smarkiai sumažėjo, veikimo potencialai tapo aukštesni bei trumpesni bei demonstravo greitesnę depolarizaciją ir repolarizaciją. Brandesni piramidiniai neuronai buvo geriau prisitaikę palaikyti didesnį veikimo potencialų dažnį. Skirtingi šių procesų kitimai laike indikuoja, jog vidinės neurono savybės ir sinapsinis aktyvumas galimai įtakoja vienas kitą postnatalinio vystymosi metu; todėl daugiau tyrimų turėtų tikslingai įvertinti šias galimas sąsajas.

Šiame tyrime aprašyti hipokampo piramidinių neuronų elektrofiziologiniai profiliai postnatalinio vystymosi metu bus naudingi tolimesniems tyrimams su transgeninėmis pelėmis, norint atskleisti specifinius molekulinis mechanizmus, susijusius su sveiku ar sutrikusiu postnataliniu smegenų brendimu.



**M. Bytautas,  
A. S. Maruška,  
K. Bimbraitė-Survilienė**

*Faculty of Natural Sciences,  
Vytautas Magnus University, Lithuania  
marius.bytautas@stud.vdu.lt*

## **ANALYSIS OF THUJA (THUJA SPP.) BIOLOGICAL ACTIVITY**

The object of interest for this research were leaves and bark of *Thuja standishii* (Gord.) Carr., *Thuja occidentalis* L. and *Thuja occidentalis* 'Aurescens'. The aim was to measure the quantities of flavonoids and phenolic compounds, the radical scavenging activities, compare the results to find out which parts of the plant and which species produce the most of the compounds, evaluate the effects of storage, allelopathic properties, antifungal and antibacterial activities.

The quantities of the compounds were measured using spectrophotometric methods [1]. The quantities of flavonoids in leaves varied from 1.02 % to 2.36 %, of phenolic compounds in bark from 4.51 % to 8.97 % fraction mass and radical scavenging activity was determined to be from 0.81 % to 1.23 % rutin equivalents in leaves.

Leaves turned out to be the richest part in flavanoids and bark in phenolic compounds. *T.occidentalis* 'Aurescens' had the largest quantities of both of the desired compounds. Radical scavenging activity was highest in the bark of *T. occidentalis*.

The results of other analysis will be presented during the conference.

---

### **Literatūra**

- [1] Kaškonienė, V., Ruočkuvienė, G., Kaškonas, P., Akuneca I., Maruška A. *Food Analytical Methods*. Chemometric analysis of bee pollen based on volatile and phenolic compound compositions and antioxidant properties, 2015, 8(5), 1150-1163.

**G. Bumbulytė<sup>1, 2</sup>,  
V. Būda<sup>1</sup>**

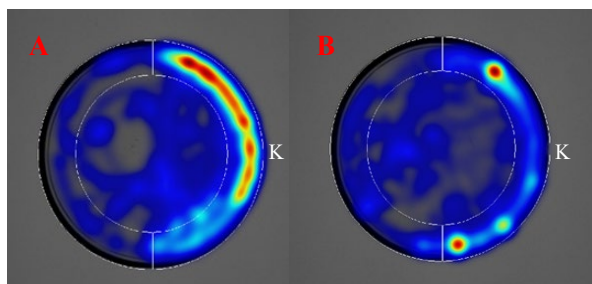
<sup>1</sup>Gamtos tyrimų centras,  
Ekologijos institutas, Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas,  
Gyvybės mokslų centras, Vilnius

## REPELENTINIŲ CHEMINIŲ JUNGINIŲ DIDŽIAJAM MILČIUI (*TENEBRIO MOLITOR*) PAIEŠKA MĖTOS (*MENTHA SPICATA*), ČIOBRELIO (*THYMUS VULGARIS*) ETERINIUOSE ALIEJUOSE

Vabzdžių valgymas nėra naujovė šiuolaikinėje visuomenėje. Pagal Jungtinių Tautų Maisto ir Žemės Ūkio organizaciją, gyventojų augimas, urbanizacija ir auganti vidutinė klasė padidino pasaulinę maisto produktų paklausą, ypač tokių, kurie yra didelis baltymų šaltinis [1]. Vienas pagrindinių aspektų, kodėl vabzdžių valgymas yra alternatyva gyvulių mėsai, yra tas, kad vabzdžiai yra labai maistingi, greitai dauginasi ir nesukelia ženklaus žalingo poveikio aplinkai. Šiuo metu sparčiai populiarėja ekologiški vabzdžių auginimo ūkiai, kurių produkciją siekiama įtraukti į kasdieninę žmonių mitybą.

Didžiojo milčiaus (*Tenebrio molitor* L.) lervos yra nesunkiai auginamos, turi gana didelį biomasės prieaugį, jos yra maistingas, gausus baltymų šaltinis. Jo savybės yra geriausias pavyzdys iškeltos problemos tyrimui. Auginant vabzdžius, svarbus žingsnis yra auginamų vabzdžių biomasės prieaugio paėmimas iš auginimo terpės. Tai galėtų būti jų nubaidymas nuo terpės, panaudojant repelentiškas medžiagas. Kadangi tai susiję su maisto pramone, naudojamos medžiagos turėtų būti netoksiškos žmonėms. Potencialus tokių junginių šaltinis – eteriniai aliejai iš augalų, kurie naudojami ruošiant maistą.



### 1 pav.

Didžiojo milčiaus (*Tenebrio molitor* L.) lervos praleistas laikas Petri lėkštelėje paveikus mėtos (*Mentha spicata* L.) (A) ir čiobrelio (*Thymus vulgaris* L.) (B) (t-testas) eteriniais aliejais. Spalvos intensyvumas vaizduoja suminį 10 *Tenebrio molitor* lervų praleistą laiką (po 5 min) arenoje. K – kontrolinė pusė be stimulo.

Elgesinis eksperimentas buvo atliekamas Petri lėkštelėje naudojant dviejų pasirinkimų testą (angl. *Two-choice assay*). Lervos elgsena lėkštelėje buvo sekama 5 minutes vaizdo kamera ir analizuojama kompiuterine gyvūnų elgsenos ir jos analizės programa *EthoVision XT 12* (Noldus, Nyderlandai). Ankstesnių tyrimų metu

analizuojant eterinių aliejų poveikį didžiojo milčiaus lervoms, nustatyta, kad geriausiai repelentinį poveikį turi čiobrelio (*Thymus vulgaris* L.) ir mėtos (*Mentha spicata* L.) (1 pav.) eteriniai aliejai [2]. Rezultatas gautas remiantis dviem kriterijais: nueitą atstumą bei praleistą laiką *Petri* lėkštelės dalyse – kontrolinėje ir eterinių aliejumi paveiktoje (stimulo).

Dujų chromatografijos masių spektrometrijos metodais identifikuoti tyrimams naudotų čiobrelio ir mėtos eterinių aliejų gausiausi cheminiai junginiai. Šiame darbe buvo tirtas šių eterinių aliejų gausiausių komponentų poveikis. Ryškiausios repelentinės savybės pagal lervos nueitą kelią bei praleistą laiką atitinkamose *Petri* lėkštelės dalyse buvo aptiktos veikiant trimis pavieniais junginiais 100 mM koncentracijose. Pastebėta, kad kontrolinėse lėkštelėse, kuriose nėra stimulo, didžiojo milčiaus lervos daugiausiai laiko praleidžia periferijoje, o ne centrinėje zonoje.

Atlikus elgsenos tyrimus su  $ZnSO_4$ , kuris yra žinomas kaip vabzdžių uoslės receptorių inhibitorius [3], nustatyta, jog po 3 min ekspozicijos šis junginys užblokuoja *T. molitor* lervų uoslės receptorių ir lervos nebereaguoja į 100 mM koncentracijos repelentus.

---

### Literatūra

- [1] FAO. Edible Insects. Future Prospects for Food and Feed Security.; 2013. <http://www.fao.org/3/i3253e/i3253e.pdf> žiūrėta: 2020-06-25 13:51
- [2] Bumbulytė, G. Eterinių aliejų ir juose esančių medžiagų poveikis didžiojo milčiaus (*Tenebrio molitor* L.) lervoms. Bakalauro darbas; Vilniaus universitetas. Gyvybės mokslų centras. Vilnius: Vilniaus universitetas, 2019.
- [3] Baužienė, V., Būda, V. Importance of Chemical Stimuli in Precopulatory Behaviour of Blackflies *Simulium Lineatum* Mg. (Diptera: Simuliidae), *Acta Zoologica Lituanica*, 2010 , 20:1, 31-36.

L. Dobrovolskis<sup>1,2</sup>,  
Ž. Strazdaitė-Žielienė<sup>1</sup>,  
E. Servienė<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Gamtos tyrimų centras  
<sup>2</sup> Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas

## MIELIŲ BIOJVAIROVĖ IR PAPLITIMAS LIETUVOS GĖLO VANDENS TELKINIUOSE

Iki šiol duomenų apie mieles aptinkamas Lietuvos gėluosiuose vandenyse nėra. Darbo tikslas buvo išskirti, identifikuoti ir palyginti mielių rūšių įvairovę Lietuvos gėluosiuose vandenyse. Šio tyrimo eigoje vandens mėginiai buvo surenkami iš įvairių vandens telkinių, kuriuose maudosi žmonės: upių, upelių (tekančio vandens mėginiai) bei ežerų, tvenkinių, karjerų, marių (stovinčio vandens telkiniai). Palyginus mikroorganizmų įvairovę stovinčiame ir tekančiame vandenyje buvo nustatyta, kad tekančio vandens bioįvairovė yra didesnė. Mielės nėra pastoviai vandenyje gyvenantys mikroorganizmai. Į vandens buveines jos patenka su vėju, lietumi, dažnai jas platina gyvūnai, tarp jų ir žmonės. Didesnis jų skaičius aptiktas tekančiame vandenyje, nes upės ir upeliai prateka pro įvairesnes teritorijas (miškus, pievas, gyvulių ganyklas, žemdirbystės teritorijas, miestus). Didelę įtaką gali daryti antropogeninė tarša, tai atspindi didžiųjų Lietuvos upių mėginiuose: Nemuno ir Neries (abiejose upėse nustatyta po 4 mielių gentis). Šio tyrimo metu buvo nustatyta, kad mielės yra paplitusios visų tipų Lietuvos gėlo vandens telkiniuose ir jų paplitimas yra dėsningas.

Kultivuojamų mielių rūšys buvo nustatomos naudojant morfologinius duomenis ir ITS regiono RFLP analizės metodus. Šiais metodais buvo nustatytos 9 mielių rūšys, priklausančios 7 gentims (*Candida intermedia*, *Cystobasidium ongulense*, *Cryptococcus victoriae*, *Dioszegia rishiriensis*, *Hanseniaspora uvarum*, *Microdochium citrinidiscum*, *Pichia kluyveri*, *Rhodotorula babjevae*, *Rhodotorula dairenensis*). Rūšys, kurių identifikuoti minėtais metodais nepavyko, buvo nustatytos sekoskaitos metodu. Šiuo būdu buvo identifikuotos 8 mielių rūšys: *Bullera alba*, *Cyberlindnera suaveolens*, *Cystobasidium slooffiae*, *Rhodofilobasidium capitatum*, *Cryptococcus carnesciens*, *Cryptococcus victoriae*, *Rhodotorula babjevae*, *Rhodotorula glutinis*.

Iš viso buvo ištirti 26 vandens telkinių mėginiai: 10 iš ežerų, 5 iš tvenkinių, 3 iš marių, 8 iš upių ir upelių. Mielės buvo aptiktos 17 mėginių: 6 iš ežerų, 3 iš tvenkinių, 2 iš marių, 6 iš upių ir upelių. Buvo nustatytas mielių paplitimas pagal vandens telkinių tipus. Ežeruose paplitusios 4 rūšys: *B. alba*, *C. victoriae*, *M. citrinidiscum*, *R. babjevae*. Visos identifikuotos rūšys ežeruose nustatytos tik po vieną kartą, išskyrus *C. victoriae*. Ši rūšis identifikuota 4 ežeruose: Bebrusų, Ilgio, Rubikių ir Sauso. Tvenkiniuose paplitusios taip pat 4 rūšys: *C. suaveolens*, *C. capitatum*, *C. victoriae*, *R. ingenirosa*. Visos rūšys identifikuotos po vieną kartą. Mariose paplitusios 3 rūšys: *D. rishiriensis*, *P. kluyveri*, *S. roseus*. Visos identifikuotos po vieną kartą. Upėse ir upeliuose paplitę daugiausiai rūšių – 9: *C. intermedia*, *C. ongulense*, *C. slooffiae*, *C. carnesciens*,

*C. victoriae*, *H. uvarum*, *R. babjevae*, *R. dairenensis*, *R. glutinis*. Visos rūšys upėse ir upeliuose identifikuotos po vieną kartą, todėl paplitimo dėsningumų tarp tekančio vandens telkinių išskirti negalima. Nors tekančio vandens telkinių mėginių buvo mažiau – 8, tuo tarpu stovinčio – 18, mielių rūšių buvo nustatyta beveik tiek pat kiek stovinčio vandens telkiniuose: tekančio – 9 rūšys, stovinčio – 10 rūšių.

Apibendrinus gautus rezultatus galima teigti, kad duomenų apie vandenyje gyvenančias mieles nėra daug. Šio darbo metu buvo nustatytas mielių paplitimas Lietuvos gėlo vandens telkiniuose. Molekuliniiais metodais nustatyta 15 mielių genčių, tarp kurių buvo identifikuota 12 mielių rūšių. Buvo nustatyta, kad tekančiame vandenyje mielių (bakterijų taip pat) kiekis didesnis nei stovinčiame. Didžiausias mielių kiekis ir biojvairovė nustatyti Nemuno ir Neris upėse. Tarp stovinčio vandens telkinių mielių kiekiu išsiskyrė Antalieptės marios, o biojvairovė – Santariškių tvenkinys.

**N. Jonutytė,  
E. Lastauskienė**

*Vilniaus universitetas,  
Gyvybės mokslų centras,  
Biomokslų institutas*

## **[PSI+] PRONO VARIANTŲ ĮTAKA MIELIŲ LĄSTELIŲ AUGIMUI IR VIDULĄSTELINIŲ BALTYMŲ KAUPIMUI**

### **Įvadas**

Prioninės ligos yra progresyvios, iki šiol neišgydomos, pasireiškia mirtiniais neurodegeneratyviniais sutrikimais. Prionų šalinimas iš ląstelių yra sunkus uždavinys, nes jie pasižymi itin dideliu atsparumu įvairiems aplinkos veiksniams: denatūrantams, dezinfekcinėms priemonėms, proteazėms, karščiui bei kitiems baltymų inaktyvavimo metodams (Cox, et. al, 2007) Dažnai iš ląstelės eliminavus prionus jie po kurio laiko gali atsirasti iš naujo (Liebman. et. al, 2012).

Dauguma eksperimentų skirtų prionų eliminacijai tirti susitelkia į gydymo efektyvumą ir mažesnę prioninio baltymo atsiradimo tikimybę, tačiau į tai ar išgijusios ląstelės gali augti kaip niekada prionų neturėjusios – neatsižvelgiama.

**Darbo tikslas** – nustatyti [PSI<sup>+</sup>] priono variantų įtaką mielių ląstelių augimui ir viduląstelinį baltymų kaupimu.

### **Rezultatai ir jų aptarimas**

#### **S. cerevisiae [psi<sup>-</sup>] kamieno prionizacija**

Kolonijos suskirstytos pagal dydį (kolonijos skersmens ilgį) ir spalvą: S (0-1,5 mm), M (1,5-3 mm), L (3-5 mm) XL (> 5 mm), balta, rožinė, raudona atitinkamai. Kolonijų spalva (nustatoma tik užsėjus koloniją ant lėkštelės su <sup>1/4</sup>YPD terpe ir po 3 parų įvertinama, nusako ląstelėse esančio priono stiprumą: balta – stiprus prionas, rožinė – vidutinio stiprumo, raudona – silpnas, kelių spalvų kombinacija – įvairaus stiprumo (žiūrėti 1 pav.).

Yra žinoma, kad ląstelės turinčios stiprų prioninį variantą yra linkusios kaupti nestabilius, nefunkcionalius baltymus (Wickner et al. 2013), tai galėtų daryti įtaką ląstelės dydžiui (kuo stipresnis variantas tuo didesnė ląstelė).

#### **S. cerevisiae 74D-694 kamieno [PSI<sup>+</sup>] S, M, L, XL variantų prionų eliminacija**

Buvo analizuotas kolonijų fenotipas: kolonijos buvo išskirstytos į tris grupes pagal kolonijų spalvą (priono stiprumą): baltos (stiprus priono variantas, neišgydytos ląstelės), rožinės (silpnas priono variantas, neišgydytos ląstelės), raudonos (išgydytos ląstelės).

Lyginant su kitų dydžių variantais [PSI<sup>+</sup>] prionas iš S variantų yra lengviausiai eliminuojamas. Silpną priono variantą turinčios ląstelės yra mažiau stabilios mitozės metu, todėl gali prionus tiesiog spontaniškai prarasti, taip pat šios ląstelės tirpų Sup35 baltymą konvertuoją į prioninį variantą prasčiau nei stiprų prioną turinčios ląstelės.

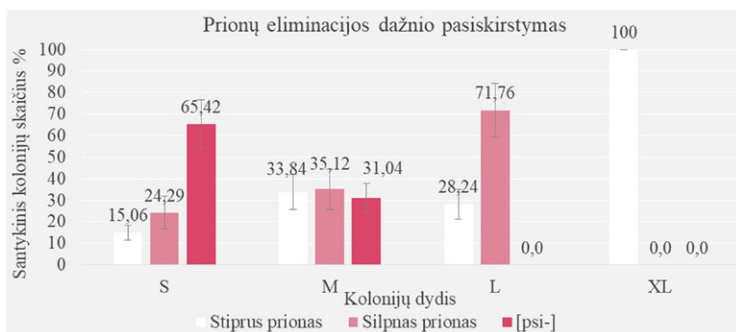
**1 pav.**  
Prionų variantų dažnio pasiskirstymas.



*S. cerevisiae* 74D-694 kamieno [PSI<sup>+</sup>] atrinktų variantų sinergistinio guanidino hidrochlorido ir impulsinio elektrinio lauko įtaka prionų eliminacijai nustatymas

Palyginus išgydytų kolonijų kiekį kombinuojant GuHCl ir IEL (2 pav.) su kolonijomis gydytomis tik GuHCl matyti kad skirtumas nėra didelis: tarp [psi<sup>-</sup>] S kolonijų gydytų tik GuHCl ir GuHCl kombinuojant su IEL skirtumas yra  $3,98\% \pm 6,55\%$ , o tarp M atitinkamų kolonijų –  $20,5\% \pm 7,21\%$ , daugiau M dydžio ląstelių su eliminuotu prionu buvo paveikiant tik GuHCl.

**2 pav.**  
Atrinktų prionizuotų (S, M, L, XL) kolonijų gydymo 5 mM GuHCl kombinuojant su IEL efektyvumo rezultatai.



Galima teigti, kad impulsinis elektrinis laukas norint eliminuoti prionus teigiamai veikia tik S ir M dydžio ląsteles, kurios turi silpną priono variantą, o L ir XL ląsteles neigiamai, kadangi nebuvo išgijusių kolonijų

*S. cerevisiae* 74D-694 kamieno ląstelių, turinčių skirtingus [PSI<sup>+</sup>] priono variantus, turinčių eliminuotus [PSI<sup>+</sup>] priono variantus ir [PSI<sup>+</sup>] priono variantų neturėjusių augimo dinamikos nustatymas ir palyginimas

Statistiškai reikšmingi generacijos laiko skirtumai gauti tarp išgydytų [psi<sup>-</sup>] S, L, XL variantų ir atitinkamų kontrolių, būtent šiuos priono variantus eliminavus, ląstelės auga statistiškai reikšmingai lėčiau nei priono niekada neturėjusios. Eliminavus M priono variantą, ląstelės auga lygiai taip pat, kaip priono niekada neturėjusios. Tačiau lyginant kontroles, matoma ir pačio gydymo įtaką ląstelių augimui, nes priono neturėjusios ląstelės paveiktos GuHCl ar GuHCl ir IEL auga statistiškai reikšmingai lėčiau, nei šiais veiksniais nepaveiktos ląstelės.

*S. cerevisiae* 74D-694 kamieno ląstelių, turinčių skirtingus [PSI<sup>+</sup>] priono variantus, turinčių eliminuotus [PSI<sup>+</sup>] priono variantus ir [PSI<sup>+</sup>] priono variantų neturėjusių tirpiųjų/baltymų profilių palyginimas

Nepriklausomai nuo kolonijos dydžio prionizuoti variantai turi didesnę koncentraciją netirpių baltymų, bei baltymų didesnių už 70 kDa ir mažesnių arba lygių 30 kDa, tokie skirtumai atsiranda dėl to, kad vykstant baltymų sintezei prionizuotose ląstelėse translacijos terminacijos faktorius baltymas Sup35 yra agreguotas (daugiau ar mažiau priklauso nuo priono varianto stiprumo), todėl prionizuotos ląstelės sukaupta daugiau didesnio dydžio baltymų nei [psi].

Tariamo Sup35 tirpaus baltymo skirtumai pastebėti tarp prionizuotų ir prioną praradusių ląstelių nepriklausomai nuo dydžio, taip atsitinka todėl, kad prionizuotuose variantuose Sup35 baltymas yra daugiau ar mažiau agreguotas ir iškrenta į nusėdas, o prioną praradusiuose variantuose jis yra tirpus ir todėl matoma, jo didesnė koncentracija NDS-PAGE tirpios baltymų frakcijos gelyje.

## Išvados

Prionizavus *S. cerevisiae* [psi][PIN<sup>\*</sup>] 74D-694 kamieną nustatyta kolonijos dydžio ir priono stiprumo koreliacija, stiprėjant priono varintui didėja formuojamų kolonijų dydis. Atrinktų kolonijų prionų eliminacijos metu naudojant GuHCl daugiausia išsigydė S dydžio kolonijų, nustatyta koreliacija tarp priono stiprumo ir eliminacijos efektyvumo. Prionų eliminacijos metu naudojant GuHCl ir IEL daugiausia išgijo S dydžio kolonijų – 65,52 % ± 11,20 %, nustatyta koreliacija tarp priono stiprumo ir eliminacijos efektyvumo. Augimo dinamikų tyrime nustatyta: prionizuoti [PSI<sup>+</sup>] S, M, L, XL variantai užaugino didžiausią kiekį biomasės lyginant su atitinkamų dydžių variantais. Nustatyti statistiškai reikšmingi skirtumai ( $p < 0,05$ ) tarp šių variantų: [psi] S paveikto GuHCl ir [psi] S gydyto GuHCl ir IEL lyginant su atitinkamomis kontrolėmis, [psi] L paveikto GuHCl ir kontrolės [psi] paveiktos GuHCl, [psi] XL paveiktos GuHCl ir atitinkamos kontrolės, taip pat tarp [psi] ir [psi] paveiktos GuHCl, bei [psi] ir [psi] paveiktos GuHCl ir IEL. Viduląstelių netirpių baltymų analizė parodė: [PSI<sup>+</sup>] S, M, L, XL, variantai turi daugiau didesnių už 70 kDa ir mažesnių arba lygių 30 kDa dydžio baltymų lyginant su atitinkamais gydytais GuHCl variantais ([psi] S, M, L, XL). Viduląstelių tirpių baltymų analizė parodė: prionizuoti [PSI<sup>+</sup>] S, M, L, XL variantai turi mažesnę hipotetinio Sup35 baltymo koncentraciją lyginant su atitinkamais [psi] S, M, L, XL gydytais GuHCl variantais.

---

## Literatūra

- [1] Cox, Brian S., Lee J. Byrne, and Mick F. Tuite. 2007. "Prion Stability." *Prion* 1 (3): 170–78. <https://doi.org/10.4161/pri.1.3.4839>.
- [2] Liebman, Susan W., and Yury O. Chernoff. 2012. "Prions in Yeast." *Genetics* 191 (4): 1041–72. <https://doi.org/10.1534/genetics.111.137760>.
- [3] Wickner, Reed B., Herman K. Edskes, David A. Bateman, Amy C. Kelly, Anton Gorkovskiy, Yaron Dayani, and Albert Zhou. 2013. "Amyloids and Yeast Prion Biology." *Biochemistry* 52 (9): 1514–27. <https://doi.org/10.1021/bi301686a>.



G. Juknevičiūtė,  
N. Kuisienė

*Vilniaus universitetas*

## POLIKETIDŲ IR NERIBOSOMINIŲ PEPTIDŲ SINTEZĖJE DALYVAUJANČIŲ GENŲ RAIŠKOS TYRIMAI *PAENIBACILLUS* SP. KAMIENUOSE, IŠSKIRTUOSE IŠ POŽEMINIO URVO

Pastaruoju metu pasaulis vis stipriau susiduria su medicinoje naudojamų antibiotikų atsparumo problema. Teigiama, kad tokia situacija iškilo dėl per didelio ir netinkamo šių vaistų vartojimo bei per lėto naujų vaistų vystymo [1]. Dėl šios priežasties ieškoma naujų bioaktyvių medžiagų, kurios galėtų padėti spręsti iškilusias problemas. Šiuo metu vis dažniau tyrinėjami urvai, kadangi jie mažai keičiasi nuo savo susiformavimo pradžios, todėl manoma, kad juose gyvenantys mikroorganizmai geba išskirti dar neidentifikuotas bioaktyvias medžiagas, kurios padėtų kovoti su atsparumą įgijusiomis bakterijomis [2].

Vieni gausiausiai šiuo metu tyrinėjamų bioaktyvių medžiagų sintezės fermentų yra neribosominių peptidų sintetazės (NRPS) ir poliketidų sintetazės (PKS) – tai moduliniai fermentai, kurie sintetina neribosominius peptidus, poliketidus ir hibridinius jų junginius [3]. Šios medžiagos kelia itin didelį susidomėjimą dėl savo unikalaus sintezės mechanizmo ir galimybių jį modifikuoti, taip sukuriant pageidaujamomis savybėmis pasižyminčius junginius [4].

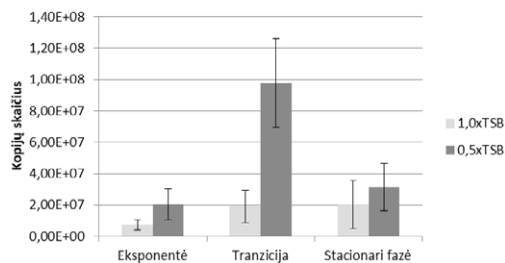
Pastebėta, kad *Paenibacillus* genties bakterijos geba sintetinti labai platų šių junginių spektrą [5]. Taip pat, šios genties bakterijos gali būti labai svarbios medicinoje, nes sintetina įvairius antimikrobinius junginius, kartu pastebėtas ir jų pesticidinis poveikis [6].

Projekto tikslas – susikurti specifinius pradmenis gausinančius PKS-NRPS ir NRPS genus bei įvertinti, kokią įtaką šių genų raiškai turi anglies kiekis mitybinėje terpėje bei ląstelių kultūros augimo fazė. Taigi, tyrimo metu buvo sukonstruota ir atrinkta 14 specifinių pradmenų porų, kurie buvo naudojami kiekybinės genų raiškos tyrimams. Taip pat, nubraižytos abiejų kamienų augimo kreivės naudojant dvi mitybines terpes, kurios skyrėsi anglies kiekio koncentracija jose. Iš abiejų kamienų pasirinktų augimo taškų (eksponentės vidurio, tranzicijos ir stacionarios fazės) buvo išskirta suminė RNR, ji patikrinta RNR elektroforezės metodu ir išvalyta nuo DNR priemaišų. Atvirktinės transkripcijos PGR metodu buvo sintetinama kopijinė DNR, kaip matricą naudojant išvalytą suminę RNR. Būtent ši kopijinė DNR buvo naudojama kiekybiniams genų raiškos tyrimams su susikonstruotais specifiniais pradmenimis.

Atlikus kiekybinę genų raiškos analizę nustatyta, kad ryškiausiai vykdoma G28 pradmens gausinamo NRPS geno raiška (1 pav.): *Paenibacillus* sp. 23TSA30-6 sumažinto anglies kiekio sąlygomis sintetina  $9,8 \times 10^7$  kopijų tranzicijos fazės metu ir  $2,0 \times 10^7$  geno kopijų stacionarios fazės metu esant įprastam anglies kiekiui terpėje.

*Paenibacillus* sp. 28ISP30-2 auginant įprasto anglies kiekio sąlygomis didžiausias kopijų skaičius yra stacionarioje fazėje –  $2,3 \times 10^7$  kopijų, o sumažinto anglies kiekio sąlygomis tranzicijos fazėje sintetinama  $4,8 \times 10^7$  šio geno kopijos.

### *Paenibacillus* sp. 23TSA30-6

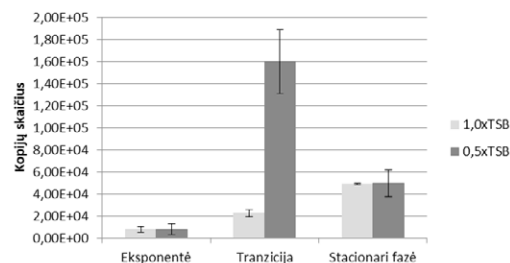


#### 1 pav.

Kiekybinė G28 pradmenų poros gausinamo geno raiškos analizė. 1,0xTSB – įprastas anglies kiekis terpėje, 0,5xTSB – sumažintas anglies kiekis terpėje.

Silpniausiai genų raiška vykdoma su G5 pradmens gausinamu NRPS genu (2 pav.): *Paenibacillus* sp. 23TSA30-6 optimaliomis sąlygomis didžiausias kopijų skaičius buvo pasiektas stacionario fazėje –  $4,9 \times 10^4$  kopijų, o sumažinto anglies kiekio sąlygomis daugiausia kopijų buvo gauta tranzicijos fazės metu –  $1,6 \times 10^5$  kopijų. *Paenibacillus* sp. 28ISP30-2 kamiene sumažinto anglies kiekio sąlygomis tranzicijos fazėje buvo pasiektas didžiausias kopijų skaičius, kuris tesiekė  $1,1 \times 10^5$  kopijų. Įprastomis anglies kiekio terpėje sąlygomis didžiausias kopijų skaičius buvo pasiektas stacionarioje fazėje ir siekė  $9,7 \times 10^4$  kopijų.

### *Paenibacillus* sp. 23TSA30-6



#### 2 pav.

Kiekybinė G5 pradmenų poros gausinamo geno raiškos analizė. 1,0xTSB – įprastas anglies kiekis terpėje, 0,5xTSB – sumažintas anglies kiekis terpėje.

Taip pat, analizuojant gautus duomenis su visais pradmenimis nebuvo pastebėta jokių atsikartojančių tendencijų: pavyzdžiui kopijų skaičius visais tirtais atvejais nebuvo didesnis esant sumažintam anglies kiekiui ar atvirkščiai, todėl būtų klaidinga teigti, kad sumažintas anglies kiekis terpėje paskatina genų raišką ar atvirkščiai, tačiau negalima atmesti ir to, kad galbūt mūsų pasirinktos sąlygos nėra pakankamos, kad iššauktų didesnę genų raišką. Taigi, šio tyrimo metu gauti duomenys yra naudingi siekiant toliau analizuoti NRPS ir PKS-NRPS genus.

---

## Literatūra

- [1] Ventola, C.L. (2015). The antibiotic resistance crisis: part 1: causes and threats. *P T Peer-Rev. J. Formul. Manag.* *40*, 277–283.
- [2] Ghosh, S., Kuisiene, N. (2017). The cave microbiome as a source for drug discovery: Reality or pipe dream? *Biochem. Pharmacol.* *134*, 18–34.
- [3] Wang, H., Fewer, D.P. (2014). Atlas of nonribosomal peptide and polyketide biosynthetic pathways reveals common occurrence of nonmodular enzymes. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* *111*, 9259–9264.
- [4] Stanišić, A., and Kries, H. (2019). Adenylation Domains in Nonribosomal Peptide Engineering. *ChemBioChem* *20*, 1347–1356.
- [5] Oliševska, S., Nickzad, A. (2019). *Bacillus* and *Paenibacillus* secreted polyketides and peptides involved in controlling human and plant pathogens. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* *103*, 1189–1215.
- [6] Grady, E.N., MacDonald, J. (2016). Current knowledge and perspectives of *Paenibacillus*: a review. *Microb. Cell Factories* *15*, 203.

**R. Lapickis,  
A. Paulauskas**

*Vytauto Didžiojo Universitetas*

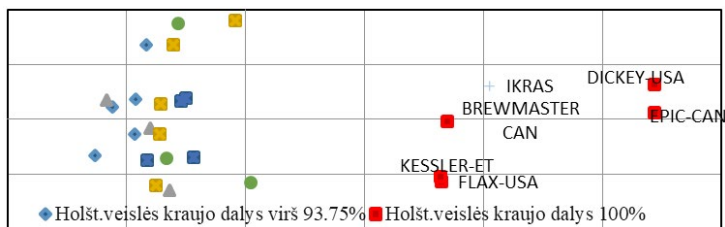
## **HOLŠTEINŲ VEISLĖS KRAUJO DALIŲ TURINČIŲ PIENINIŲ GALVIJŲ GENETINĖS ĮVAIROVĖS ANALIZĖ**

**Įvadas.** Genetinis variabilumas yra fundamentali biologinės įvairovės dalis. Selektivus veisimas ir genetinės manipuliacijos sparčiai pažengė per paskutinįjį šimtmetį. Žmonės naudoja šiuos įrankius krosbrydingui, kad pagerinti kitas veisles. Šie veiksmai lėmė, kad pagerintos veislės nustelbia vietines, todėl iškyla genetinio kintamumo grėsmė, kuri gali būti esminė tolimesnei veisimo konsolidacijai [1]. Ypač svarbu stebėti galvijų poravimąsi, kad išlaikyti genetiškai stabilias veisles. Dėl blogo monitoringo bei priežiūros gali gimti iš išvaizdos identiški tėvams, tačiau genetiškai skirtingi veršeliai. Dėl to gali nukentėti pieno kokybė, jo sudėtis (baltymų, riebalų santykis), bei pieno tūris. Atsižvelgiant į tai, mokslininkai tiria galvijų genetiką, kad kontroliuotų visus šiuos procesus. Lietuvos juodmargiai galvijai – pieninių galvijų veislė, išvesta kryžminant vietinius galvijus su Olandijos juodmargiais, Vokietijos juodmargiais, Švedijos juodmargiais [2]. Tam, kad pakeisti fenotipines savybes (pieno primilžį, sudėtį, galvijų reprodukciją ir kt.), vykdomos kitų galvijų veislių, pavyzdžiui Holšteiņų, genų krosbrydingas [3]. Fenotipinės ir reprodukcinės savybės skiriasi, priklausomai nuo genotipinio holšteinizacijos laipsnio (HF). Šiuo tyrimu buvo iširta Juodmargių galvijų genetinė įvairovė, skirta tolimesnei jų konsolidacijai vykdyti.

**Metodika.** Pieninių galvijų mėginiai: ausies kaušeliai ir spermos mėginiai buvo gauti iš Lietuvos juodmargių galvijų gerintojų asociacijos (LJGGA). Visi 26 individai buvo suskirstyti į grupes pagal Holšteiņų veislės kraujo grupes, tarp kurių yra 5 grynakraujai Holšteiņai ir vienas seno genotipo individas „IKRAS“, kurio Holšteiņų veislės kraujo dalis siekia 43,75%. Išskyrus DNR, buvo naudojama dauginė PGR su 13 fluorescuojančių mikrosatelitinių pradmenų. PGR atlikti buvo naudotas 15 μl reakcijos mišinys, kuriame yra 2μl išskirtos DNR, 2xPCRMix, pradmenų mišiniai, bei didistiliuotas vanduo. Po PGR, mėginiai buvo siunčiami į Lietuvos maisto ir veterinarijos rizikos vertinimo institutą Vilniuje, GMO skyrių, kur buvo atlikta kapiliarinė elektroforezė. Tam, kad atskirti pasikartojančių alelių dydžius skirtinguose lokusuose buvo naudojami du skirtingi interkoreliaciniai dažai 6FAM ir CY3 bei Gene Scan 500 LIZ DNR ilgio standartas (Applied Biosystems Ltd.). Genetinio variabilumo analizė atliekama panaudojant GeneMapper™ 4.0 Software (Thermofisher Scientific, № 4475073) programą, kur buvo įvertinami alelių dydžiai bei homozigotinė arba heterozigotinė forma skirtinguose pieninių galvijų individuose. Genetinės įvairovės parametrai: alelių skaičius, privačių ir dominuojančių alelių skaičius, principinių koordinatų analizė, genetinis atstumai pagal Nei (1973) bei veislių diferenciacija (FST) buvo apskaičiuoti,

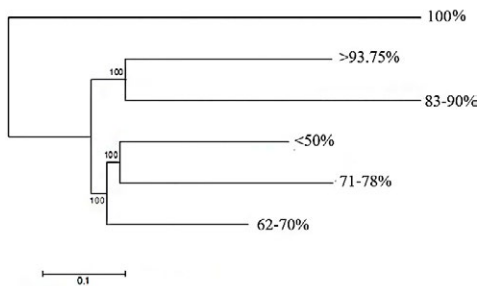
naudojant GeneA1Ex 6.501 programą [4]. Filogenetinių ryšių sudarymui buvo panaudotas Poptree2 paketas, Kaimynų apjungimo algoritmas (NJ) [5].

**Rezultatai ir jų aptarimas.** Pagrindinių koordinacinių analizė parodė, kad grupė su 43,75% (kodiniu pavadinimu "IKRAS") ir 100% Holšteinių veislės kraujo grupių veislės yra genetiškai nutolusios nuo kitų veislių grupių (1 pav.).



**1 pav.**  
Pieninių galvijų grupių pasiskirstymas dviejų pirmųjų pagrindinių komponentų (PK) ašyse (PK1 22,55% ir PK2 9,68%).

Pastebimas reikšmingas skirtumas, kuris aiškiai matomas vizualiai. Tai visiškai sutampa su Suh ir kt. (2014) „Factorinės korespondencijos“ atskirų galvijų mikrosatelitų genotipų analize, kur Holšteino veislė taip pat atsiskiria. Atlikus filogenetinio medžio analizę su Poptree2 sisteminiu paketu. (modifikuotas Kaimynų apjungimo algoritmas (*angl. Neighbour – Joining*)) matome, kad grupės pasiskirstė į tris pagrindinius klasterius. Pirmąjį klasterį sudarė 100% Holšteinių veislės kraujo dalis turinti grupė, kuri buvo labiausiai nutolusi nuo kitų pieninių galvijų veislių grupių. Tuo tarpu antrajam klasteriui priklausė 83-90% ir >93,75% Holšteinių veislės kraujo dalis turinčios grupės. Grupės, sudarančios 62-70%, 71-78% ir <50% Holšteinių veislės kraujo dalį, sudarė trečiąją sankaupą (2 pav.).



**2 pav.**  
Pieninių galvijų veislių filogenetinis medis, naudojant kaimynų apjungimo metodą (*angl. NJ*). Įkėlių (*angl. bootstrap*) reikšmės pavaizduotos virš medžio šakų, gautos panaudojant 1000 pakartojimų.

Ištyrus trylikos mikrosatelitinių lokusų alelių pasiskirstymą atskirose galvijų grupėse, nustatytas 251 skirtingas alelis. Mažiausias (35) skirtingų alelių skaičius buvo aptiktas grupėje turinčioje 100% Holšteinių veislės kraujo dalį, didžiausias (49) grupėje, kuri turi 71-78% Holšteinių veislės kraujo dalį. Daugiausia (26) dominuojančių alelių rasta iki 50% Holšteinių veislės kraujo dalių turinčioje grupėje, mažiausiai (13 ir 14) grupėse, sudarančiose 62-70%, 71-78%, 93,75% ir 100% Holšteinių veislės kraujo dalį. Privatūs aleliai rasti 5 iš 6 grupių (grupėje su 83-90% Holšteinių veislės kraujo

dalimi nebuvo rasta). Daugiausia unikalių alelių (10) buvo rasta 100% Holšteinų veislės kraujo dalį turinčioje grupėje, mažiausiai iki 50% Holšteinų kraujo dalių grupėje (4). Didžiausia genetinė distancija nustatyta tarp 100% ir virš 93,75% Holšteinų veislės kraujo dalis turinčių grupių (0,359), o genetiškai panašiausios yra 62-70% su 71-78%, iki 50% su 71-78% bei 83-90% su virš 93,75% Holšteinų kraujo grupių dalis turinčios veislės.

---

### Literatūra

- [1] Commission on genetic resources for food and agriculture. *The State Of The World's Animal Genetic Resources For Food And Agriculture In Brief*. FAO, Rome. 2007. 549.
- [2] Lietuvos ūkininkų gyvūnų genetinių išteklių apsaugos koordinavimo centras, 2015. *Senajo genotipo Lietuvos juodmargiai galvijai*.
- [3] Sorensen, M., Norberg K., Pedersen E. ir Christensen J., 2008. Invited review: Crossbreeding in dairy cattle: A Danish perspective. *J. Dairy Sci*, vol. 91, p. 4116–4128.
- [4] Peakall, R., Smouse P. E., 2012. GenALEx 6.5: Genetic analysis in Excel. Population genetic software for teaching and research-an update. *Bioinformatics*, vol 28, no. 19, p. 2537–2539.
- [5] Takezaki, N., Nei M. ir Tamura K., 2014. POPTREE2: Web version of Poptree for constructing population trees from allele frequency data and computing some other quantities. *Molecular Biology and Evolution*, vol. 31, no. 6, p. 1622–1624.

**R. Maleckaitė<sup>1</sup>,  
K. Daniūnaitė<sup>1,2</sup>**

*<sup>1</sup>Vilniaus Universitetas,  
Gyvybės mokslų centras,*

*Biomokslų Institutas, Vilnius*

*<sup>2</sup>Nacionalinis vėžio institutas, Vilnius*

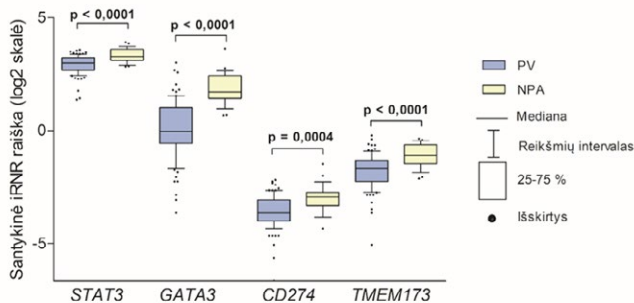
## IMUNINĖS SISTEMOS PATIKROS TAŠKŲ GENŲ RAIŠKOS REGULIACIJOS TYRIMAI PROSTATOS NAVIKUOSE

Prostatos vėžys – vis dar vienas mirtingiausių vėžio tipų pasaulyje nepaisant neblogai išvystytų chirurgijos ir gydymo priemonių. Amerikos vėžio draugijos duomenimis, Jungtinėse Amerikos Valstijose 2017 metais tai buvo antras pagal mirtingumą vėžys visose vyrų amžiaus grupėse ir sudarė apie 10 % visų mirčių nuo vėžio. Specialistai prognozuoja, kad šiemet bus nustatyta apie 192 tūkst. naujų prostatos vėžio atvejų JAV, o mirčių nuo prostatos vėžio padaugės iki 33 tūkstančių [1]. Diagnostikos pagerinimui pastaruoju metu atkreipiamas dėmesys į molekulinis žymenis, o vienas iš jų tipų – epigenetiniai žymenys – gali būti pritaikomi ne tik diagnostikoje, bet ir ligos prognostikoje ar predikcijoje.

Šiame tyrime nagrinėti imuninės sistemos patikros taškuose (IPT) dalyvaujantys genai yra už imuninę reakciją atsakantys neigiamos kontrolės sistemos elementai, kurie įprastu atveju apsaugo sveikas ląsteles. Tačiau bet kurio vėžio atveju imuninė sistema nusilpsta ir „išsiderina“ – sutrinka ir šių genų veikla, galimi jų raiškos pokyčiai, todėl organizmas nebegali aptikti vėžinių ląstelių ir jų sunaikinti. Šiuolaikinis vėžio gydymas ir naujausi tyrimai pastaruoju metu yra nukreipti į imunoterapiją, kai siekiama suaktyvinti ligonio imuninę sistemą pačią kovoti su vėžinėmis ląstelėmis. Šis gydymas dažniausiai paremtas IPT baltymų blokavimu taip priverčiant imunines T ląsteles aptikti vėžines ląsteles ir jas sunaikinti, nors yra vystomi ir kiti imunoterapijos būdai. Šio **tyrimo tikslas** buvo atlikti IPT dalyvaujančių genų raiškos analizę vėžiniuose ir nevēžiniuose prostatos audiniuose bei aptikti sąsajas tarp IPT genų kaip biožymenų ir ligos vystymosi eigos bei prognozuoti potencialų ligonių atsaką į imunoterapiją.

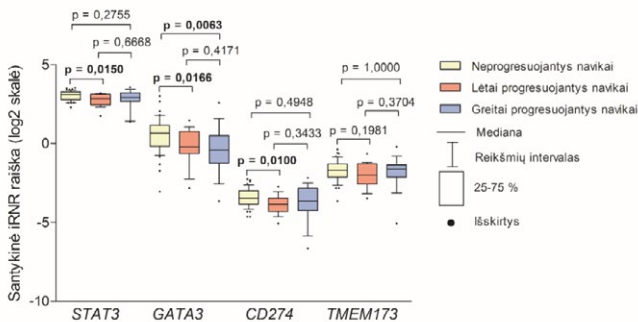
Tyrimo metu remiantis duomenų bazėse esančia informacija ir išanalizavus tarptautinio vėžio genomo analizės projekto (angl. The Cancer Genome Atlas, TCGA) prostatos navikų ir nevēžinių audinių PRAD imties duomenis buvo atrinkti keturi perspektyviausiai atrode genai. Atvirkštinės transkriptazės PGR metodu buvo kiekybiškai įvertinta *STAT3*, *GATA3*, *CD274* ir *TMEM173* genų raiška prostatos vėžiniuose (n = 80) ir nevēžiniuose (n = 25) audiniuose, o imtis sudaryta iš mėginių, turėjusių ilgą klinikinę istoriją.

Atlikus atvirkštinę realaus laiko PGR reakciją su *STAT3*, *GATA3*, *CD274* ir *TMEM173* genais buvo nustatyta, kad visų tirtų genų atvejais genų raiška nenavikiniuose prostatos audiniuose yra aukštesnė lyginant su raiška navikuose ir visais atvejais tai yra statistiškai patikima (visi p < 0,0500; 1 pav.)



**1 pav.**  
STAT3, GATA3, CD274 ir TMEM173 genų raiškos skirtumai navikiniuose ir nenavikiniuose prostatos audiniuose. Statistiškai patikimos vertės ( $p < 0,0500$ ) paryškintos.

Suskirsčius navikus pagal agresyvumo tipą – neprogresuojantys navikai ( $n = 45$ ), lėtai progresuojantys (biocheminė ligos progresija įvyksta lėčiau nei per 6 mėn.,  $n = 19$ ) ir greitai progresuojantys navikai (biocheminė ligos progresija įvyksta greičiau nei per 6 mėn.,  $n = 16$ ) buvo nustatyta, kad didžiausia tirtų genų raiška yra neprogresuojančiuose navikuose. STAT3, GATA3 ir CD274 genų atvejais raiška statistiškai patikimai skyrėsi tarp neprogresuojančių ir lėtai progresuojančių navikų (atitinkamai  $p = 0,0150$ ,  $p = 0,0166$ ,  $p = 0,0100$ , 2 pav.), o GATA3 geno atveju ir tarp neprogresuojančių ir greitai progresuojančių navikų – šio geno raiška neprogresuojančiuose navikuose buvo didesnė palyginus su greitai progresuojančiais navikais ( $p = 0,0063$ ). TMEM173 geno atveju raiškos skirtumų tarp skirtingo agresyvumo navikų nebuvo nustatyta (visi  $p > 0,0500$ ).

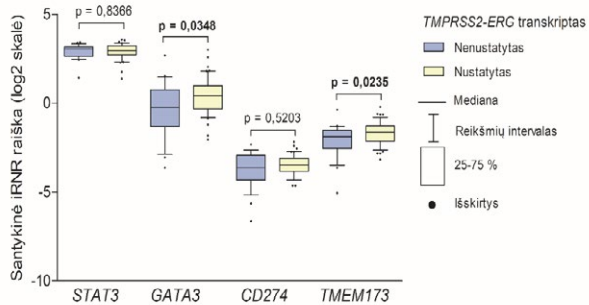


**2 pav.**  
STAT3, GATA3, CD274 ir TMEM173 genų raiškos skirtumai tarp skirtingo agresyvumo prostatos navikų. Statistiškai patikimos vertės ( $p < 0,0500$ ) paryškintos.

Navikuose, kuriuose buvo aptiktas sulietinis *TPRS2-ERG* transkriptas, gana dažnai nustatomas prostatos vėžio atveju, GATA3 ir TMEM173 genų atvejais raiška buvo statistiškai patikimai didesnė lyginant su navikais, kuriuose šio sulietinio transkripto aptikta nebuvo (atitinkamai  $p = 0,0348$  ir  $p = 0,0235$ ; 3 pav.), bet STAT3 ir CD274 genų atvejais statistiškai patikimų skirtumų tarp šių grupių užfiksuota nebuvo (visi  $p > 0,0500$ ). Atlikus biocheminės ligos progresijos analizę pagal STAT3, GATA3, CD274 ir TMEM173 genų raišką buvo nustatyta, kad aukšta arba žema tirtų genų raiška biocheminei ligos progresijai įtakos neturi (visi  $p > 0,0500$ ).



**3 pav.**  
 STAT3, GATA3, CD274 ir  
 TMEM173 genų raiškos skirtumai  
 grupėse, kuriose *TMPRSS2-ERG*  
 transkriptas buvo nustatytas/  
 nenustatytas. Statistiškai patikimos  
 vertės ( $p < 0,0500$ ) paryškintos.



Gauti rezultatai rodo, kad šie biožymenys nėra patys tinkamiausi prognozuoti prostatos vėžio vystymosi eigą. Visgi, literatūros analizė rodo, kad sumažėjusi *GATA3* geno raiška gali būti atstatoma gydant prostatos vėžio ligočius morinu arba ir paklitakseliu (chemoterapinis vaistas) per miR-155 raiškos inhibitoriją, kuri tiesiogiai valdo *GATA3*. Morinas pagerina prostatos vėžio ląstelių chemojautrumą paklitakseliui ir gali būti naudojamas kaip dar viena vėžio gydymo priemonė šalia tradicinės medicinos [2]. Imunoterapiniai tyrimai parodė, kad STING baltymas, koduojamas *TMEM173* geno, yra itin svarbus vėžio gydyme. STING (arba jo pagrindu susintetintų agonistų) aktyvacija būtina vėžinių ląstelių mirčiai, antinavikiniam imunoatsakui, T ląstelių aktyvumui sukelti [3]. Todėl esant žemai *TMEM173* geno raiškai prostatos navikinėse ląstelėse kaip buvo nustatyta šio tyrimo metu gali būti naudojami vaistai, kurie padidina STING raišką ir padeda suardyti vėžines ląsteles.

### Literatūra

- [1] Siegel RL, Miller KD, Jemal A. *A Cancer Journal for Clinicians*, 2020, 70, p. 7-30.
- [2] Li B, Jin X, Meng H, et al. *Oncotarget*, 2017, 8(29), p. 47849-47860.
- [3] Zhu Y, An X, Zhang X, Qiao Y, Zheng T, Li X. *Molecular Cancer*, 2019, 18(1), p. 152.

**U. Meškauskaitė<sup>1</sup>,  
V. Tatarūnas<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup> Lietuvos sveikatos mokslų  
universitetas, Medicinos fakultetas*

*<sup>2</sup> Lietuvos sveikatos  
mokslų universitetas,  
Kardiologijos institutas*

## **TIKAGRELORO POVEIKIS ŽMOGAUS IR MIKROORGANIZMO LĄSTELĖMS**

**Ivadas.** Lietuvoje, kaip ir visame pasaulyje, kraujotakos sistemos ligos yra viena dažniausių mirties priežasčių. Remiantis 2019 m. Higienos instituto duomenimis, kraujotakos sistemos ligos Lietuvoje sudarė net 54,6 % visų mirties atvejų [1, 2]. Dažniausiai kraujotakos sistemos ligas sukelia aterosklerozė ir po jos įvykstanti arterijų trombozė.

Arterijų trombozės gydymui ir prevencijai skiriami kraujo krešėjimą slopinantys vaistai – antiagregantai (tikagreloras, klopidoogrelis, prasugrelis). Klinikinėje praktikoje dažniausiai skiriami adenozindifosfato (ADP, P2Y12) receptorių blokuojantys vaistai, derinyje su aspirinu. Tikagreloras tiesiogiai ir grįžtamai jungiasi prie trombocitų membranose esančių P2Y12 receptorių, taip užblokuodamas ADP prisijungimą ir neleisdamas indukuoti trombocitų agregacijos [3]. Nors tikagrelorui nebūtina metabolinė aktyvacija, tačiau dalyvaujant citochromo P450 (CYP450) šeimos fermentams, vaistas transformuojamas į metabolitus, iš kurių aktyvus yra tik AR-C124910XX metabolitas [4]. Priklausomai nuo CYP450 fermentų aktyvumo gali skirtis tikagreloro poveikis žmogui.

Aterosklerozės progresavime ypač svarbus arachidono rūgšties (ARA) metabolitas 20-hidroksieikozatetraeno rūgštis (angl. *20-hydroxyeicosatetraenoic acid*, 20-HETE). Šis junginys pasižymi vazokonstrikinėmis ir uždegimą skatinančiomis savybėmis. Žmogaus organizme 20-HETE sintezę atlieka CYP450 šeimos fermentai: CYP4A11, CYP4F3 ir CYP4F2 [5]. Šių fermentų vykdomas ARA metabolizmas organizme aptinkamas įvairiuose organuose, pvz., kepenyse, inkstuose, plaučiuose, smegenyse, širdyje bei kraujagyslėse [6]. Nustatyta, jog būtent CYP4F2 fermentas yra pagrindinis už 20-HETE sintezę atsakingas fermentas žmogaus inkstuose, o kraujagyslėse 20-HETE biosintezė vykdoma lygiųjų raumenų ląstelėse [7, 8]. Esant patologinėms sąlygoms ir padidėjusiai 20-HETE koncentracijai skatinama audinių pažeida, endotelio disfunkcija, uždegimas, aterosklerozė, hipertenzija, didėja kraujotakos sistemos ligų ir arterijų trombozių rizika [9, 10, 11].

Iki šiol mažai žinoma apie antiagreganto tikagreloro poveikį mikroorganizmams. Neseniai atlikto tyrimo metu nustatyta, jog tikagreloras ir jo aktyvus metabolitas turėjo antibakterinį poveikį antibiotikams atsparioms Gram teigiamoms bakterijoms. Tačiau tikagreloro bei jo metabolito antibakterinis poveikis nėra plačiai tirtas, o veikimo mechanizmas dar nėra žinomas [12].

Tyrime buvo siekiama iširti naujos kartos antiagreganto tikagreloro poveikį žmogaus endotelio ląstelėms ir mikroorganizmams. Šiam tikslui pasiekti skirtingomis tikagreloro koncentracijomis paveiktose endotelio ląstelėse buvo vertintas už ARA metabolizmą atsakingo *CYP4F2* geno raiškos pokyčiai bei nustatytas *CYP4F2* baltymo kiekis. Antiagreganto poveikis mikroorganizmams vertintas tiriant tikagreloro antimikrobinį poveikį trečios kartos cefalosporinams atsparioms *Escherichia coli* bakterijoms.

**Tikslas** – nustatyti tikagreloro poveikį endotelio ląstelėms ir mikroorganizmams.

**Metodika.** Tyrimams naudota komercinė žmogaus virkštelės venos endotelio ląstelių kultūra (HUVEC) ir trečios kartos cefalosporinams atsparios *E. coli* bakterijos. Skirtingomis tikagreloro (*Brilique* 90 mg, *AstraZeneca*, Mölndal, Sweden) koncentracijomis (0,5, 1, 2, 3 ir 5  $\mu$ M) paveiktos HUVEC ląstelės inkubuotos 24 val. ir naudotos tolimesniuose tyrimuose. Visuminė RNR iš ląstelių suspensijos išskirta komerciniu *mirVana™ miRNA Isolation Kit* rinkiniu (*Invitrogen*, JAV), vadovaujantis gamintojo rekomendacijomis. Visuminės RNR koncentracija ir švarumas nustatyti spektrofotometru *NanoDrop 2000*. Kopijinės DNR sintezė atlikta naudojant *High-Capacity cDNA Reverse Transcription Kit* (*Thermo Fisher Scientific*, JAV) rinkinį, pagal gamintojo rekomendacijas. Geno taikinio raiška po poveikio tikagreloru įvertinta kiekybine tikro laiko PGR reakcija (TL-PGR). TL-PGR atlikta naudojant *Maxima SYBR Green/ROX qPCR Master Mix (2X)* (*Thermo Fisher Scientific*, JAV) reakcijos mišinį ir *CYP4F2* sekai specifinius pradmenis. Kaip endogeninė kontrolė rezultatų normalizavimui naudotas referentinis transferino receptoriaus (*TFRC*) genas. Rezultatai įvertinti  $2^{-\Delta\Delta CT}$  metodu.

*CYP4F2* fermento koncentracija HUVEC ląstelių lizatuose nustatyta naudojant komercinį ELISA rinkinį *Enzyme-linked Immunosorbent Assay Kit For Cytochrome P450 4F2 (CYP4F2)* (*Cloud-Clone Corp.*, JAV), remiantis gamintojo rekomendacijomis. *CYP4F2* baltymo kiekio pokyčiai nustatyti lyginant tikagreloru paveiktų ląstelių baltymo kiekį su neigiamos kontrolės tiriamųjų ląstelių lizatų baltymo kiekiu.

Tikagreloro poveikis trečios kartos cefalosporinams atsparioms *E. coli* bakterijoms vertintas antibiogramos (diskų difuzijos) metodu. Tyrime naudoti antibiotikai: cefotaksimas (30  $\mu$ g, trečios kartos cefalosporinas), ceftazidimas (30  $\mu$ g, trečios kartos cefalosporinas) ir cefepimas (30  $\mu$ g, ketvirtos kartos cefalosporinas). *E. coli* bakterijos parą kultivuotos Miulerio-Hintono (MH) buljono mitybinėje terpėje (neigiama kontrolė), MH terpėje su tikagreloru (galutinė koncentracija terpėje 0,5  $\mu$ M), MH terpėje su antibiotikais, ir MH terpėje su tikagreloru (galutinė koncentracija terpėje 0,5  $\mu$ M) ir antibiotikais. Rezultatai įvertinti ir palyginti tarpusavyje išmatavus inhibicijos zonas.

Statistinė duomenų analizė atlikta naudojant *IBM SPSS Statistics V26* ir *GraphPad Prism V8* programinį paketą. Tiriamųjų nepriklausomų grupių duomenų pasiskirstymas pagal normalųjį skirstinį įvertintas atliekant *Shapiro-Wilk* normalumo testą. Grupėms netenkinant normalumo prielaidos, skirtumams tarp dviejų nepriklausomų grupių vertinti buvo taikytas neparamestrinis *Mann-Whitney U* testas. Skirtumai tarp tiriamųjų grupių laikomi statistiškai reikšmingais, kai  $p < 0,05$ .

**Rezultatai.** Tyrimo metu, pasitelkiant TL-PGR metodą, įvertinta *CYP4F2* geno raiškos pokyčiai skirtingomis tikagreloro koncentracijomis veiktose HUVEC ląstelėse. Nustatytas statistiškai reikšmingas nuo vaisto koncentracijos priklausantis *CYP4F2* geno raiškos mažėjimas, palyginus su kontrolinėmis vaistu neveiktomis ląstelėmis (1 lentelė).

**1 lentelė.** *Geno taikinio CYP4F2 raiškos pokyčiai ( $\Delta Ct$ ) paveikus 0,5, 1, 2, 3 ir 5  $\mu M$  tikagreloru HUVEC ląstelėse, palyginus su kontrolinėmis ląstelėmis, po 24 val.*

Tiriamasis mėginys	CYP4F2 $\Delta Ct$ pokytis		Raiškos pokytis kartais, PK ( $\pm$ standartinis nuokrypis, SN)	p reikšmė
	Mediana	Minimali–maksimali reikšmė		
Kontrolė	15,7	14,2–15,9	1,109 ( $\pm$ 0,669)	-
0,5 $\mu M$ tikagreloras	16,2	15,5–16,9	0,654 ( $\pm$ 0,276)	0,240
1 $\mu M$ tikagreloras	16,3	15,6–16,8	0,624 ( $\pm$ 0,201)	0,041
2 $\mu M$ tikagreloras	16,5	15,7–16,9	0,578 ( $\pm$ 0,120)	0,026
3 $\mu M$ tikagreloras	16,3	15,8–17,5	0,582 ( $\pm$ 0,245)	0,032
5 $\mu M$ tikagreloras	17,0	15,8–18,0	0,417 ( $\pm$ 0,213)	0,009

CYP4F2 fermento koncentracija tikagreloru veiktose HUVEC ląstelių lizatuose nustatyta ELISA metodu. Palyginus su kontrolinėmis vaistu neveiktomis ląstelėmis, pastebėta statistiškai reikšminga atvirkštinė CYP4F2 baltymo koncentracijos priklausomybė nuo vaisto koncentracijos – didėjant tikagreloro koncentracijai, CYP4F2 fermento koncentracija mažėja (2 lentelė).

Ivertinus tikagreloro poveikį trečios kartos cefalosporinams atsparioms *E. coli* bakterijoms statistiškai reikšmingų rezultatų tarp tiriamųjų grupių nebuvo nustatyta.

**2 lentelė.** *CYP4F2 baltymo koncentracijos pokyčiai paveikus 0,5, 1, 2, 3 ir 5  $\mu M$  tikagreloru HUVEC ląstelėse, palyginus su kontrolinėmis ląstelėmis, po 24 val.*

Tiriamasis mėginys	CYP4F2 koncentracijos mediana ng/ml	CYP4F2 koncentracijos minimali–maksimali reikšmė ng/ml	p reikšmė
Kontrolė	41,9	9,40–42,9	-
0,5 $\mu M$ tikagreloras	20,6	6,65–23,3	0,039
1 $\mu M$ tikagreloras	18,0	6,15–22,7	0,045
2 $\mu M$ tikagreloras	19,5	7,00–25,4	0,041
3 $\mu M$ tikagreloras	18,2	5,20–25,4	0,043
5 $\mu M$ tikagreloras	16,5	5,45–20,9	0,036

### Išvados.

1. Paveikus naujos kartos antiagregantų tikagreloru CYP4F2 geno raiška ir CYP4F2 baltymo koncentracija HUVEC ląstelėse mažėjo priklausomai nuo vaisto koncentracijos.
2. Tikagreloro antimikrobinis poveikis trečios kartos cefalosporinams atsparioms *E. coli* bakterijoms nenustatytas.

### Literatūra

- [1] World Health Organization. The top 10 causes of death [Internete]. 2018 gegužės 24 [citauta 2020 birželio 23]. Interneto prieiga: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/the-top-10-causes-of-death>.
- [2] Higienos institutas, Sveikatos informacijos centras. Mirties priežastys 2019 (išankstiniai duomenys) [Internete]. 2020 [citauta 2020 birželio 23]. Interneto prieiga: <http://hi.lt/lt/mirties-priezastys.html>.
- [3] Vidal S.G.M., Ruland S. Platelet antiaggregants in stroke prevention. *Neurol Clin*, 2013, 31(3), p. 633-57.

- [4] Adamski P., Buszko K., Sikora J., Niezgoda P. et al. Metabolism of ticagrelor in patients with acute coronary syndromes. *Scientific Reports*, 2018, 8(1), p. 1-8.
- [5] Fan F., Roman R.J. Effect of cytochrome P450 metabolites of arachidonic acid in nephrology. *J Am Soc Nephrol*, 2017, 28(10), p. 2845-55.
- [6] Wu C.C., Gupta T., Garcia V., Ding Y., Schwartzman M.L. 20-HETE and blood pressure regulation: clinical implications. *Cardiol Rev*, 2014, 22(1), p. 1-12.
- [7] Lasker J.M., Chen W.B., Wolf I., Blowski B.P. et al. Formation of 20-hydroxyeicosatetraenoic acid, a vasoactive and natriuretic eicosanoid, in human kidney. Role of CYP4F2 and CYP4A11. *J Biol Chem*, 2000, 275(6), p. 4118-26.
- [8] Chen L., Joseph G., Zhang F.F., Nguyen H., Jiang H., Gotlinger K.H. et al. 20-HETE contributes to ischemia-induced angiogenesis. *Vascul Pharmacol*, 2016, 83, p. 57-65.
- [9] Kubisa M.J., Jezewski M.P., Gasecka A., Siller-Matula J., Postula M. Ticagrelor – toward more efficient platelet inhibition and beyond. *Ther Clin Risk Manag*, 2018, 18, p. 129-40.
- [10] Imig J.D. Epoxyeicosatrienoic acids and 20-hydroxyeicosatetraenoic acid on endothelial and vascular function. *Adv Pharmacol*, 2017, 77, p. 105-41.
- [11] Christmas P. Role of cytochrome P450s in inflammation. *Adv Pharmacol*, 2015, 74, p. 163-92.
- [12] Lancellotti P, Musumeci L, Jasques N et al. Antibacterial activity of ticagrelor in conventional antiplatelet dosages against antibiotic-resistant Gram-positive bacteria. *JAMA Cardiol*, 2019, 4(6), p. 596-99.

**D. Narauskaitė<sup>1</sup>,**  
**A. Jekabsone<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Kauno technologijos universitetas*

<sup>2</sup> *Lietuvos sveikatos*

*mokslų universitetas,*

*Farmacinių technologijų institutas*

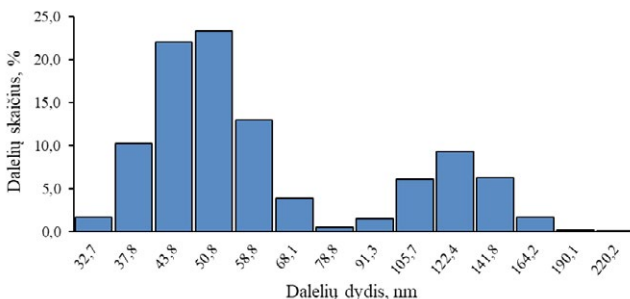
## **POLI I:C VEIKIAMŲ KVĖPAVIMO TAKŲ EGZOSOMŲ REIKŠMĖ SMEGENŲ LĄSTELIŲ IMUNO-METABOLIZMUI**

**Ivadas.** Viršutinių kvėpavimo takų virusinės infekcijos yra vieni dažniausių infekcinių susirgimų [1]. Dažniausiai tokios infekcijos veikia lokaliai vieną organą ar audinį, tačiau kartais kai kurie infekcijas sukeltantys veiksniai gali būti pernešami į kitus organizmo organus ar audinius ląstelių pūslelinės komunikacijos būdu [2]. Egzosomos – nano dydžio ląstelių išskiriamos pūslelės, svarbios tarpląstelinei komunikacijai: nereikalingų molekulių pašalinimui ar medžiagų pasikeitimui tarp ląstelių [3]. Cirkuliuodamos įvairiuose skysčiuose organizme pūslelės gali sukelti ne tik lokalų poveikį, bet ir sisteminį. Žinoma, kad egzotosomos gali pereiti kraujo-smegenų barjerą [5, 6], todėl tikėtina, kad jos gali pernešti į smegenis uždegiminius procesus inicijuojančius veiksnius ir prisidėti prie neurouždegiminių procesų, kurie turi reikšmės vystantys neurodegeneraciniams susirgimams, susidarymo. Tačiau virusų veikiamų kvėpavimo takų ląstelių egzosomų reikšmė smegenų ląstelėms iki šiol tirta nebuvo. Neurouždegiminiams procesams yra būdingas ląstelių metabolizmo persitvarkymas iš mitochondrinio į glikolitinį, inflamasiškas aktyvinimas ir uždegiminių veiksnių raiškos padidėjimas. Šie trys veiksniai buvo vertinami atliekant projekto veiklas.

**Metodika.** Visų pirma, kvėpavimo takų epitelio ląstelės (KTEL) buvo kultivuojamos ir veikiamos viruso mimetiku poli I:C. Vėliau iš ląstelių kultūrų terpės polietilenglikolio tirpalu buvo nusodinamos egzotosomos. Buvo ruošiami dviejų tipų egzosomų preparatai: kontrolinis, iš sveikų KTEL išskirtos egzotosomos, ir stimuliuotas, iš poli I:C seka veiktų KTEL išskirtos egzotosomos. Egzosomų preparatai buvo charakterizuoti pagal dalelių dydį dinaminės šviesos sklaidos metodu analizatoriumi *Zetasizer Nano-ZS* (Malvern Instruments Ltd, Jungtinė karalystė), taip pat preparatuose buvo nustatomi egzosominiai žymenys CD9 ir CD63 ELISA metodu, naudojant komercinius reagentų rinkinius (MyBioSource, Kanada). Gautais egzosomų preparatais buvo veikiamos mikroglijos ląstelės. Palyginimui eksperimentai atlikti ir su neveiktomis, kontrolinėmis mikroglijos ląstelėmis, taip pat tiesiogiai poli I:C seka veiktomis mikroglijos ląstelėmis. Fluorescencinės mikroskopijos metodu buvo vertinamas KTEL egzosomų patekimas į mikroglijos ląsteles, egzotosomas nudažant fluorescuojančiais dažais BLOCK-iT™ Alexa Fluor® Red Fluorescent Control, kurie konjuguoti su Alexa Fluor® 555. Kad dažas pereitų lipidinę egzosomų membraną buvo naudojamas transfekcijos reagentas lipofekcinis RNAiMAX. Fluorescencinė mikroskopija taikyta ir mikroglijos gyvybingumo vertinimui po poveikio egzosomų preparatais, nudažant ląstelių branduolius *Hoescht 33342* ir propidžio jodidu, kurie sąveikauja su DNR, esančia ląstelių branduoliuose.

Hoescht 33342 dažas patenka į visų ląstelių branduolius, o propidžio jodidas – tik į pažeistų, t. y. nekrozių, praradusių membranos intaktiškumą. Gyvybingų branduolių skaičius išreiškiamas procentaliai nuo bendro ląstelių skaičiaus. Mitochondrijų kvėpavimo grandinės ir glikolizės aktyvumo įvertinimas ląstelėse atliktas *Seahorse XFP* (Agilent Technologies Inc., JAV) analizatoriumi, naudojant *Mitostress* testą ir dirbant pagal gamintojo nurodytą protokolą. Analizatoriumi įvertinamas deguonies koncentracijos ir pH pokyčiai ląstelių terpėje realiu laiku, kurie yra automatiškai apskaičiuojami analizatoriaus ir pateikiami kaip deguonies suvartojimo greičio pmol/min (angl. *Oxygen Consumption Rate*, OCR) ir tarpląstelinio rūgštėjimo greičio mPH/min (angl. *Extracellular acidification rate*, ECAR) vertės, kurios leidžia nustatyti kinetinius ląstelių metabolizmo duomenis. Gauti OCR ir ECAR duomenys analizuojami kompiuterine programa *Wave 2.6.1*. Kaspazės-1 aktyvumas mikroglijos ląstelėse vertintas liuminescencijos metodu plokštelių skaitytuvu *Infinite 200 PRO* (Tecan, Šveicarija), naudojant *Caspase-Glo 1 Inflammasome Assay G9951* (Promega Corporation, JAV) reagentų rinkinį ir dirbant pagal gamintojo nurodytą protokolą. Taip pat buvo įvertinta uždegiminių genų raiška mikroglijos ląstelėse, tam tikslui iš ląstelių buvo išskiriama RNR, kuri atvirkštinės transkriptazės metu buvo verčiama į kopijinę DNR (kDNR) naudojant *TaqMan™ Advanced miRNA cDNA Synthesis Kit* ir dirbant pagal gamintojo protokolą. Gauti mėginiai naudojami tikro laiko polimerinei grandinei reakcijai atlikti naudojant *TaqMan* zondus. Gauti tyrimų rezultatai analizuojami naudojant *Applied Biosystems 7500 Fast Real-Time PCR System* programinę įrangą *Soft-ware v2.0*. Statistinė kiekybinių eksperimentų duomenų analizė atlikta *IBM SPSS Statistics 20* programiniu paketu. Vertinti kiekvieno eksperimento pakartojimų ( $n=3-10$ ) vidurkiai, naudojant vienkryptę dispersinę ANOVA analizę, taikant *LSD Post Hoc* testą. Duomenys laikomi statistiškai reikšmingais, kai  $p<0,05$ .

**Rezultatai.** Siekiant iširti dalelių pasiskirstymą pagal dydį iš KTEL kultūrų terpių išskirtų egzosomų preparatuose, jie buvo tiriami dalelių analizatoriumi *Zetasizer*. Visų tirtų mėginių dalelių dydis ir pasiskirtymas buvo panašus. Rezentaciniai poli I:C seka stimuliuotų KTEL egzosomų preparatų analizės rezultatai pateikti 1 paveiksle.



**1 pav.**

Dalelių dydžio ir pasiskirstymo histograma poli I:C seka stimuliuotų KTEL egzosomų preparate

Iš pateiktų duomenų matoma, kad preparate esančių dalelių dydis svyruoja nuo 32 iki 220 nm. Daugiausia 37–58 nm dydžio dalelių. Literatūroje pažymima, kad egzosomų dydis yra nuo 30 iki 150 nm [7]. Ja remiantis galima teigti, kad beveik visos tirtame egzosomų preparate esančios dalelės gali būti priskiriamos egzosomoms. ELISA metodu egzosomų preparatuose buvo nustatyti pagrindiniai egzosomų membranos baltymai – tetraspaninai CD63 ir CD9, patvirtinantys, kad išskirtos dalelės yra egzosomos. Įvertinus KTEL egzosomų patekimą į mikrogliją pastebėta, kad jos

internalizuojamos per 30 min, o jų turinys išlieka sutelktas pūslelėse, todėl remiantis literatūra, galime manyti, jog jos pateko tiesioginiu būdu [8, 9]. Tyrimų metu nustatyta, kad mikroglijos ląstelių, po poveikio egzozomų preparatais, gyvybingumas reikšmingai nepasikeitė. Paveikus poli I:C seka stimuliuotomis kvėpavimo takų ląstelių egzozomomis mikroglijos ląstelių metabolizmas persitvarko panašiai, kaip ir paveikus tiesiogiai poli I:C seka: susilpnėja bazinis ir maksimalus mitochondrijų kvėpavimas, ir suintensyvėja glikolizė, nes mažėja OCR ir didėja ECAR vertės. Mikroglijos ląstelėse, veikiamose poli I:C stimuliuotomis kvėpavimo takų egzozomomis, kaspazės-1 aktyvumas buvo du kartus didesnis, lyginant su egzozomomis neveikta ląstelių kontrole ir siekė panašų lygį, kaip tiesiogiai poli I:C seka veiktose mikroglijos ląstelėse. Nestimuluotų kvėpavimo takų ląstelių egzozomos kaspazės-1 aktyvumui mikroglijos ląstelėse įtakos neturėjo. Preliminarūs genų raiškos tyrimų rezultatai leidžia manyti, kad KTEL egzozomos gali turėti reikšmės mikroglijos ląstelių su uždegimu susijusių genų raiškai, tačiau galutinėms išvadoms pateikti reikalingi tolimesni genų raiškos tyrimai.

---

### Literatūra

- [1] Heikkinen, T., RUUSKANEN, O. *Upper Respiratory Tract Infection, Encyclopedia of Respiratory Medicine*, Elsevier Inc., 2006, 385–388.
- [2] Wahlund, J. E. C., Eklund, A., Grunewald, J., Gabrielsson, S. *Frontiers in Cell and Developmental Biology*, 2017, 5 (39), 1–8.
- [3] Beach, A., Zhang, H-Ge., Ratajczak, Z. M., Kakar, S. S. *Journal of Ovarian Research*. 2014, 7, 14.
- [4] Zhu, M., et al. *Small*, 2012, 8 (3), 404–412.
- [5] Balusu, S., et al. *EMBO Molecular Medicine*, 2016, 8 (10), 1162–1183.
- [6] Alvarez-erviti, L., et al. *Nature Biotechnology*, 2011, 29 (4), 341–345.
- [7] Théry, C., Ostrowski, M., Segura, E. *Nature reviews. Immunology*. 2009, 9, 581–593.
- [8] Koniusz, S., et al. *Frontiers in Cellular Neuroscience*, 2016, 10.
- [9] Meckes, G. D., Raab-Traub, N. *Journal of Virology*, 2011, 85 (24), 12844–12854.



**K. Normantaitė<sup>1</sup>,  
K. Sužiedėlis<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> *Vilniaus universitetas*  
<sup>2</sup> *Nacionalinis vėžio institutas*

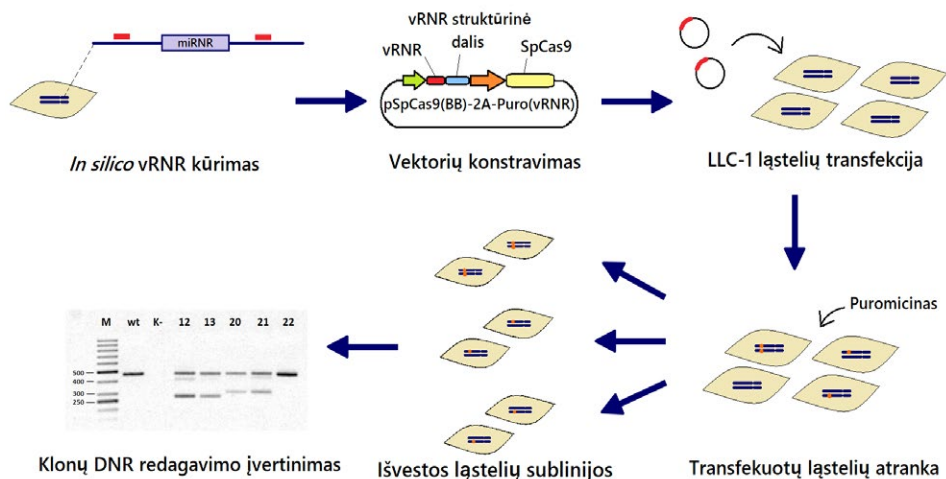
## **GENOMO REDAGAVIMAS METASTAZAVIMO PROCESO MOLEKULINEI ANALIZEI**

Metastazių formavimasis yra pagrindinė su onkologine liga susijusi mirties priežastis. Galimybė anksti diagnozuoti piktybinio proceso progresavimą prieš formuojantis metastazėms padarytų vėžio gydymą efektyvesnį, tačiau tam reikalingas potencialių molekulių žymenų, būdingų skirtingiems vėžinių ląstelių metastazavimo etapams, identifikavimas. Per pastarąjį dešimtmetį, žymiai išaugo duomenų kiekis apie mikro RNR (miRNR) molekulių svarbų vaidmenį onkogenezeje [1]. Vėžinių susirgimų atveju dažnai naviko ląstelėse aptinkama sumažėjusi arba padidėjusi miRNR raiška. Yra parodyta, jog miRNR raiškos profiliai yra susiję su naviko vystymusi, progresavimu, metastazavimu ir atsaku į gydymą. Taip pat, su vėžiu susiję miRNR raiškos profiliai koreliuoja su ligos stadija ir paciento išgyvenamumu, todėl yra potencialūs diagnostiniai žymenys, į kuriuos atsižvelgiant galima kurti naujas terapijos strategijas įvairių vėžinių susirgimų atvejais [2].

VU GMC Biomokslų institute ir Nacionaliniame vėžio institute jau atliktų tyrimų rezultatai leido suformuoti potencialiai su pelės plaučių vėžinės linijos LLC-1 ląstelių metastazavimu susijusių miRNR sąrašą [3]. Vadovaujantis šiuo sąrašu, bakalauro darbo rengimo bei studento vasaros praktikos metu buvo atlikta bioinformatinė miRNR genų-taikinių analizė ir parinkta devyniolika su vėžinių ląstelių metastazavimu potencialiai susijusių miRNR, atrinkta 108 LLC1 linijos ląstelių sublinijos, molekuliniais metodais modifikuotų tam, kad pasižymėtų padidintu genomo redagavimo potencialu genomo srityse, koduojančiose parinktas potencialiai su metastazavimu susijusias miRNR. Šio projekto metu buvo siekiama bioinformatinės analizės ir molekuliniais metodais charakterizuoti anksčiau ir naujai (šiam projekte) atrinktas LLC-1 sublinijas, pasižyminčias genomo redagavimu genomo srityse, koduojančiose su vėžinių ląstelių metastazavimu potencialiai susijusias miRNR.

Iš bioinformatiniais metodais nustatytų devyniolikos potencialiai su vėžinių ląstelių metastazavimu susijusių miRNR tolimesnei funkicinei analizei buvo pasirinktos trys molekulės. Šiame darbe aprašomi eksperimentai buvo atliekami pagal 1 pav. pateiktą schemą. Siekiant pelės genome išveiklinti pasirinktų miRNR genų raišką reikalingas CRISPR/Cas9 redagavimo įrankis. Vedlė RNR (vRNR), kurią sudaro taikiniui komplementari seka ir struktūrinė dalis, nukreipia Cas9 nukleazę į taikinio DNR. Naudojant Benchling CRISPR design įrankį buvo sumodeliuoti 24-25 bp oligonukleotidai, koduojantys vRNR turinčias didžiausią tikimybę nukreipti Cas9 baltymą į taikinio sritis. Šie DNR fragmentai buvo įklonuoti į plazmidę pSpCas9(BB)-2A-Puro, kuri turi CRISPR/Cas9 redagavimo sistemos komponentus (Cas9 baltymą ir vRNR struktūrinę dalį) koduojančius genus [4].

Sukonstruotais vektoriais transfektuotos pelių (*Mus musculus*) plaučių karcinomos ląstelės LLC-1, naudojant keturias vRNR kombinacijas. Kadangi šiuose vektoriuose taip pat koduojamas atsparumo antibiotikui puomicinui genas, jį naudojant buvo atlikta transfektuotų ląstelių atranka. Ląstelių klonų sublinijos išvestos skiedimo metodu. Naudojant tuos pačius metodus ankstesnių tyrimų metu buvo išvestos LLC-1 ląstelių sublinijos, pasižyminčios genomo redagavimu dar dvi miRNR koduojančiose srityse. Kiekvienos sublinijos DNR redagavimas buvo įvertintas PGR metodu, padauginant fragmentą, kuriame turi vykti delecija. Gauti rezultatai parodė, kad genomo redagavimui LLC-1 ląstelėse naudojant CRISPR/Cas9 sistemą, galima sukurti ląstelių sublinijas, pasižyminčias monoalelinėmis ir bialelinėmis pasirinktas miRNR koduojančių fragmentų delecijomis.



### 1 pav.

Eksperimento miRNR genų išveiklinimui schema. Bioinformatinių įrankių pagalba sukuriama vRNR sekos. Susintetintos vRNR klonuojamos į pSpCas9(BB)-2A-Puro vektorių. Gauti konstruktai transfekuojami į ląsteles, atliekama transfektuotų ląstelių atranka, skiedimo metodu išvedamos ląstelių sublinijos. DNR redagavimas įvertinamas PGR metodu.

Tikro laiko PGR reakcijų rezultatai parodė, kad genomo redagavimas vieną iš pasirinktų miRNR koduojančioje srityje reikšmingai sumažina šios miRNR raišką LLC-1 ląstelėse. Tyrimo metu nustatyta, kad LLC-1 ląstelių genomo redagavimas šią miRNR koduojančioje srityje sukelia reikšmingus proliferacijos ir ląstelių ciklo pokyčius – ląstelių proliferacija slopinama, ląstelės kaupiasi S fazėje. Taip pat pademonstruota, jog LLC-1 ląstelių, pasižyminčiu redaguotu genomu šią miRNR koduojančioje srityje bei sumažėjusia jos raiška, migracija yra pakitusi – žaizdos gijimo metodu pademonstruotas ląstelių migravimo sumažėjimas.

### Literatūra

- [1] Peng, Y., Crocem C.M. *Signal Transduct Target Ther*, 2016, 1, 15004.
- [2] Iorio, M.V., Croce, C.M. *EMBO Molecular Medicine*, 2012, 4(3), 143–59.
- [3] Stankevičius, V., Vasauskas, G., Bulotienė, D., Butkytė, S., Jarmalaite, S. *BMC Cancer*, 2016, 16(1), 789.
- [4] Ran, F.A., Hsu, P.D., Wright, J., Agarwala, V., Scott, D.A., Zhang, F. *Nature Protocols*, 2013, 8(11), 2281–308.

**G. Rakauskienė<sup>1</sup>,  
I. Uzielinė<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup> Vilniaus Gedimino technikos  
universitetas*

*<sup>2</sup> Valstybinis mokslinių tyrimų institutas  
Inovatyvios medicinos centras*

## **VIDULĄSTELINIO KALCIO KONCENTRACIJOS POKYČIO ĮTAKA ŽMOGAUS MENSTRUACIJŲ KRAUJO KAMIENINIŲ LĄSTELIŲ PAJĖGUMUI DIFERENCIJUOTI Į KREMZLINĮ AUDINĮ**

Žmogaus sąnario kremzlės audinys pasižymi silpnu gebėjimu regeneruoti po auidinio sužeidimo, kas lemia sąnario kremzlės degeneracinių ligų, tokių kaip osteoartritas (OA) pradžią ir progresiją [4]. Iki šiol nėra sukurta ilgalaikių vaistų ar terapijų gydant OA, o kamieninės ląstelės (KL) susilaukia vis daugiau dėmesio audinių inžinerijoje, dėl gebėjimo diferencijuoti į kremzlinį audinį. Mezenchiminės kamieninės ląstelės (MKL) šiuo metu yra plačiausiai naudojama priemonė bandant atkurti kremzlės audinį. Klasikiniu MKL, skirtų kremzlės regeneracijai, šaltiniu yra laikomi kaulų čiulpai, kadangi šios ląstelės dalyvauja pradinėse organizmo vystymosi stadijose susidarant kremzliniam audiniui bei yra labiausiai iširtos siekiant regeneruoti kremzlę [5; 9]. Tačiau dėl sudėtingo ir invazinio kaulų čiulpu išskyrimo ir eilės nesėkmingų bandymų panaudoti kaulų čiulpu MKL (KČMKL) kremzlės regeneracinėms terapijoms, ieškoma ir alternatyvių šaltinių MKL išskyrimui. Menstruacijų kraujo MKL (MenMKL) pritraukė didelį mokslininkų susidomėjimą dėl jų plataus diferenciacijos potencialo. Pastebėta, kad MenMKL geba diferencijuoti į kaulo, kremzlės, riebalų, kepenų ir širdies audinių ląsteles [3]. Taip pat jos yra itin lengvai išgaunamos, nereikalauja jokių invazinių chirurginių procedūrų ir, svarbiausia, tos pačios donorės mėginius galima surinkti pakartotinai, palengvinant autologines transplantacijas ir padidinant jų sėkmės tikimybę. Dėl šių privalumų MenMKL gali tapti potencialiu regeneracinės medicinos įrankiu, tačiau jos vis dar yra naujos regeneracinės medicinos srityje ir jų chondrogeninės diferenciacijos pajėgumas nėra pakankamai iširtas.

Chondrogeninė MKL diferenciacija yra sudėtingas, daugiapakopis procesas, kur ypatingai didelis dėmesys yra nukreiptas į molekulinį mechanizmų, kontroliuojančių MKL diferenciaciją valdymą. Viduląsteliniai kalcio jonai  $[Ca^{2+}]$  išlieka vienu svarbiausių veiksnių kontroliuojančių sėkmingą chondrogeninės diferenciacijos eigą. Kadangi  $[Ca^{2+}]$  kiekis pastoviai kinta esant išoriniam stimuliui, pavyzdžiui mechaniniam spaudimui, įtampos valdomi L-tipo kalcio kanalai (LKK) pritraukė nemažai dėmesio kaip vienas pagrindinių viduląstelinio kalcio koncentraciją didinančių variklių [1]. Tačiau į citozolį  $[Ca^{2+}]$  gali patekti ir iš endoplazminiame tinkle esančių saugyklų, kuriose yra kaupiami  $[Ca^{2+}]$  ir panaudojami esant nepakankamam  $[Ca^{2+}]$  padavimui iš išorės [8]. Todėl tiriant  $[Ca^{2+}]$  pralaidumą per LKK ir endoplazminio tinklo saugyklų, bei diferenciacijos metu viduląstelinį mechanizmų priklausomybę nuo  $[Ca^{2+}]$  koncentracijos yra viena potencialiausių sričių norint plačiau suprasti MKL diferenciacijos pajėgumą. Papildomai, svarbu pabrėžti, kad pagrindiniai LKK slopikliai priklauso

1.4-dihidropiridino grupei junginiams, kurie yra plačiai vartojami kaip antihipertenziniai vaistai, mažinantys kraujo spaudimą [6]. Nifedipinas ir isradipinas yra klasikiniai antihipertenziniai vaistai vartojami sergančiųjų širdies-kraujagyslių ligomis [7]. Todėl šių vaistų vartojimas gali turėti papildomą poveikį diferencijuojančioms ląstelėms bei sąnario kremzlės chondrocitų funkcijoms. Šiame darbe buvo naudojami LKK slopikliai – nifedipinas, isradipinas, oksalatas (SR 33805), priešingu veikimo mechanizmu pasižymintys LKK agonistai (arba aktyvatoriai) – BayK8644 ir FLP64176, palyginimui panaudotas reikšmingo chondrogeninei diferenciacijai TRPV4 kalcio kanalo [2] slopiklis GSK2193874 bei endoplazminio tinklo  $[Ca^{2+}]$  saugyklų kanalų slopikliai – ryanodinas ir ksestosponginas-C, toliau vadinami kaip kalcio kanalų reguliatoriai.

Viduląstelinis  $[Ca^{2+}]$  kiekis buvo įvertintas vienasluoksnyje augančias ląsteles paveikus įvairiais plazminės membranos LKK slopikliais (nifedipinas, isradipinas) ir agonistais (BayK8644, FPL64176), taip pat endoplazminio tinklo slopikliais (ksestosponginas C, ryanodinas), naudojant tėkmės citometrijos metodiką. Taip pat, visos ląstelės buvo veikiamos ir kito kalcio kanalo (TRPV4) slopikliu GSK 2193874, bei natūraliu LKK slopikliu oksalatu (SR 33805). Vėliau, po visų veiksmų poveikio ląstelės buvo tiriamos pažymint jas specifiniu  $[Ca^{2+}]$  dažu Cal-520, fluorescentiniu mikroskopu. Taip pat, ląstelės buvo žymimos LKK subvieneto CaV1.2 fluorescuojančiais antikūnais. Galiausiai visos ląstelės buvo paskatintos diferencijuoti chondrogenine kryptimi, panaudojant LKK reguliatorius ir kiekvienam ląstelių tipui buvo įvertintas kremzliniam audiniui būdingo užląstelinio matrikso formavimas histologiniams metodais.

Gauti rezultatai parodė, kad MenMKL, KČMKL ir chondrocitai pasižymi skirtingais viduląstelinio kalcio jonų kiekio reguliaciniais mechanizmais. BayK8644 ir FPL64176 reikšmingai padidino viduląstelinio kalcio jonų koncentraciją MenMKL ir chondrocituose. Taip pat, MenMKL laisvą kalcj taip pat padidino ir slopiklis GSK 2193874, o visi slopikliai kartu sumažino laisvo kalcio kiekį. Chondrocituose kalcio jonų koncentraciją reikšmingai sumažino slopiklis oksalatas, o KČMKL nepasižymėjo reikšmingais skirtumais lyginant kiekybinius duomenis įvairių kalcio kanalų reguliatorių.

MenMKL chondrogeninės diferenciacijos priklausomybė nuo viduląstelinio kalcio jonų reguliatorių buvo ryškiausia. Slopinant MenMKL kalcio kanalų slopikliais isradipinu, ryanodinu ir nifedipinu, diferenciacijos pajėgumas išaugo, tuo tarpu aktyvatorius BayK8644 ir TRPV4 slopiklis parodė silpniausią užląstelinio užpildo baltymų kaupimo rezultatą. KČMKL atvirksčiai, stipriausią chondrogenezės atsaką parodė pridendant aktyvatorių BayK8644, o nesant augimo veiksmui TGF-β3, diferenciaciją stipriausiai stimuliuo slopiklis nifedipinas. Chondrocitai pasižymėjo didžiausiomis ląstelių sferomis iš visų ląstelių, bet didžiausias proteoglikanų kiekis pastebėtas stimuliuojant su TGF-β3 ir nifedipinu, taip pat TGF-β3 ir GSK.

MenMKL, KČMKL, ir chondrocitai pasižymi skirtingu viduląstelinio kalcio jonų poreikiu vykstant chondrogeninei šių ląstelių diferenciacijai, kas yra svarbu norint įvertinti MKL panaudojimą kremzlės audinio terapijai, prieš tai diferencijuojant šias ląsteles *in vitro* sąlygomis.

---

## Literatūra

- [1] Matta, Csaba, and Roza Zakany. "Calcium Signalling in Chondrogenesis: Implications for Cartilage Repair." *Frontiers in Bioscience (Scholar Edition)*, vol. 5, no. January, 2013, pp. 305–24, doi:10.1089/ten.TEB.2013.0757.
- [2] McNulty, A. L., Leddy, H. A., Liedtke, W., & Guilak, F. (2014). *TRPV4 as a therapeutic target for joint diseases. Naunyn-Schmiedeberg's Archives of Pharmacology, 388(4), 437–450.* doi:10.1007/s00210-014-1078-x

- [3] Meng, Xiaolong, et al. "Endometrial Regenerative Cells: A Novel Stem Cell Population." *Journal of Translational Medicine*, vol. 5, 2007, p. 57, doi:10.1186/1479-5876-5-57.
- [4] Mobasher, Ali, et al. "The Chondrocyte Channelome: A Narrative Review." *Joint Bone Spine, Société française de rhumatologie*, 2018, pp. S1297-319X(18)30015-0, doi:10.1016/j.jbspin.2018.01.012.
- [5] Musumeci, Giuseppe, et al. "New Perspectives for Articular Cartilage Repair Treatment through Tissue Engineering: A Contemporary Review." *World Journal of Orthopedics*, vol. 5, no. 2, 2014, pp. 80–88, doi:10.5312/wjo.v5.i2.80.
- [6] Rahman, M. M., Kopec, J. A., Anis, A. H., Cibere, J., & Goldsmith, C. H. (2013). Risk of Cardiovascular Disease in Patients With Osteoarthritis: A Prospective Longitudinal Study. *Arthritis Care & Research*, 65(12), 1951–1958. <https://doi.org/10.1002/acr.22092>
- [7] Welzel, D., & Burger, K. J. (1990). *The Calcium Antagonist Isradipine in the Therapy of Hypertension. Drugs, 40(Supplement 2)*, 60–64. doi:10.2165/00003495-199000402-00015
- [8] Ye, B. "Ca<sup>2+</sup> Oscillations and Its Transporters in Mesenchymal Stem Cells." *Physiological Research / Academia Scientiarum Bohemoslovaca*, vol. 59, no. 3, 2010, pp. 323–29, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/19681652>
- [9] Yin, Hai Bin, et al. "Mesenchymal Stem Cells: Biological Characteristics and Clinical Application." *Chinese Journal of Tissue Engineering Research*, vol. 18, no. 14, 2014, pp. 2282–89, doi:10.3969/j.issn.2095-4344.2014.14.024.

**A. Rimkūnas<sup>1,2</sup>,  
K. Malakauskas<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Vytauto Didžiojo universitetas  
<sup>2</sup> LSMU MA Pulmonologijos Klinikos  
Pulmonologijos Laboratorija

## EOZINOFILŲ SUTRIKDYTOS UŽLAŠTELINIO UŽPILDO BALTYMŲ APYKAITOS ĮTAKA PLOUČIŲ STRUKTŪRINIŲ LĄSTELIŲ PROLIFERACIJAI SERGANT ASTMA

**Įvadas.** Sergant astma nuolatinis eozinofilinis kvėpavimo takų uždegimas sąlygoja struktūrinius kvėpavimo takų pokyčius – vadinamus remodeliacijos sąvoka. [1]. Eozinofilai, veikdami plaučių struktūrinės ląstelės tiesiogiai adhezuodami arba netiesiogiai išskirdami įvairius mediatorius, sutrikdo plaučių struktūrinių ląstelių fiziologinį aktyvumą [2]. Manome, kad po eozinofilų poveikio sutrikusi užlaštelinio užpildo baltymų apykaita, tiek autokrininiu būdu keičia pačių baltymus išskyrusių ląstelių fiziologinį aktyvumą, tiek ir parakrininiu būdu jas supančių kitų struktūrinių ląstelių bei naujai į kvėpavimo takus migravusių eozinofilų aktyvumą sergant astma.

**Tyrimo tikslas** - įvertinti eozinofilų įtaką bronchų lygiųjų raumenų ląstelių bei plaučių fibroblastų užlaštelinio užpildo baltymų produkcijai bei šių baltymų įtaką eozinofilų adhezijai ir plaučių struktūrinių ląstelių proliferacijai sergant astma.

**Tyrimo metodai.** Į tyrimą buvo įtraukta 8 sergantys alergine astma (AA) ir 6 sunkia eozinofiline astma (SEA) bei 9 sveiki asmenys (SA). Tiriamieji įtraukti remiantis Bioetikos komiteto leidimu Nr. BE-2-13. Eozinofilai iš tiriamųjų kraujo buvo išskirti naudojant centrifugavimą aukšto tankio Ficoll gradientu ir magnetinę separaciją. Užlaštelinio užpildo baltymai (UUB) išgryninti pritaikant ląstelių lizės amonio hidroksidu metodą. Eozinofilų adhezinės savybės įvertintos matuojant eozinofilų peroksidazės aktyvumą. Bronchų lygiųjų raumenų (BLR) ląstelių ir plaučių fibroblastų proliferacija įvertinta naudojant Alamaro mėlio reagentą. Genų raiškiai įvertinti naudota tikrojo laiko PGR analizė. Duomenys pateikti apskaičiuavus vidurkį ± standartinės paklaidos vidurkį. Duomenys statistiškai patikimi, kurių p reikšmė buvo mažesnė kaip 0,05.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** Pirmiausia įvertinome AA ir SA eozinofilų įtaką pagrindinių UUB genų raiškiai BLR ląstelėse bei plaučių fibroblastuose. Nustatėme, kad AA eozinofilai reikšmingai skatino kolageno I geno raišką BLR ląstelėse lyginant su SA eozinofilais -  $2,5 \pm 0,3$  vs.  $1,1 \pm 0,1$  kartais nuo kontrolinių BLR ląstelių ( $p < 0,05$ ); Fibronektino –  $2,1 \pm 0,3$  vs.  $1,2 \pm 0,1$  ( $p < 0,05$ ); Versikano –  $1,8 \pm 0,3$  vs.  $1,2 \pm 0,2$  ( $p < 0,05$ ). Tuo tarpu elastino raišką BLR ląstelėse reikšmingai didino SA eozinofilai lyginant su AA -  $1,7 \pm 0,3$  vs.  $0,9 \pm 0,1$  kartais nuo kontrolinių BLR ląstelių ( $p < 0,05$ ). Plaučių fibroblastuose kolageno ir fibronektino genų raiška taip pat reikšmingai padidėjo po sąveikos su AA eozinofilais – atitinkamai  $2,4 \pm 0,3$  vs.  $1,2 \pm 0,3$  ir  $2,2 \pm 0,3$  vs.  $1,1 \pm 0,3$  kartais nuo kontrolinių plaučių fibroblastų ( $p < 0,05$ ). Tuo tarpu statistiškai reikšmingų skirtumų elastino ir versikano genų raiškiai plaučių fibroblastuose nustatyta nebuvo.

Palyginę eozinofilų adhezijos intensyvumo skirtumus tarp adhezijos prie plaučių struktūrinių ląstelių ir adhezijos prie UUB nustatėme, kad po 1 val. nuo kombinuotųjų kultūrų sudarymo, AA grupėje 78,1±2,0 proc. įpiltų eozinofilų stabiliai prisitvirtino prie BLR ląstelių bei 89,0±1,0 proc. (p<0,05) prie tik jų pagamintų struktūrinių UUB; SEA grupėje - 69,0±5,3 ir 90,2±0,8 proc. (p<0,05), o SA grupėje atitinkamai 57,2±5,4 ir 76,6±1,0 proc. (p<0,05). Eozinofilų adhezijos intensyvumo skirtumų tarp AA ir SEA grupių nustatyta nebuvo, tačiau astmos grupių eozinofilai reikšmingai intensyviau adhezavo prie išskirtų UUB, lyginant su SA grupe. Taip pat, visose grupėse adhezija prie UUB buvo reikšmingai didesnė, lyginant su adhezija prie BLR ląstelių (p<0,05). Panašios tendencijos nustatytos su plaučių fibroblastais - AA grupėje 81,2±2,3 proc. įpiltų eozinofilų stabiliai prisitvirtino prie plaučių fibroblastų bei 89,6±0,7 proc. (p<0,05) prie jų pagamintų struktūrinių UUB; SEA grupėje atitinkamai 77,1±3,9 bei 87,8±2,0 proc.; SA grupėje - 61,4±10,9 ir 71,2±6,7 proc. Tik AA grupės eozinofilų adhezija prie UUB buvo reikšmingai didesnė negu prie plaučių fibroblastų, o AA ir SEA eozinofilų adhezija prie UUB buvo reikšmingai didesnė, lyginant su SA grupe.

Galiausiai įvertinome eozinofilų sutrikdytos UUB apykaitos įtaką plaučių struktūrinių ląstelių proliferacijai. Išskirti UUB po kombinuotųjų kultūrų su AA ir SEA eozinofilais skatino plaučių struktūrinių ląstelių proliferaciją, atitinkamai BLR ląstelių skaičius po 48val. buvo 11,3±1,2 ir 10,9±1,1 proc. didesnis (p<0,05), lyginant su BLR ląstelėmis, augintomis su eozinofilais nepaveiktais UUB, o plaučių fibroblastų skaičius atitinkamai padidėjo 7,8±1,2 ir 7,9±1,2 proc. (p<0,05), lyginant su plaučių fibroblastais, augintais su eozinofilais nepaveiktais UUB. Tuo tarpu, UUB, išskirti po kombinuotųjų kultūrų su AA ir SEA eozinofilais bei tiriamojo paciento kraujo serumu taip pat skatino plaučių fibroblastų proliferaciją, atitinkamai 13,3±1,6 proc. ir 8,9±0,8 proc. daugiau (p<0,05), lyginant su plaučių fibroblastais, augintais su serumu, bet eozinofilais nepaveiktais UUB. BLR ląstelėms reikšmingo serumo poveikio tarp astmos grupių nustatyta nebuvo. BLR ląstelių ir plaučių fibroblastų proliferacija AA ir SEA grupėse buvo reikšmingai didesnė lyginant su SA grupe (p<0,05), kurioje UUB poveikis BLR ląstelių ir plaučių fibroblastų proliferacijai nustatytas nebuvo.

**Išvados.** Sergančiųjų alergine astma eozinofilai keičia užląstelinio užpildo baltymų genų raišką - didina kolageno I, fibronektino ir versikano bronchų lygiųjų raumenų ląstelėse bei kolageno I ir fibronektino plaučių fibroblastuose. Eozinofilai intensyviau adhezuoja prie užląstelinio užpildo baltymų nei prie bronchų lygiųjų raumenų ląstelių, o sergant alergine ir sunkia eozinofiline astma eozinofilų adhezija prie užląstelinio užpildo baltymų yra reikšmingai didesnė lyginant su sveikų asmenų eozinofilais. Taip pat, eozinofilai skatina užląstelinio užpildo baltymų produkciją, kuri prisideda prie bronchų lygiųjų raumenų ląstelių ir plaučių fibroblastų proliferacijos skatinimo sergant astma.

---

### Literatūra

- [1] Brightling, C. E., Gupta, S., Siddiqui, S. Lung damage and airway remodelling in severe asthma. *Clinical and experimental allergy: journal of the British Society for Allergy and Clinical Immunology*. 2012. 42(5), 638-649.
- [2] Burgstaller, G., Oehrlé, B., Gerckens, M., White, E. S., Schiller, H. B., & Eickelberg, O. The instructive extracellular matrix of the lung: basic composition and alterations in chronic lung disease. *European Respiratory Journal*. 2017. 50(1).

**A. Savickaitė,  
R. Gudiukaitė**

*Vilniaus universitetas, Gyvybės  
mokslų centras, Biomokslų institutas*

## TERMOSTABIILIŲ LIPOLIZINIŲ FERMENTŲ PAGRINDU VEIKIANČIOS NEPERTRAUKIAMOS RIEBALŲ RŪGŠČIŲ ESTERIŲ SINTEZEI IR/AR HIDROLIZEI SKIRTOS SISTEMOS KŪRIMAS

### **Įvadas**

Lipoliziniai fermentai – fermentai, gebantys hidrolizuoti lipidinius substratus. Šiems fermentams yra priskiriamos lipazės ir esterazės. Lipoliziniai fermentai per keletą dešimtmečių sulaukė ypatingo dėmesio dėl gebėjimo veikti tiek vandeninėje, tiek bevandenėje aplinkose, katalizuojamų hidrolizės, esterijų sintezės, peresterinimo, aminolizės ir acidolizės reakcijų [1]. Tokie biokatalizatoriai yra vis plačiau naudojami pramonėje, tačiau nuolatinis fermentų gryninimas reikalauja didelių kaštų, todėl reikia ieškoti išeičių, kurios ne tik pagerintų fermentų savybes, bet ir leistų juos naudoti kelis kartus.

Vienas iš pagrindinių fermentų gerinimo būdų yra imobilizavimas. Taikant šią strategiją tiriama fermentai tampa stabilesni, atsparesni aukštesnėms temperatūroms ir kitoms denatūruojančioms sąlygoms, o svarbiausia, juos galima naudoti pakartotinai [2]. Minėtosios savybės labai svarbios pramoninei biokatalizei, kadangi fermentai yra nuolat iš naujo sintetinami ir gryninami, ypatingai tuose procesuose, kurie vyksta nepertraukiamai [3].

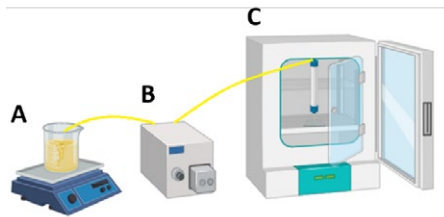
Šio projekto objektas buvo GD-95RM, GDEst-lip ir GDEst-95 lipoliziniai fermentai, kurie ankstesnių darbų metu pasižymėjo didele išeiga bei aktyvumu plačiose temperatūrų ir pH ribose [4, 5]. Pagrindinis projekto uždavinys – įvertinti galimybę taikyti imobilizuotus GD-95RM, GDEst-95, GDEst-lip fermentus nepertraukiamuose riebalų rūgščių esterijų sintezės ir hidrolizės procesuose.

### **Metodai**

- Tikslinių baltymų gryninimui naudota imobilizuotų Ni<sup>2+</sup> jonų giminingumo chromatografija, o gautos frakcijos analizuotos NDS-PAGE metodu.
- Lipoliziniai fermentai imobilizuoti naudojant natrio alginatą ir CaCl<sub>2</sub>.
- Skirtingų temperatūrų įtaka imobilizuotų fermentų stabilumui ir aktyvumui, savitasis aktyvumas bei ilgalaikis skirtingų temperatūrų ir alkoholių poveikis vertintas spektrofotometriškai.
- Imobilizuotų fermentų gebėjimas nepertraukiamai katalizuoti lipidinių substratų hidrolizę ir sintezę/peresterinimą tirtas naudojant nepertraukiamą sistemą (1 pav.).



**1 pav.**  
Nepertraukiamos lipidinių substratų hidrolizės ir sintezės/peresterinimo sistema.  
A – reakcijos mišinys, maišomas ant magnetinės maišyklės, B – gradientinė pompa, C – kolonėlė, užpildyta imobilizuotu fermentu, laikoma 55 °C temperatūroje.



- Nepertraukiamų reakcijų produktai analizuoti spektrofotometriškai arba plo-nasluksnės chromatografijos metodais.

### Rezultatai

Šio darbo metu GD-95RM, GDEst-lip ir GDEst-95 lipoliziniai fermentai buvo sėmingai imobilizuoti kalcio alginato gelyje naudojant 3 % natrio alginato ir 150 mM CaCl<sub>2</sub> koncentracijų tirpalus. Nustatyta optimali GD-95RM lipazės koncentracija imobilizavimui buvo 0,05 mg/ml, GDEst-lip fermentui – 0,5 mg/ml, GDEst-95 esterazei – 0,25 mg/ml, o efektyvi tiek trumpagrandžių, tiek ilgagrandžių *p*-NP esterių hidrolizė gauta į reakciją įdedant 3 suformuotas kapsules su imobilizuotais fermentais. Ištyrus fizikines ir chemines savybes nustatyta, kad po imobilizavimo fermentai prarado dalį savitojo aktyvumo, tačiau pasižymėjo didesniu stabilumu ir aktyvumu aukštesse temperatūrose. Ilgalaikio skirtingų alkoholių ir temperatūrų poveikio tyrimai parodė, kad imobilizuoti GDEst-95, GD-95RM ir GDEst-lip lipoliziniai fermentai išlaiko aktyvumą po 90 parų inkubacijos tokiuose organiniuose tirpikliuose kaip etanolis, metanolis, butanolis ar izopropanolis bei išlieka aktyvūs po 3 mėn. inkubacijos 4 °C ir 22 °C temperatūroje. Sukurta nepertraukiamos lipidinių substratų hidrolizės ir peresterinimo sistema, paremta imobilizuotais GD-95RM ir GDEst-lip fermentais, leido tiriamus fermentus charakterizuoti kaip perspektyvius biologinius įrankius pramonei biokatalizei.

### Literatūra

- [1] Joseph, B., Ramteke, P.W., and Thomas, G. *Biotechnology Advances*, 2008, 26, p. 457–470.
- [2] Cherry, J.R., and Fidantsef, A.L. *Current Opinion in Biotechnology*, 2003, 14, p. 438–443.
- [3] Britton, J., Majumdar, S., and Weiss, G.A. *Chemical Society Reviews*, 2018, 47, p. 5891–5918.
- [4] Druteika, G., Sadauskas, M., Malunavicius, V., Lastauskiene, E., Statkeviciute, R., Savickaite, A., and Gudiukaite, R. *World Journal of Microbiology and Biotechnology*, 2020, 36, p. 41.
- [5] Gudiukaite, R., Sadauskas, M., Gegeckas, A., Malunavicius, V., and Citavicius, D. *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology*, 2017, 44, p. 799–815.

**G. Šakalytė,  
J. Armalytė**

*Vilniaus universitetas,  
Biomokslų institutas*

## **ACETILTRANSFERAZĖ CHEA ACINETOBACTER BAUMANNII STRESO ATSAKE**

*Acinetobacter baumannii* yra Gram neigiamas oportunistinis patogenas, didelio mokslininkų dėmesio susilaukiantis dėl greitai augančio atsparumo beveik visiems žinomiems antibiotikams [1]. *A. baumannii* sparčiai plinta pasaulio ir Lietuvos ligoninėse, kur pacientams sukelia sunkias kvėpavimo, šlapimo takų ir kito pobūdžio infekcijas [2]. Šios bakterijos yra itin pavojingos nusilpusią ar supresuotą imuninę sistemą turintiems ligoniams – pacientams po chemoterapijų, organų transplantacijų, nudegimų, sudėtingų chirurginių operacijų, senyvo amžiaus žmonėms bei kūdikiams [3]. *A. baumannii* plitimą ir išlikimą ligoninių aplinkoje lemia nereikšmingas augimo sąlygoms, gebėjimas ilgai išsilaikyti ant įvairių paviršių [4]. Dėl šių savybių sunku kontroliuoti bei užkirsti kelią gydymo įstaigose sukeltų (hospitalinių) infekcijų plitimui, todėl svarbu ieškoti alternatyvių antibiotikų terapijai priemonių, galinčių padėti kovoje su šia bakterija.

Šiuo metu mokslininkai aktyviai ieško naujų, potencialių antibakterinės terapijos būdų ir taikinių prieš įvairius daugiavaisčių atsparumu pasižyminčius patogenus. Vienu jų galėtų tapti GNAT superšeimai priklausančios N-acetiltransferazės. Šie visuose gyvybės domenuose paplitę baltymai katalizuoja jiems specifinių substratų acilinimą, pernešdami acetilgrupę nuo acetil-kofermento A. Bakterijose GNAT N-acetiltransferazės dalyvauja įvairiuose metabolizmo procesuose, tokiuose kaip riebalų rūgščių apykaita bei prisideda prie peptidoglikano biosintezės [5]. Be metabolinių procesų užtikrinimo, GNAT N-acetiltransferazės yra labai svarbios mikroorganizmų atsako į stresą procesuose. Jos dalyvauja reguliuojant genų, svarbių atsakai į stresą, raišką, taip pat tiesiogiai susidarant atsako į stresą veiksnius, tokiems kaip sideroforai [6]. Platus funkcijų spektras ir specifiškumas mikroorganizmų rūšims, skatina domėtis GNAT N-acetiltransferazėmis kaip galimais antimikrobinės terapijos taikiniiais.

Šiame darbe buvo tiriama *A. baumannii* acetiltransferazės CheA svarba mikroorganizmo atsakai į stresą sukeliančius veiksnius. Bioinformatinės analizės metu buvo nustatyta, kad *cheA* genas yra itin konservatyvus ir randamas visuose NCBI duomenų bazėje [7] prienamų *A. baumannii* kamienų genomuose. Siekiant įvertinti CheA svarbą stresą patiriančioms *A. baumannii* ląstelėms, homologinės rekombinacijos būdu sukurtas *cheA* geno deleciją turintis *A. baumannii* mutantas. *cheA* delecijos lemiami fenotipiniai pokyčiai buvo stebimi bioplėveles formuojančiose, trūkčiojimo būdu judančiose bei geležies trūkumo sąlygomis augančiose ląstelėse. Nustatyta, kad *cheA* geno delecija lemia reikšmingai sumažėjusį *A. baumannii* gebėjimą

formuoti bioplėveles ant plastikinių paviršių bei sutrikdo mikroorganizmo gebėjimą judėti trūkčiojant. Tuo tarpu geležies trūkumo stresą patiriančių *A. baumannii* bakterijų augimui, *cheA* delecija įtakos neturi. CheA reikšmė atsako į stresą procesams patvirtinta *cheA* raiškos tyrimais, kurių metu stebėtas santykinis *cheA* raiškos pokytis stresą patiriančiose, stacionarioje augimo fazėje esančiose bei bioplėveles formuojančiose, *A. baumannii* ląstelėse.

Gauti rezultatai patvirtina hipotezę apie acetiltransferazės CheA reikšmę *A. baumannii* atsako į stresą procesuose, tačiau išsamesni tyrimai yra reikalingi, norint geriau suprasti šios acetiltransferazės reguliuojamus procesus.

---

### Literatūra

- [1] Povilonis, J., Seputiene, V., Krasauskas, R., Juskaite, R., Miskinyte, M., Suziedelis, K., et al. (2013). Spread of carbapenem-resistant *Acinetobacter baumannii* carrying a plasmid with two genes encoding OXA-72 carbapenemase in Lithuanian hospitals. *J. Antimicrob. Chemother.* 68, 1000–1006.
- [2] Gonzalez-Villoria, A. M., Valverde-Garduno, V. (2016) Antibiotic-Resistant *Acinetobacter baumannii* Increasing Success Remains a Challenge as a Nosocomial Pathogen. *J Pathog.*
- [3] Du, X., Xu, X., Yao, J., Deng, K., Chen, S., Shen, Z., et al. (2019). Predictors of mortality in patients infected with carbapenem-resistant *Acinetobacter baumannii*: A systematic review and meta-analysis. *Am J Infect Control.*
- [4] Maragakis, L. L., and Perl, T. M. (2008). *Acinetobacter baumannii*: epidemiology, antimicrobial resistance, and treatment options. *Clin. Infect. Dis.* 46, 1254–1263.
- [5] Favrot, L., Blanchard, J. S. et al. (2016) Bacterial GCN5-Related N-Acetyltransferases: From Resistance to Regulation. *Biochemistry* 55, 989–1002.
- [6] Penwell, W. F. et al. (2015) Discovery and Characterization of New Hydroxamate Siderophores, Baumannoferrin A and B, produced by *Acinetobacter baumannii*. *ChemBioChem* 16, 1896–1904.
- [7] National Center for Biotechnology Information (NCBI)[Internet]. Bethesda (MD): National Library of Medicine (US), National Center for Biotechnology Information; [1988] – [cituota 2019 12 06]. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>.

V. Aukščionis,  
A. Ramanavičius

*Vilniaus universitetas*

## MODIFIKUOTŲ SACCHAROMYCES CEREVISIAE TYRIMAS AMPEROMETRINIAIS IR IMPEDANSO SPEKTROSKOPIJOS METODAIS

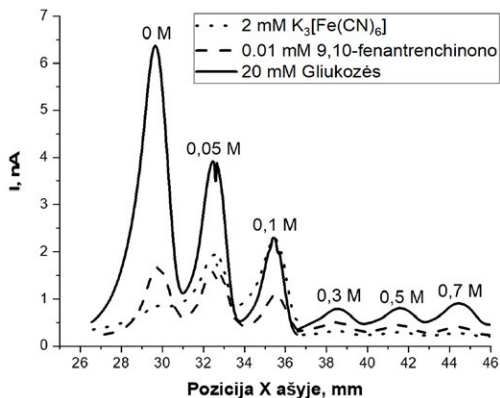
Mielės *Saccharomyces cerevisiae* (*S. cerevisiae*) yra dažnai tyrimams pasirenkamas modelinis organizmas, nes pasižymi greitu metabolizmu, kurio keliai yra gerai ištirti, greitu dauginimusi ir pigia bei paprasta kultivacija. Mielių plazminėje membranoje randamos transmembraninės elektronų pernašos sistemos (tPMETs), vykdančios oksidacijos-redukcijos reakcijas. Su šiomis sistemomis gali sąveikauti hidrofiliiniai elektronų pernašos tarpininkai [1], tačiau šiuo būdu galima išgauti tik nedidelę dalį elektronų iš metabolizmo metu susidariusių redukuotų junginių, nes didžiausia jų dalis yra lokalizuota ląstelės viduje. Kartu naudojant hidrofilinį ir lipofilinį mediatorių galima išgauti didesnę kiekį elektronų (sukurti didesnę elektros srovę), nes lipofilinis mediatorius gali patekti į ląstelės vidų ir dalyvauti redokso reakcijoje su įvairiais redukuotais viduląsteliniiais komponentais.

Siekiant veiksmingiau pritaikyti mieles kaip bioelektrocheminio prietaiso komponentą, tai yra padidinti mielių metabolizmo sukuriamą elektros srovę (elektrocheminį aktyvumą) ir/arba įgalinti elektronų pernašą iš ląstelių naudojant tik vieną elektronų pernašos tarpininką, *S. cerevisiae* gali būti chemiškai modifikuojamos [2].

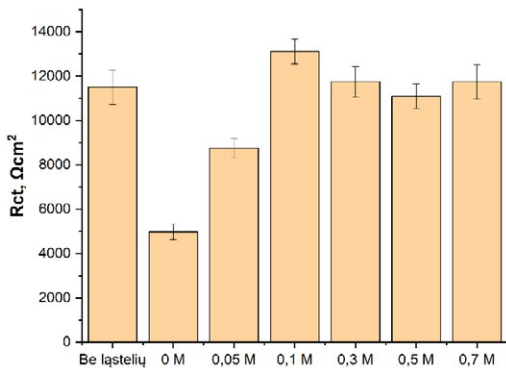
Polipirolas pasižymi įvairiomis savybėmis: biosuderinamumu [3], redokso bei katalitiniu aktyvumu, gebėjimu vykdyti jonų mainus ir jonų atranką. Biocheminiu (oksidacinės polimerizacijos) metodu pirolas gali būti polimerizuojamas reakciją katalizuojant  $K_3[Fe(CN)_6]$ , kuris susidaro *Saccharomyces cerevisiae* ląstelių membranos redokso fermentams ar kitiems oksiduoti gebantiems (didelio teigiamo redokso potencialo) junginiams oksidavus  $K_4[Fe(CN)_6]$  [4].

Modifikavimo elektrai laidžiu polimeru poveikį mielių ląstelėms ištirti buvo pasirinkti lokalizuoto elektrocheminio aktyvumo bei impedanso matavimai, atliekami skenuojančiu elektrocheminiu mikroskopu (SECM). Šie metodai yra lengvai pritaikomi specifiniams tyrimo parametrams (keičiant matavimo potencialą, skenavimo greitį) bei leidžia ištirti mėginius jų nepažeidžiant, nes matavimai gali būti atliekami biologiškai palankiomis (fiziologinėmis) sąlygomis (vandeninėje terpėje, izotoniniame tirpale, neutraliame pH, kambario temperatūroje). Ląstelėse vykstančios elektrocheminės reakcijos lemia krūvio pernašos varžą, kuri gali būti naudojama ląstelių aktyvumo įvertinimui [5].

**1 pav.**  
 SECM horizontalus skenavimas (0,05/ 0,1/ 0,3/ 0,5/ 0,7 M mielių modifikavimui naudotos pirolo koncentracijos, 0 M – nemodifikuotos mielės), +450 mV vs Ag/AgCl(3M) trijų elektrodų sistemoje, 0,01 M PBS 7,4 pH, 200  $\mu$ m virš Petri lėkštelės paviršiaus, 20  $\mu$ m/s darbinio elektrodo judėjimo greitis, 20  $\mu$ m atstumas tarp matuojamų taškų, 10 ms sustojimo (matavimo) trukmė.



**2 pav.**  
 Skirtingai modifikuotų *Saccharomyces cerevisiae* Rct. Matavimai atlikti terpėje esant 2 mM kalio fericianido, 0,01 mM 9,10- fenantrenchinono ir 20 mM gliukozės. +450 mV vs Ag/AgCl(3M) trijų elektrodų sistemoje, 200  $\mu$ m virš paviršiaus, 0,01 M PBS 7,4 pH.



*Saccharomyces cerevisiae* cheminis modifikavimas oksidacinės polimerizacijos būdu, kuriuo susintetinamos polipirolo struktūros ant ląstelių paviršiaus, sumažino maksimalią sistemos generuojamą srovę. Didinant pirolo koncentraciją inkubaciniame tirpale, mielių elektrocheminis aktyvumas mažėja atitinkamai (1 pav.). 0,3/0,5/0,7 M pirolo koncentracijomis modifikuotų ląstelių aktyvumas buvo panašus, todėl galima teigti, kad 0,3 M pirolo užtenka norint pasiekti maksimalų poveikį ląstelių generuojamai elektros srovei. Mažomis koncentracijomis (0,05/0,1 M) modifikuotos ląstelės sukūrė didesnę srovę naudojant tik kalio fericianidą nei nemodifikuotos ląstelės, tačiau su 9,10-fenantrenchinonu ir gliukoze nemodifikuotos mielės generavo didesnę signalą nei bet kurios kitos ląstelės (1 pav.). Elektrocheminio impedanso spektroskopijos metodu išmatuotos kompleksinės varžos parodė, jog mažiausią pasipriešinimą krūvio pernašai turi nemodifikuotos ląstelės, o didžiausią – 0,1 M polipirolo modifikuotos (2 pav.). Todėl galima teigti, kad elektrocheminio aktyvumo sumažėjimas 0,3/0,5/0,7 M polipirolo koncentracijose tikriausiai lemiamas ne varžos padidėjimo.

---

## Literatūra

- [1] Rawson F J, Downard A J, & Baronian K H. Electrochemical detection of intracellular and cell membrane redox systems in *Saccharomyces cerevisiae*. *Scientific reports*. 2014; 4: 5216.
- [2] Kisieliute A, Popov A, Apetrei RM, Cârâc G, Morkvenaite-Vilkonciene I, Ramanaviciene A, Ramanavicius A. Towards microbial biofuel cells: Improvement of charge transfer by self-modification of microorganisms with conducting polymer—Polypyrrole. *Chemical Engineering Journal*. 2019 Jan 15;356:1014-21.
- [3] Ramanaviciene A, Kausaite A, Tautkus S, & Ramanavicius A. Biocompatibility of polypyrrole particles: an in-vivo study in mice. *Journal of pharmacy and pharmacology*. 2007; 59(2): 311-5.
- [4] Ramanavicius A et al. Synthesis of polypyrrole within the cell wall of yeast by redox-cycling of [Fe(CN)6]3-/[Fe(CN)6]4-. *Enzyme and Microbial Technology*. Elsevier Inc. 2016; 83: 40–7.
- [5] He Z, Mansfeld F. Exploring the use of electrochemical impedance spectroscopy (EIS) in microbial fuel cell studies. *Energy & Environmental Science*. 2009;2(2):215-9.

**R. Aukštakojytė,  
J. Gaidukevič**

*Vilniaus universiteto  
Chemijos ir geomokslų fakulteto  
Chemijos institutas*

## **TERMINĖ GRAFENO OKSIDO REDUKCIJA MALONO RŪGŠTIES IR FOŠFORO PENTOKSIDO MIŠINYJE: SINTEZĖS SĄLYGŲ OPTIMIZAVIMAS IR STRUKTŪRINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS**

Grafenas – tai dvidimensinė, vieno anglies atomo storio nanostruktūrinė medžiaga, kuri 2004 metais sukėlė proveržį šiuolaikinėse technologijose. Dėl anglies  $sp^2$  hibridizacijos ši anglies alotropinė atmaina įgyja reikšmingų privalumų, lyginant su kitomis egzistuojančiomis medžiagomis. Grafenas turi didelį paviršiaus plotą, nėra pralaidus dujoms bei yra apie 100 kartų stipresnis už plieną. Jo terminis laidumas siekia  $5000 \text{ W}/(\text{m K})$  ir dvigubai viršija deimanto terminį laidumą. Be to, šiame monosluoksnyje elektronai juda 10 kartų greičiau nei silicyje [1]. Dėl išskirtinių fizikocheminių savybių, grafenas gali būti naudojamas našiuose elektronikos bei vandens valymo įrenginiuose, optoelektronikoje, fotodetektoriu, katalizatoriu ar antikoroziinių paviršių gamyboje. Taip pat atsižvelgiant į didėjančius aplinkosauginius iššūkius bei aplinkos užterštumą, ši anglinė medžiaga gali būti pritaikoma, kuriant pigius, bemetalius, nekenksmingus aplinkai bei neprarandančius aktyvumo, veikiant kitoms medžiagoms, elektrodus. Tokios elektrodinės medžiagos yra reikalingos inovatyvių ličio jonų baterijų, superkondensatorių, saulės bei kuro elementų kūrimui [2, 3].

Vienas iš perspektyviausių metodų pigiai, greitai ir masinei grafeno sintezei yra terminė grafeno oksido (GO) redukcija [4]. Šis sintezės metodas yra nekenksmingas aplinkai, o gaunami produktai yra didelio paviršiaus ploto. Nepaisant to, dėl aukštos temperatūros, intensyvaus vandens molekulių garavimo, deguoninių funkcinių grupių skylimo, CO ir  $\text{CO}_2$  dujų susidarymo, redukuoto grafeno oksido (rGO) lakštas fragmentuojasi, sukuriama tiek taškiniai, tiek topologiniai struktūriniai defektai anglinės medžiagos paviršiuje. Nuo defektų koncentracijos ir prigimties labai priklauso susintetinto rGO charakteristikos. Defektai ypač didelę įtaką daro produkto elektroninėms savybėms. Pakitus ryšio ilgiui tarp anglies atomų bei s ir p orbitalių hibridizacijai, pakinta ir elektroninių bangų sklaida bei elektronų trajektorija. Tai lemia sumažėjusį rGO elektronų mobilumą ir elektrinį laidumą. Dėl šių priežasčių sumažinamos potencialios rGO pritaikymo galimybės aukščiau minėtose srityse [5]. Redukuoto GO kristalinės gardelės defektai galėtų būti sumažinami, o sintezė lengviau valdoma, terminės redukcijos metu naudojant papildomą anglies šaltinį bei žemas temperatūras. Literatūroje teigiama, kad reaguojant malono rūgščiai ir fosforo pentoksidui, susidaro dujinis anglies suboksidas, skylantis į elementinę anglį žemoje temperatūroje [6]. Naudojant šiuos reagentus terminėje GO redukcijoje gali būti efektyviau atstatyta galutinio produkto  $\pi$ -konjuguotųjų ryšių sistema ir sumažinamas struktūrinių defektų kiekis.

Šiame darbe pateikiame naują terminės GO redukcijos techniką, įvedant malono rūgštis ir fosforo pentoksido mišinio priedą. Iš pradžių buvo susintetinti trys grafito oksido mėginiai, panaudojant skirtingus oksiduojančius reagentus. Siekiant įvertinti pasirinkto priedo ir temperatūros įtaką galutinio produkto struktūrinėms savybėms, buvo paruošti GO, malono rūgštis ir fosforo pentoksido mišiniai, į kuriuos malono rūgštis buvo įvesta 0, 5, 10 arba 30 % masės. Homogenizuoti mišiniai buvo termiškai redukuojami vamzdinėje krosnyje 100 °C, 150 °C, 250 °C ir 500 °C temperatūrose Ar atmosferoje, esant 60 mL/min dujų srauto greičiui. Gautų termiškai redukuotų GO mėginių struktūriniai pokyčiai įvertinti, panaudojant Rentgenodifrakcinės analizės (XRD), skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM), energijos dispersijos (EDS), Fourier transformacijos infraraudonųjų spindulių (FTIR) bei Raman sklaidos spektroskopijų metodus. Taip pat buvo atlikti termiškai redukuotų grafeninių produktų paviršiaus ploto (BET) ir elektrinio laidumo matavimo tyrimai. Gautieji rezultatai parodė, kad terminės redukcijos metu grafeno lakštai deformuojasi, išsilenkia, o jų paviršius susiraukšlėja. Be to, įvertinta, kad termiškai redukuotiems mėginiams yra būdinga polikristalinė grafitinė struktūra. Taip pat nustatyta, kad buvo pasiekta dalinė GO mėginių redukcija, kadangi produktų paviršiuje išliko hidroksi-, karboksi-, karbonil-, chinoninės ir fenolinės funkcinės grupės. Elektrinio laidumo matavimai parodė, kad didžiausiu elektriniu laidumu pasižymėjo mėginiai, gauti atliekant terminę GO redukciją 500 °C temperatūroje ir naudojant priedo mišinį, kuriame yra 10 % masės malono rūgštis.

---

### Literatūra

- [1] Lee H., Liu W.W., Chai S.P., Mohamed A.R., Aziz A., Khe C.S., Hidayah N.M.S., Hashim U., RSC Advances, 2017, 7, 15644–15693.
- [2] Choi W., Lahiri I., Seelaboyina R., Kang Y.S., Synthesis Critical Reviews in Solid State and Material Sciences, 2010, 35, 52–71.
- [3] Solís-Fernández P., Bissett M., Ago H., Chemical Society Reviews, 2017, 46, 4572–4613.
- [4] Karim M.R., Hayami S., Graphene Materials - Advanced Applications, InTech, 2017, 238.
- [5] G. Yang, L. Li, W.B. Lee, M.C. Ng, Structure of graphene and its disorders: a review, Sci. Technol. Adv. Mater. 19 (2018) 613–648.
- [6] House J.E., Inorganic Chemistry, Elsevier, 2013, 966.



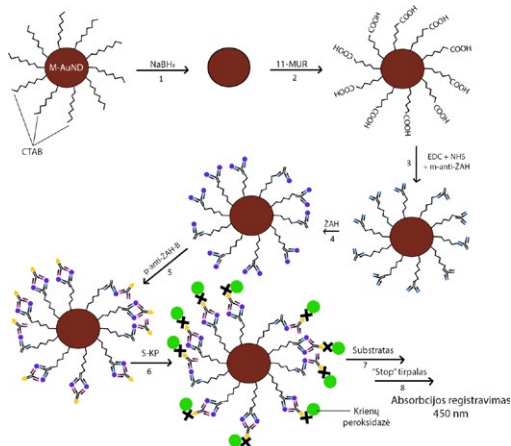
**E. Baliūnaitė,  
A. Ramanavičienė**

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

## **ANALIZĖJE NAUDOJAMŲ MAGNETINIŲ AUKSO SLUOKSNIU DENGŲ NANODALELIŲ MODIFIKAVIMO ANTIKŪNAIS OPTIMALIŲ SĄLYGŲ NUSTATYMAS**

Aukso nanodalelės yra plačiai naudojamos tokiose srityse kaip elektronika, fononika, katalizė, cheminių bei biocheminių jutiklių kūrimas. Šios dalelės pasižymi biologiniu suderinamumu, ypatingomis optinėmis ir elektromagnetinėmis savybėmis, geru laidumu ir gali būti lengvai modifikuojamos įvairiomis biomolekulėmis. Magnetinės aukso sluoksniu dengtos nanodalelės (M-AuND) ne tik turi anksčiau paminėtas aukso nanodalelėms būdingas savybes, bet ir sąveikauja su magnetiniais laukais, jų pozicija erdvėje gali būti kontroliuojama naudojant magnetus. Ši savybė sėkmingai naudojama nanodalelėms surinkti ar atskirti po jų modifikavimo nuo tirpale esančių medžiagų [1-4]. M-AuND naudojimas yra labai patogus elektrocheminių ir optinių fermentinių ir imuninių jutiklių kūrimui. Tačiau, norint sukurti jautrų ir nebrangų imuninį jutiklį, reikia parinkti optimalią antikūnų koncentraciją ir sąlygas efektyviam modifikavimui [5-7].

Pagrindinis šio projekto tikslas buvo nustatyti optimalias M-AuND modifikavimo antikūnais sąlygas bei iširti sąveikos su analite efektyvumą. Šiam tikslui buvo susintetintas  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanodalelės, kurių paviršius padengiamas aukso sluoksniu redukuojant  $\text{Au}^{3+}$  jonus hidroksilamino hidrokloridu cetiltrimetilamonio bromido (CTAB) aplinkoje. Elektroninio peršviečiamo mikroskopo pagalba nustatyta, kad dalelės yra 40-50 nm dydžio. Efektyviam modifikavimui antikūnais trukdantis M-AuND paviršiuje esantis CTAB buvo pašalintas panaudojant natrio borhidridą [5]. Tuomet įvairios antikūnų koncentracijos ir metodai (adsorbicija ir kovalentinis imobilizavimas) buvo naudojami M-AuND modifikavimui. Analizės principas pavaizduotas 1-ame paveiksle. M-AuND modifikuojamos monokloniniais antikūnais prieš žmogaus augimo hormoną (m-anti-ŽAH, 3 etapas), tada vykdoma sąveika su žmogaus augimo hormonu (ŽAH, 4 etapas); ant M-AuND susidariusio imuninio komplekso (m-anti-ŽAH/ŽAH) įvertinimui papildomai buvo naudojami polikloniniai antikūnai žymėti biotinu (p-anti-ŽAH-B, 5 etapas) ir streptavidinu žymėtas fermentas krienų peroksidazė (S-KP, 6 etapas) - ant M-AuND susidarė kompleksas m-anti-ŽAH/ŽAH/p-anti-ŽAH-B/S-KP. Pagal fermentinės reakcijos produktą (7, 8 etapai), kuris buvo registruojamas esant 450 nm bangos ilgiui, nustatyta optimali antikūnų koncentracija bei įvertintas sąveikos su analite efektyvumas. Naudojant 0,2 mg/ml M-AuND koncentraciją ir kovalentiškai per savitvarkį monosluoksnių imobilizuojant antikūnus, optimali m-anti-ŽAH koncentracija tirpale yra 330 nmol/l. Didinant antikūnų koncentraciją analizinis signalas mažai keitėsi, o esant tai pačiai ŽAH koncentracijai, bet mažesnei antikūnų koncentracijai, analizinis signalas mažėjo.



**1 pav.**  
*M-AuND modifikavimo antikūnais ir analitės nustatymo schema, siekiant nustatyti optimalią m-anti-ZAH antikūnų koncentraciją*

## Padėka

Projektas bendrai finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0170) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

## Literatūra

- [1] Zhao, J., Pinchuk, A., McMahon, J., Li, S., Ausman, L., Atkinson, A., Schatz, G. Methods for describing the electromagnetic properties of silver and gold nanoparticles. *Accounts of Chemical Research*, 2008, 41, 1710-1720.
- [2] Jain, P., Huang, X., El-Sayed, I., El-Sayed, M. Review of some interesting surface plasmon resonance-enhanced properties of noble metal nanoparticles and their applications to biosystems. *Plasmonics*, 2007, 2, 107-118.
- [3] Moraes, S., Tavalalaie, R., Sandiford, L., Tilley, R., Gooding, J. Gold coated magnetic nanoparticles: from preparation to surface modification for analytical and biomedical applications. *Chemical Communication*, 2016, 48, 7528-7540.
- [4] Popov, A., Stirke, A., Bakute, N., Brasiunas, B., Ramanavicius, A., Ramanaviciene, A. Efficiency of granulocyte colony-stimulating factor immobilized on magnetic microparticles on proliferation of NFS-60 cells. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2019, 578, UNSP 123580.
- [5] Byzova, N., Safenkova, I., Slutskaia, E., Zherdev, A., Dzantiev, B. Less is more: A comparison of antibody-gold nanoparticle conjugates of different ratios. *Bioconjugate Chemistry*, 2017, 28, 2737-2746.
- [6] He, J., Unser, S., Bruzas I., Cary, R., Shi, Z., Mehra, R., Aron, K., Sagle, L. The facile removal of CTAB from the surface of gold nanorods. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2018, 163, 140-145.
- [7] Baniukevicius, J., Boyaci, I., Bozkurt, A., Tamer, U., Ramanavicius, A., Ramanaviciene, A. Magnetic gold nanoparticles in SERS-based sandwich immunoassay for antigen detection by well oriented antibodies. *Biosensors and Bioelectronics*, 2013, 43, 281 - 288.

**E. Bučmys<sup>1</sup>, A. Popov<sup>1</sup>,  
A. Adamonytė<sup>1</sup>,  
I. Plikusienė<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> NanoTechnas – Nanotechnologijų ir medžiagotyros centras, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

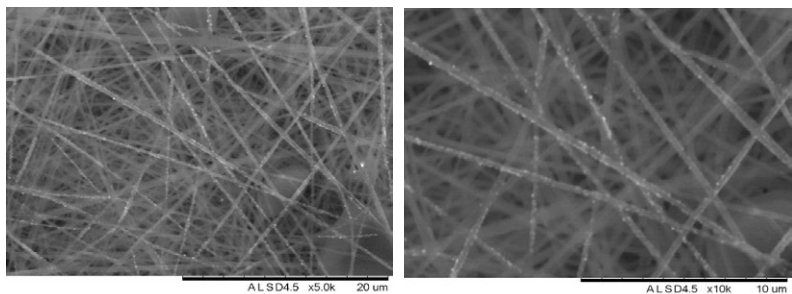
<sup>2</sup> Fizikinės chemijos katedra, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas

## **ZNO NANOSTRUKTŪRŲ MODIFIKAVIMAS BIOMOLEKULĖMIS KURIANT OPTINIUS BIOLOGINIUS JUTIKLIUS**

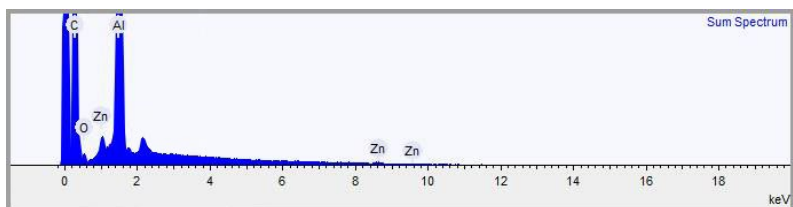
ZnO yra n-tipo puslaidininkis, plačiai naudojamas optiniuose, dujų ir biologiniuose jutikliuose, pasižymintis plačia draustine juosta, aukšta izoelektrinio taško verte bei dideliu biosuderinamumu [1]. Naujausios technologijos leidžia gaminti ZnO nanostruktūras įvairiais metodais [2–4], kurios pasižymi dideliu paviršiaus plotu, ir pažangiomis savybėmis, leidžiančiomis pritaikyti nanostruktūras kuriant biojutiklius. Dėl didelės ZnO nanostruktūrų izoelektrinio taško vertės įvairios biomolekulės ant šių paviršių gali būti imobilizuojamos elektrostatiškai, tačiau taip pat galimas tolimesnis modifikavimas siekiant didesnio imobilizavimo efektyvumo. Vienas iš tokio funkcionalizavimo metodų yra savitvarkio monosluoksniu (SAM) sudarymas naudojant įvairius silanus. Silanai prisijungia prie ZnO nanostruktūrų paviršiaus per hidroksilo grupes, o laisvajame silano gale esančios amino, karboksilo, ar kitos reaktingos grupės sudaro sąlygas kovalentiniam biomolekulių imobilizavimui. ZnO taip pat pasižymi intensyvia fotoluminescencija kambario temperatūroje ir turi du fotoluminescencijos maksimumus 370 - 380 ir 500 - 520 nm bangos ilgių ruožuose. Vykstant biomolekulių imobilizavimui ar paviršiaus funkcionalizavimui ZnO struktūrų paviršiuje kinta fotoluminescencijos spektras, todėl ši savybė nesunkiai pritaikoma kuriant optinius biojutiklius.

Šiame tyrime PAN/ZnO nanostruktūros buvo modifikuotos (3-aminopropil)trietoksisilanu (APTES) ir 3-merkaptopropiltrietoksisilanu (MPTMS) bei aukso struktūromis. Naudojant APTES biomolekulės buvo kovalentiškai imobilizuojamos aktyvinant karboksilo grupes biomolekulėse. MPTMS bei aukso struktūrų atveju buvo atliekamas tolimesnis modifikavimas 11-merkaptoundekano rūgštimi (MUR) siekiant sudaryti savitvarkį monosluoksni, ant kurio toliau biomolekulės imobilizuojamos taip pat naudojant karboksilo grupių aktyvavimą 1-etil-3-(3-dimetilaminopropil)karbodiiminu (EDC) ir N-hidroksisukcimidu (NHS). Paviršiaus modifikavimo efektyvumui įvertinti buvo atlikti FTIR matavimai. Antikūnų, žymėtų krienų peroksidaze, imobilizavimo sėkmingumas buvo tirtas naudojant fermentinę reakciją tarp krienų peroksidazės bei 3,3',5,5'-tetrametilbenzidino (TMB), kurios rezultatas yra tirpalo spalvos pokytis. Taip pat buvo sukurta optinė sistema siekiant tirti PAN/ZnO nanostruktūrų fotoluminescencines savybes.

PAN/ZnO struktūrų modifikavimas aukso nanostruktūromis (AuNS) buvo įvertintas SEM (1 pav.) bei EDX elementinės analizės (2 pav.) matavimais, kur matoma smailė, atitinkanti aukso  $M\alpha_1$  energiją ( $M\alpha_1(\text{Au}) = 2,123 \text{ keV}$ ).

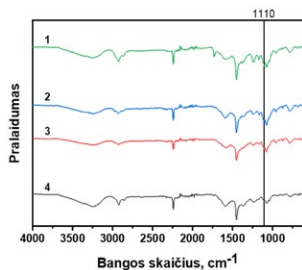


**1 pav.**  
PAN/ZnO/AuNS mėginio SEM nuotraukos.

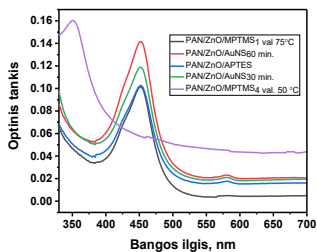


**2 pav.**  
PAN/ZnO/AuNS mėginio EDX elementinės analizės spektras.

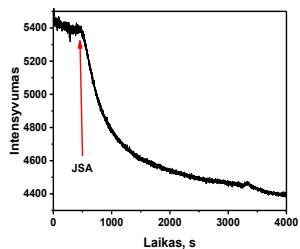
PAN/ZnO nanopluoštai buvo modifikuoti silanais APTES ir MPTMS įvairiomis sąlygomis, rezultatai įvertinti naudojant FTIR matavimus (3 pav.). Smailė ties  $1100\text{ cm}^{-1}$  būdinga Si-O-Si ryšiui leidžia spręsti, kad mėginiai silanizuoti sėkmingai.



**3 pav.**  
MPTMS silanų modifikuotų mėginių FTIR tyrimo spektrai. Žalia kreivė - mėginys silanizuotas 24 val. kambario temperatūroje; mėlyna kreivė - 4 val. silanizacija 50 °C temperatūroje; raudona kreivė - 1 val. silanizacija 75 °C temperatūroje; pilka kreivė - 24 val. silanizacija 50 °C temperatūroje.



**4 pav.**  
Modifikuotų PAN/ZnO nanostruktūrų reakcijos su antikūnais tyrimo spektrofotometru rezultatai.



**5 pav.**  
ZnO liuminescencijos pokytis laike, įvedus JSA baltymą į sistemą.

Krieny peroksidaze žymėtų antikūnų imobilizacija įvertinta spektrofotometriškai registruojant smailę ties 450 nm (4 pav.). Iš rezultatų matoma, kad imobilizacija neįvyko tik viename mėginyje - PAN/ZnO nanostruktūras modifikuojant MPTMS 50 °C 4 val.

Tyrimo metu nustatyta, kad ZnO fotoluminescencija priklauso nuo JSA baltymo adsorbcijos. Įvedus JSA buvo stebimas fotoluminescencijos sumažėjimas, kurį galima paaiškinti ZnO paviršiaus blokavimu JSA baltymu. Po baltymo įvedimo signalas palaipsniui mažėdavo ir stabilizavosi apytiksliai po 1 valandos. Tyrimas parodė, kad galima panaudoti optinę sistemą baltymų adsorbcijos kinetikos įvertinimui.

### **Padėka:**

Projektas bendrai finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0163) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

---

### **Literatūra:**

- [1] Tereshchenko, A.; Bechelany, M.; Viter, R.; Khranovskyy, V.; Smyntyna, V.; Starodub, N., & R. Yakimova N. Optical biosensors based on ZnO nanostructures: advantages and perspectives. A review. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 229, 664–677 (2016).
- [2] Shakti, N.; Gupta, P. S. Structural and Optical Properties of Sol-Gel Prepared ZnO Thin Film. *Appl. Phys. Res.* 2010, 2 (1), 19.
- [3] Cao, Y.; Galoppini, E.; Reyes, P. I.; Duan, Z.; Lu, Y. Morphology Effects on the Biofunctionalization of Nanostructured ZnO. *Langmuir* 2012, 28 (21), 7947–7951.
- [4] Graniel, O.; Fedorenko, V.; Viter, R.; Iatsunskiy, I.; Nowaczyk, G.; Weber, M.; Załęski, K.; Jurga, S.; Smyntyna, V.; Miele, P.; et al. Optical Properties of ZnO Deposited by Atomic Layer Deposition (ALD) on Si Nanowires. *Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol.* 2018, 236–237 (October 2017), 139–146.

**E. Daukšaitė,  
A. Kaušaitė-Minkštienė**

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

## **PPR IMUNINIS JUTIKLIS PIKTYBINIŲ T LĄSTELIŲ BIOŽYMENS CD5 NUSTATYMU**

T ląstelės, dar vadinamos T limfocitais, susiformuoja kaulų čiulpuose, subręsta užkrūčio liaukoje ir dalyvauja viduląstelinių mikrobu naikinimo procesuose proliferuojančiuose fagocituose ar kitose organizmo ląstelėse. Pakitus T limfocitų struktūrai, pradinės funkcijos nebėra atliekamos, susidaro periferinės T ląstelių neoplazmos. Piktybinius T limfocitus stengiamasi identifikuoti ankstyvojoje ligos stadijoje ir jie yra nustatomi pagal paviršiuje ekspresuojamų baltymų kiekių pokyčius taikant antigeno ir antikūno reakcija pagrįstus tyrimo metodus. Puikia alternatyva tradiciniams antikūno-antigeno sąveikos tyrimo metodams yra paviršiaus plazmonų rezonanso (PPR) imuniniai jutikliai, kurie lyginant su šiais metodais turi keletą privalumų: nėra būtinybės papildomomis žymėmis žymėti sąveikaujančių molekulių; detektavimas atliekamas realiaame laike; daugeliu atveju nėra būtinybės ruošti mėginio prieš analizę; analizei pakanka labai mažų mėginio kiekių; detektuojamos tik tos analitės, kurios atrankiai sąveikauja su PPR jutiklio paviršiuje imobilizuota biologinio atpažinimo medžiaga, o sėkmingai parinkus susidariusio antikūno-antigeno komplekso disociacijos sąlygas, gali būti naudojami net keliems dešimtims matavimų [1]. PPR imuninių jutiklių gebėjimas identifikuoti vėžinius žymenis buvo pademonstruotas tiek biologiniuose skysčiuose [2], tiek lizuotų [3] bei gyvų vėžinių ląstelių mėginiuose [4,5]. Vienas iš stipriai ekspresuojamų piktybinių T ląstelių paviršiaus baltymų yra viengrandis transmembraninis glikoproteinas CD5 [6]. Nors CD5 šiuo metu yra laikomas vienu iš būdingų piktybinių T ląstelių antigenų [7], tačiau mūsų žiniomis iki šiol nėra sukonstruoto nei vieno PPR imuninio jutiklio šiam biožymeniui nustatyti. Vienas svarbiausių etapų konstruojant PPR imuninius jutiklius yra antikūnų imobilizavimas [8]. Antikūnų molekulės yra nesimetriškos ir dėl to jie gali būti imobilizuoti kryptingai arba atsitiktinai. Dėl atsitiktinės antikūnų molekulių orientacijos jutiklio paviršiuje yra prarandamas jų biologinis aktyvumas, o dėl to sumažėja ir jutiklio jautris. Tuo tarpu kryptingai imobilizuoti antikūnai pasižymi žymiai efektyvesne sąveika su antigenu (analite), nes antigeną atpažįstančios sritys antikūno molekulėje yra lengvai jai prieinamos. Vienas iš kryptingo antikūnų imobilizavimo būdų, naudojant baltymą G (bG), pagrįstas gimininga sąveika tarp bG ir antikūno Fc srities, kuri yra tik viena antikūno struktūroje. bG panaudojimas kryptingam antikūnų imobilizavimui įgalina pasiekti labai didelį antikūno-antigeno sąveikos efektyvumą, o dėl to ir didelį analizės jautrį.

## Metodika

11-merkaptoundekano rūgštimi (11-MUR) padengtas PPR jutiklio lustas kovalentiškai modifikuojamas bG. Tuomet imobilizuojami monokloniniai pelės IgG2B antikūnai prieš baltymą CD5 (anti-CD5). Vėliau bG ir anti-CD5 molekulės surišamos tarpusavyje dimetilpimelimidato hidrokloridu (DMP). Galiausiai tiriama gimininga antikūno-antigeno sąveika ir regeneruojamas PPR jutiklio lusto paviršius.

## Rezultatai ir jų aptarimas

11-MUR padengtų PPR jutiklių lustų paviršiuje imobilizuoti bG pasirinkta kabdii-  
midinė-sukcimidinė imobilizacijos metodika, kuri pagrįsta karboksilo funkcinių grupių aktyvavimu N-(3-dimetilaminopropil)-N'-etilkarbodiimido hidroklorido (EDC) ir N-hidroksisukcinimido (NHS) tirpalų vandenyje mišiniu. Aktyvavimo metu susidaro labai re-  
akcingi sukcinimido esteriai reaguojantys su pirminėmis amino funkcinėmis grupėmis susidarant kovalentiniam ryšiui. Atsižvelgiant į rekombinantinio bG išskirto iš E. coli izo-  
elektrinio taško vertę bei atlikus eksperimentinius tyrimus, bG prijungimui pasirinktas 10 mmol/l natrio acetato (NaAc) buferinis tirpalas pH 4.5, o bG tirpalo naudojamo imo-  
bilizavimui koncentracija 10.48  $\mu\text{mol/l}$ . Naudojant šią koncentraciją, bG prisijungimo sukel-  
tas analizinis signalas yra 213.6  $\text{m}^\circ$ , o prijungto bG paviršinė koncentracija 1.78 ng/  
 $\text{mm}^2$  (N:5). Įvertinus PPR kampo kitimą laike bG prijungimo etape nustatyta, kad 1200 s  
yra pakankama trukmė, nes esant jai ilgesnei prijungto bG kiekis nebedidėja.

Optimizuojant anti-CD5 imobilizavimo sąlygas buvo išbandyti 100.0, 300.0 ir 500 nmol/l antikūnų tirpalai. Jų prisijungimo sukeltas analizinis signalas atitinkamai buvo 422.99, 683.86 ir 819.15  $\text{m}^\circ$ . Tai atitinka 3.52, 5.69 ir 6,83 ng/ $\text{mm}^2$  paviršinę imobilizuoto anti-CD5 koncentraciją. Užregistravus imobilizuoto anti-CD5 sąveikos su vienodu CD5 kiekiu (50 nmol/l) sensogramas, apskaičiuotas CD5 prisijungimo sukel-  
tas PPR signalas buvo atitinkamai 13.18, 21.39 ir 27.13  $\text{m}^\circ$ . Atsižvelgiant į tyrimo re-  
zultatus, imobilizavimui buvo pasirinkta naudoti 500 nmol/l anti-CD5 koncentraciją. Įvertinus PPR kampo kitimą laike anti-CD5 imobilizavimo etape nustatyta, kad 3600 s  
yra pakankama trukmė, nes esant jai ilgesnei prijungto anti-CD5 kiekis nebedidėja.

Atliekant tyrimus buvo pastebėta, kad regeneravimo stadijoje nuo jutiklio pavir-  
šiaus pašalinamas ne tik CD5, net ir anti-CD5. Siekiant šito išvengti, buvo panaudo-  
ta papildoma kryžminio bG molekulių surišimo procedūra PPR jutiklio lusto paviršių  
inkubuojant dimetilpimelimidato hidroklorido (DMP) 0.1 mol/l natrio borato bufe-  
riniame tirpale pH 9.2. Esant šarminiai terpei DMP reaguoja su baltymų molekulių  
pirminiais  $\alpha$  ir  $\epsilon$  aminais ir sudaro amidinius ryšius. Tokiu būdu bG ir anti-CD5 sujun-  
giami tarpusavyje ir atliekant regeneravimo procedūrą nebegali desorbuoti nuo pa-  
viršiaus. Optimizuojant surišimo sąlygas buvo ištirta DMP koncentracijos bei surišimo  
trukmės įtaka PPR signalui sukeltam anti-CD5 ir CD5 sąveikos. Tiriant DMP koncentra-  
cijos įtaką buvo naudota 0.4, 2.0 ir 20.0 mmol/l DMP koncentracija ir 45 min surišimo  
trukmė. Buvo pastebėta, kad didėjant DMP koncentracijai anti-CD5 ir CD5 sąveikos  
sukeltas PPR signalas mažėja. Tai galima paaiškinti daline anti-CD5 inaktyvacija DMP  
prisijungiant antikūnų aktyviuosiuose centruose – paratopuose, dėl ko anti-CD5 ne-  
begali sąveikauti su CD5. Tuo tarpu ilgėjant surišimo trukmei nuo 15 iki 45 min.  
buvo stebėtas analizinio signalo didėjimas: 15 min. 25.37  $\text{m}^\circ$ , 30 min. 32.84  $\text{m}^\circ$  ir  
45 min. 50.30  $\text{m}^\circ$  (esant 150 nmol/l CD5). Tai galima paaiškinti didėjančia pavirši-  
ne anti-CD5 koncentracija dėl mažėjančios jo desorbcijos. Tačiau pailginus surišimo  
trukmę iki 60 min. buvo pastebėtas analizinio signalo sumažėjimas (35.01  $\text{m}^\circ$ ), kuris  
taip pat gali būti paaiškintas daline anti-CD5 inaktyvacija DMP prisijungiant antikūnų  
paratopuose. Remiantis tyrimų rezultatais, tolimesniems tyrimams buvo nuspręsta  
naudoti 0.4 mmol/l DMP koncentracija ir 45 min surišimo trukmę.

Paviršiaus regeneravimas leidžia pakartotinai panaudoti jutiklį keletą, keliolika ar net keliasdešimt kartų. Tad norint sukurtą jutiklį taikyti daugkartiniam naudojimui, reikia parinkti tinkamą regeneracijos tirpalą, kurio efektyvumas būtų lygus 100 % arba kaip galima didesnis. Regeneravimo metu giminingas antikūno ir antigeno kompleksas būtų pilnai suardytas nesumažėjant imobilizuoto anti-CD5 aktyvumui. Parenkant regeneracinį tirpalą buvo išbandyti šie regeneraciniai tirpalai: 100 mmol/l HCl, 50 mmol/l NaOH + 0.5 % SDS, 10 mmol/l NaOH + 0,5% SDS, 10 mmol/l Gly/HCl pH 4.0, 10 mmol/l Gly/HCl pH 3.0; 10 mmol/l Gly/HCl pH 2.0, 10 mmol/l Gly/HCl pH 1.0, 10 mmol PBS pH 8.5 + 10 mM sorbitolis ir 10 mmol/l HEPES/NaOH pH 8.8. Didžiausiu regeneravimo efektyvumu (99.83 %, esant 500 nmol/l CD5 ir 300 s regeneracijos trukmei) pasižymėjo 10 mmol/l Gly/HCl pH 4.0 tirpalas. Taip pat buvo tirta regeneravimo efektyvumo priklausomybė nuo jutiklio paviršiaus veikimo regeneraciniu tirpalu trukmės. Iš šio tyrimo rezultatų tapo akivaizdu, jog regeneracinio tirpalo efektyvumas priklauso nuo regeneravimo trukmės. Kuo ilgesnė regeneravimo trukmė, tuo pasiekiamas didesnis regeneravimo efektyvumas. Tyrimu metu nustatyta, kad 300 s regeneravimo trukmė yra pakankama pilnam anti-CD5-CD5 komplekso suardymui. Taip pat, atlikus trijų vienodos koncentracijos CD5 tirpalų analizę regeneraciniu tirpalu naudojant 10 mmol/l Gly/HCl pH 2.0, nustatyta, kad registruojamas analizinis signalas svyruoja 5 % paklaidų ribose, todėl galima teigti, kad regeneravimo metu imobilizuoto anti-CD5 aktyvumas nėra paveikiamas ir sąveika išlieka efektyvi.

Tiriant mobilizuoto anti-CD5 ir įvairios koncentracijos CD5 sąveikos sukeltą analizinį signalą nustatyta, kad tiesioginiu metodu mažiausia nustatoma CD5 koncentracija yra 5.8 nmol/l. Kadangi CD5 koncentracija yra nedidelė, pvz., plazmoje 1 – 24 ng/ml (mediana 2 ng/ml), tai tiesioginis analizės formatas nėra tinkamas CD5 koncentracijos nustatymui realiuose mėginiuose. Siekiant padidinti jutiklio jautrį ir sumažinti aptikimo ribą, pradėti tyrimai taikant netiesioginį sumuštinio metodą analizinio signalo stiprinimui panaudojant magnetines auksu nanodaleles modifikuotas monokloniniais pelės IgG2A antikūnais prieš baltymą CD5. Pirminiai tyrimo rezultatai leidžia daryti prielaidą, kad jų panaudojimas leis žymiai pagerinti jutiklio analizines charakteristikas.

## Padėka

Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

---

## Literatūra

- [1] Liedberg B., Nylander C., Lundström I., *Biosensors & Bioelectronics*, 1995, 10.
- [2] Chou S.F., Hsu W.L., Hwang J.M. ir kt., *Biosens. Bioelectron.*, 2004, 19, p. 999.
- [3] Kyo M., Usui-Aoki K., Koga H., *Anal. Chem.*, 2005, 77, p. 7115.
- [4] Shanehbandi D., Majidi J., Kazemi T. ir kt., *Adv. Pharm. Bull.*, 2017, 7, p. 189.
- [5] Mendoza A., Torrisi D.M., Sell S. ir kt., *Analyst*, 2016, 141, p. 704.
- [6] Campana D. ir kt., *Blood*, 1991, 77 (7), p. 1546–1554.
- [7] Mamonkin M., Rouse R.H., Tashiro H. ir kt., *Blood*, 2015, 126, p. 983.
- [8] Jeong M.L., Hyun K.P., Jung Y. ir kt., *Anal. Chem.*, 2007, 79(7), p. 2680–2687.



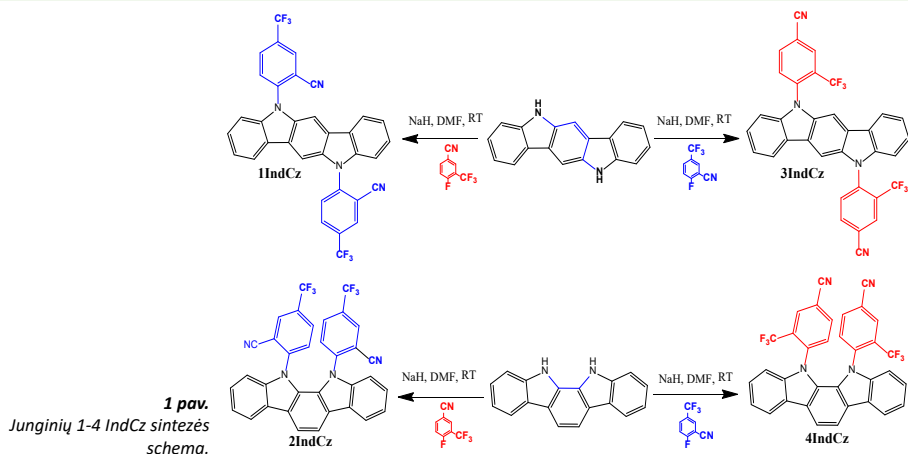
**K. Dabrovska,  
G. Kručiūtė,  
D. Gudeika**

*Polimerų chemijos ir  
technologijos katedra, Kauno  
Technologijos Universitetas, Kaunas*

## ORGANINIŲ PUSLAIDININKIŲ SINTEZĖ, SAVYBIŲ TYRIMAS IR TAIKYMAS ORGANINIUOSE ŠVIESTUKUOSE

Dėl spalvų suderinamumo, lankstumo, skaidrumo ir efektyvumo organiniai šviesos diodai (OLED) yra naudojami plokščiakrainiuose monitoriuose ir kietos būsenos apšvietimo technologijose [1-4]. Dėl šių priežasčių organiniai puslaidininkiai ir OLED sulaukė didelio komercinio susidomėjimo optoelektronikos srityje. Daugelis organinių puslaidininkių pasižymi labai skirtingu šviesos sklaidymo pobūdžiu praskietuose ir koncentruotuose tirpaluose. Neseniai mokslininkai pastebėjo agregacijos indukuotos emisijos (AIE) ir agregacijos indukuotos emisijos padidimo (AIEE) efektus [5,6]. AIE metodas taikomas optoelektronikos prietaisuose [7], cheminiuose jutikliuose [8] ir biologiniuose zonduose [9]. AIE leidžia pasiekti didelę fotoluminescencinę kvantinę išieigą (PLQY) sluoksniuose [10] ir būtent dėl šios priežasties tokius molekulinis agregatus galima taikyti efektyviuose nelegiruotuose OLED prietaisuose [11,12].

Šiame darbe buvo susintetintos ir charakterizuotos naujos indolokarbazolo medžiagos (1 pav.), turinčios cianofeniltrifluorometilgrupes ir pasižyminčios agregacijos sukeltos emisijos padidimu.

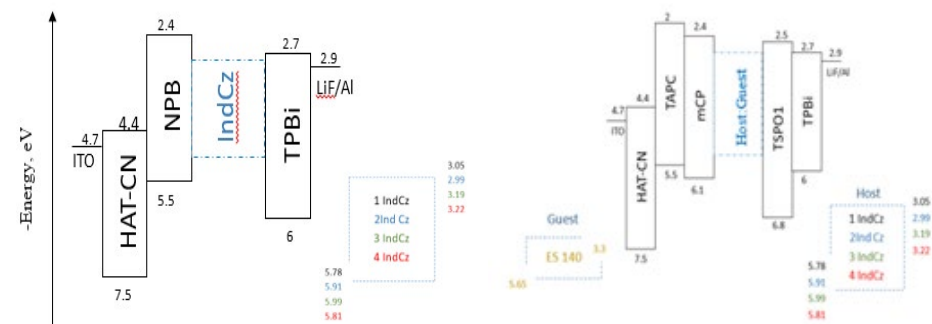


Ištirtos molekulių fotofizikinės, elektrocheminės ir fotoelektrinės savybės. Susintetinti junginiai parodė efektyvią emisiją kietoje būsenoje esant fluorescencijos intensyvumo maksimumui svyruojančiam nuo 483 iki 521 nm ir apskaičiuotos fotoluminescencijos kvantinės išieigos nuo 6 iki 58 %, kai draustinės optinės juostos tarpai kietoje būsenoje buvo nuo 2,59 iki 5,99 eV. Fotoelektronų emisijos spektrofotometrija išmatuota, kad jonizacijos potencialų vertės išsidėstė intervale nuo 5,78 iki 5,99 eV. Ištirtų junginių gryni sluoksniai pasižymėjo labai skirtingomis krūvio pernašos savybėmis, o maksimalus skylių judris siekė  $10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/Vs esant dideliame elektriniam laukui.

Panaudojant susintetintus junginius 1IndCz, 2IndCz, 3IndCz ir 4IndCz suformuoti trijų skirtingų rūšių OLED. (1 lentelė, 2 pav.).

### 1 lentelė. Tirtų junginių paruoštų prietaisų tipai.

Prietaisas	Tipas	Spinduolio sluoksnis
IC1	I	1IndCz
IC2		2IndCz
IC3		3IndCz
IC4		4IndCz
IP1	II	1IndCz
IP2		2IndCz
IP3		3IndCz
IP4		4IndCz
IH1	III	1IndCz:ES140
IH2		2IndCz:ES140
IH3		3IndCz:ES140
IH4		4IndCz1:ES140



### 2 pav.

Kairėje – IC serijos prietaisų energijos schema. Dešinėje – IP ir IH serijos prietaisų energijos diagrama.

Efektyviausias suformuotas OLED, kurio sluoksnis buvo sudarytas iš gryno tiriamojo junginio, parodė 5,04 V įjungimo įtampą, 1673,26 cd/m<sup>2</sup> maksimalų ryškumą, 6,59 cd/A maksimalų srovės efektyvumą ir apytiksliai 2,22 % išorinį kvantinį efektyvumą. Geriausias prietaisas, kurio emisinį sluoksnį sudarė tiriamojo junginio TADF spinduolis, parodė 3,90 V įjungimo įtampą, 1649 cd/m<sup>2</sup> maksimalų ryškumą. 38,58 cd/A maksimalų srovės efektyvumą ir 11,09 % išorinį kvantinį efektyvumą.

---

## Literatūra

- [1] Guo, F. ir kt. *Light: Science & Applications*, 2017, 6, 1-8.
- [2] Xu, R. P. ir kt. *Journal of Materials Chemistry C*, 2016, 4, 9116-9142.
- [3] Jou, J. H. ir kt. *Journal of Materials Chemistry C*, 2015, 3, 2974-3002.
- [4] Raineke, S. *Nature Materials*, 2015, 14, 459-462.
- [5] Hong, Y. ir kt. *Chemical Society Reviews*, 2011, 40, 5361-5388.
- [6] Hong, Y. ir kt. *Chemical Communications*, 2009, 29, 4332-4353.
- [7] Li, H. ir kt. *Chemical Communications*, 2011, 47, 11273-11275.
- [8] Gao, M. ir kt. *ACS Sensors*, 2017, 2, 1382-1399.
- [9] Wang, M. ir kt. *Journal of Materials Chemistry A*, 2010, 20, 1858-1867.
- [10] Mei, J. ir kt. *Advanced Materials*, 2014, 26, 1-51.
- [11] Lin, G. ir kt. *ACS Applied Materials and Interfaces*, 2016, 8, 16799-16808.
- [12] Volyniuk, D. ir kt. *Journal of Luminescence*, 2017, 192, 534-540.

A. Drevilkauskaitė<sup>1</sup>, A. Al-Ashouri<sup>2</sup>,  
E. Kasparavičius<sup>1</sup>, T. Malinauskas<sup>1</sup>,  
S. Albrecht<sup>2</sup>, V. Getautis<sup>1</sup>,  
A. Magomedov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kauno technologijos universitetas,  
organinės chemijos katedra

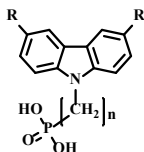
<sup>2</sup> Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien  
und Energie GmbH, Germany, Berlin, Germany

## SKYLĖMS SELEKTYVŪS MONOSLUOKSNIAI SKIRTI SAULĖS ELEMENTAMS

Sparčiai augant atsinaujinančios energetikos sektoriui, vis daugiau dėmesio yra skiriama saulės elementų tyrimams. Siekiama, kad prietaisai, skirti saulės energiją paversti į elektrą, būtų kuo efektyvesni, pigesni bei paprastesni. Kadangi tipinis saulės elementas yra sudarytas iš skirtingas funkcijas atliekančių sluoksnių, svarbu optimizuoti kiekvieną jų, atsižvelgiant į jų tarpusavio sąveiką.

Pastarąjį dešimtmetį plačiai tyrinėjamuose perovskitiniuose saulės elementuose, kaip silpniausia grandis yra įvardijama skyles transportuojanti medžiaga (STM), ribojanti prietaiso efektyvumą [1]. Šis sluoksnis turi užtikrinti atrankumą teigiamiems krūvininkams, bei gerą kontaktą su šviesą absorbuojančiu sluoksniu - perovskitu. Atliekant tyrimus yra ieškomos alternatyvios medžiagos, kurios pasižymėtų paprastesniu formavimo metodu bei aukštesniu efektyvumu.

Naudojant tradicinės STM, dažniausiai yra suformuojami 10-300 nm storio plėvelės. Neseniai, kaip alternatyva buvo sukurti skylėms atrankūs monosluoksniai. Šių medžiagų sluoksnio formavimui naudojamas paprastesnis metodas, o dideliame plotui padengti, įskaitant ir nelygius paviršius, reikia itin mažai medžiagos. Tam, kad įrodyti šios strategijos konkurencingumą, buvo susintetintos medžiagos, turinčios karbazolo ir fosfono rūgšties fragmentus. Aukščiausias našumas buvo pasiektas su 2PACz (1 pav. R = -H, n = 2) [2].



**1 pav.**  
karbazolo fragmentą turinčių medžiagų  
bendra struktūrinė formulė

Šioje molekulėje karbazolo fragmentas suteikia gerą atrankumą teigiamiems krūvininkams, tuo tarpu fosfono rūgšties inkarinė grupė lengvai prisijungia prie laidaus indžio alavo oksido paviršiaus, taip suformuojant monosluoksnį.

Tęsiant tyrimus, buvo siekiama nustatyti alifatikos ilgio įtaką saulės elementų veikimui. Šiam tikslui pasiekti buvo susintetintos karbazolo fosfono rūgštys, turinčios skirtingo ilgio alifatinės grandinės bei ištirtos jų savybės (1 pav.). Nustatyta, kad priklausomai nuo karbazolo pakaitų, alifatinės grandinės įtaka pasireiškia skirtingu intensyvumu. Didžiausia įtaka stebima užpildymo koeficientui.

Projektas bendrai finansuotas iš Europos Sąjungos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0084) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

---

### Literatūra

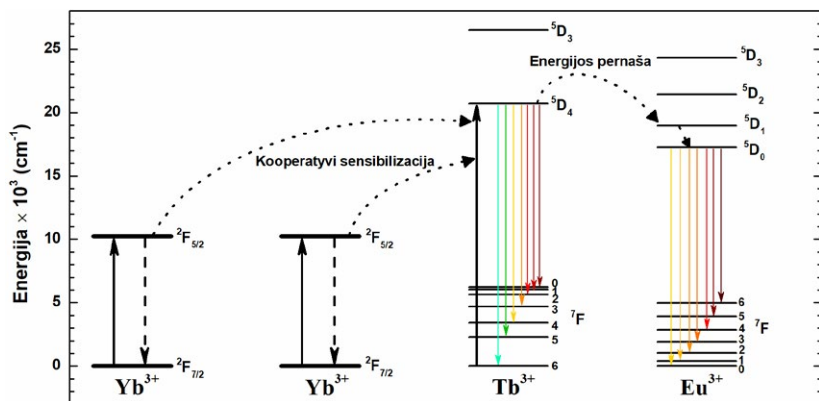
- [1] A.K. Jena, A. Kulkarni, T. Miyasaka *Halide Perovskite Photovoltaics: Background, Status, and Future Prospects. Chemical Reviews, ACS* 119(5), 3036–3103 (2019)
- [2] A. Al-Ashouri, A. Magomedov, M. Roß, et al. Conformal monolayer contacts with lossless interfaces for perovskite single junction and monolithic tandem solar cells. *Energy & Environmental Science*, 12(11), 3356–3369. (2019)

**E. Ežerskytė,  
A. Katelnikovas**

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

## ĮPRASTINĖS IR AUKŠTYNVERTĖS LIUMINESCENCIJOS BIPO<sub>4</sub>:YB<sup>3+</sup>, TB<sup>3+</sup>, EU<sup>3+</sup> JUNGINIUOSE TYRIMAS

Tiek įprastinių, tiek aukštynerčių liuminoforų emituojamos spinduliuotės spalva priklauso nuo matricos cheminės sudėties, kristalinės struktūros ir kitų veiksnių. Neseniai buvo pastebėta, kad į liuminoforus, legiruotus Tb<sup>3+</sup> ir Eu<sup>3+</sup> jonais, papildomai pridėjus Yb<sup>3+</sup> jonų, galima taip pat stebėti ne tik įprastinę, bet ir aukštynerčią liuminescenciją, t. y. sužadinus IR spinduliuote, gaunama žalia ir/arba oranžinė/raudona spinduliuotė. 1 pav. pavaizduotoje Yb<sup>3+</sup>-Tb<sup>3+</sup>-Eu<sup>3+</sup> sistemoje Yb<sup>3+</sup> jonai sugeria IR spinduliuotę ir gautą energiją perduoda šalia esantiems Tb<sup>3+</sup> jonams. Tb<sup>3+</sup> jonai, savo ruožtu, gautą energiją perduoda Eu<sup>3+</sup> jonams, kurie emituoja oranžinę/raudoną šviesą. Jeigu šalia Tb<sup>3+</sup> jonų nėra Eu<sup>3+</sup> jonų, tuomet jie patys emituoja žalią šviesą [1, 2]. Be to, BiPO<sub>4</sub>:Yb<sup>3+</sup>, Tb<sup>3+</sup>, Eu<sup>3+</sup> fosforai, priklausomai nuo sintezės sąlygų, gali suformuoti tris skirtingas kristalines struktūras (trigoninę, žematemperatūrinę bei aukštatemperatūrinę monoklinines), o tai irgi daro įtaką junginyje esančių lantanoidų emisijos spalvai [3, 4].

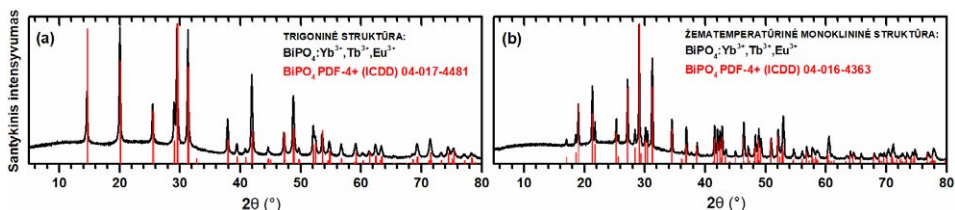


**1 pav.**  
*Yb<sup>3+</sup>, Tb<sup>3+</sup> ir Eu<sup>3+</sup> jonų energinių lygmenų schema.*

Dėl aukščiau aprašytų priežasčių buvo nuspręsta susintetinti (konusodinimo ir kietafazių reakcijų metodais) ir ištirti  $\text{Yb}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$  jonais legiruoto  $\text{BiPO}_4$  optines savybes. Buvo tikimasi, kad keičiant  $\text{Tb}^{3+}/\text{Eu}^{3+}$  santykį galima gauti liuminoforus, emitojančius nuo žalios iki raudonos sritys.

Susintetintų fosforų struktūrinės, morfologinės ir optinės savybės atitinkamai buvo tiriamos Rentgeno spindulių difrakcijos (XRD), skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM) ir UV-VIS-NIR spektroskopijos metodais.

2 pav. pateiktos susintetintų junginių Rentgeno spindulių difraktogramos, kurios, esant bet kokiam  $\text{Tb}^{3+}/\text{Eu}^{3+}$  moliniam santykiui, puikiai sutampa su standartais, o tai įrodo, jog gauti trigoninės (a) ir žematemperatūrinės monoklininės (b) kristalinės struktūros liuminoforai neturi kitų fazių priemaišų.



**2 pav.**

*BiPO<sub>4</sub>:Yb<sup>3+</sup>, Tb<sup>3+</sup>, Eu<sup>3+</sup> junginių Rentgeno spindulių difraktogramos.*

$\text{BiPO}_4:\text{Yb}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$  liuminofoų SEM nuotraukos, atspindžio, sužadavimo ir emisijos spektrai, gesimo kreivės, vidutinės emisijos gesimo trukmės, CIE1931 spalvinės koordinatės taip pat buvo išanalizuotos ir bus aptartos konferencijos metu.

Projektas bendrai finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr.09.3.3.-LMT-K-712-16-0161) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

### Literatūra

- [1] Dong, H., et al., Photon upconversion in  $\text{Yb}^{3+}\text{-Tb}^{3+}$  and  $\text{Yb}^{3+}\text{-Eu}^{3+}$  activated core/shell nanoparticles with dual-band excitation. *Journal of Materials Chemistry C*, 2016. 4(19): p. 4186-4192.
- [2] Grzyb, T., Bright and tunable up-conversion luminescence through cooperative energy transfer in  $\text{Yb}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$  and  $\text{Eu}^{3+}$  co-doped  $\text{LaPO}_4$  nanocrystals. *RSC Advances*, 2014. 4(6): p. 2590-2595.
- [3] Achary, S.N., et al., Experimental and theoretical investigations on the polymorphism and metastability of  $\text{BiPO}_4$ . *Dalton Transactions*, 2013. 42(42): p. 14999-15015.
- [4] Liu, S., et al., Synthesis and luminescent properties of  $\text{Eu}^{3+}$  and  $\text{Dy}^{3+}$  doped  $\text{BiPO}_4$  phosphors for near UV-based white LEDs. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2013. 24(11): p. 4253-4257.

**S. Gailūnaitė,  
S. Budrienė**

*Vilniaus Universitetas,  
Chemijos ir Geomokslų Fakultetas,  
Chemijos Institutas, Naugarduko 24,  
03225 Vilnius, Lietuva*

## **NESOTIEJI POLIESTERIAI – BIOAUDINIAMS KURTI: PDMS IR DAUGIAFUNKCINIŲ HIDROKSIJUNGINIŲ ĮTAKA STRUKTŪRAI IR SAVYBĖMS**

Kuriant naujas medžiagas audinių inžinerijai, naudojamas lankstus, netoksiškas ir biologiškai suderinamas siloksanas poli(dimetilsiloksanas) (PDMS) bei biologiškai skaidūs ir lengvai apdirbami polimerai. PDMS pritaikymą audinių inžinerijoje riboja mažas mechaninis patvarumas ir hidrofobiškumas. Siekiant šiuos trūkumus pašalinti, PDMS yra įvairiai modifikuojamas, tačiau laikui bėgant PDMS hidrofobiškumas atsišlato. Projekto tikslas – iš poliesterių, turinčių PDMS ir sorbitolio arba PEG arba glicerolio grandžių, fotopolimerizacijos būdu suformuoti biosuderinamas ir bioskaidžias plėveles, kurios galėtų būti pritaikytos bioaudiniams kurti.

Biologiškai suderinamų hidrofilinių poliesterių, turinčių siloksano grandis, sintezė buvo atliekama dviem stadijomis. Pirmoje stadijoje buvo atlikta maleino rūgšties anhidrido (MRA), azelaino rūgšties (AZR) ir dietilenglikolio (DEG) polikondensacija. Antroje sintezės stadijoje gauti oligomerai buvo modifikuoti  $\alpha,\omega$ -dihidroksi-polidimetilsiloksanu ( $\alpha,\omega$ -dihidroksi-PDMS) ir daugiafunkciniais hidroksijunginiais: sorbitoliu (SORB), gliceroliu (GLIC) arba polietilenglikoliu (PEG). Gautų poliesterių sandara buvo įvertinta FT-IR,  $H^1$  BMR spektroskopija ir elementine analize. Silicio kiekis susidariusiose plėvelėse, priklausomai nuo sintezės sąlygų, svyravo nuo 2,1 iki 8,4 %. Plėvelėms iš modifikuotų poliesterių gauti buvo naudojama ultravioletinė lempa ir fotoiniciatorius IRG 651. Nustatyta optimaliausia kietinimo trukmė – 25–30 min. Ištirta poliesterių sintezės sąlygų, tokių kaip naudotų komponentų (MRA ir AZR) molinis santykis, ir modifikavimui naudotų junginių bei kietinimo priedų įtaka gautų plėvelių savybėms. Įvertintas gautų plėvelių brinkimo laipsnis etanolyje ir vandenyje: labiau brinksta plėvelės, kurios buvo gautos iš poliesterių, modifikuotų gliceroliu, o – mažiausiai – iš poliesterių, modifikuotų PEG. SEM metodu įvertinta suformuotų plėvelių paviršiaus morfologija. Labiausiai porėtos plėvelės gautos iš poliesterių, modifikuotų SORB. PEG modifikuotų plėvelių paviršius yra labiau grublėtas, o vidus – lygus. GLIC modifikuotų plėvelių paviršius yra lygus, o vidus – sluoksniuotas. Iš poliesterių gautos plėvelės yra termiškai stabilios. Pagrindinis poliesterio grandinės skilimas vyksta keliomis stadijomis 120–480 °C temperatūroje, ir pagrindine vyksta dėl esterinių ryšių skilimo. Esterinių grupių, esančių prie MRA, maksimalaus skilimo greičio temperatūra ( $T^m$ ) yra 340–350 °C. Šios stadijos metu medžiaga netenka 40–59 % savo masės. Esterinių grupių, esančių prie AZR,  $T^m = 405$ –415 °C. Šios stadijos metu netenkama 9–51 % masės. Plėvelių, gautų iš poliesterių, modifikuotų SORB, didėjant MRA kiekiui,  $T_s$  didėja nuo -17 iki 1 °C. Kai modifikavimui naudotas PEG,  $T_s$  didėja nuo -13 iki



-8 °C, kai GLIC,  $T_g$  didėja nuo 20 iki 23 °C. Poliesterių modifikavimui naudojant sorbitolį, geromis mechaninėmis savybėmis pasižymėjo plėvelė, gauta, kai [MRA]:[AZR]:[DEG]:[SORB]:[PDMS] = 0,7:0,3:0,8:0,2:0,1. Šios plėvelės santykinis pailgėjimas ( $X_R$ ) yra ~ 3 kartus, o Jungo modulis (E) ~ 12 kartų didesni nei komercinio PDMS. Naudojant PEG, kai [MRA]:[AZR]:[DEG]:[PEG]:[PDMS] = 0,8:0,2:0,9:0,1:0,1, plėvelės  $X_R$  buvo apie 2 kartus, o E ~ 24 kartų didesni nei komercinio PDMS. Naudojant GLIC, kai [MRA]:[AZR]:[DEG]:[GLIC]:[PDMS] = 0,6:0,4:0,8:0,2:0,1 ir 0,7:0,3:0,8:0,2: 0,1, plėvelių  $X_R$  4–6 kartus, o E ~ 11–18 kartų didesni nei komercinio PDMS. Gautos plėvelės pasižymėjo geresniu hidrofiliškumu, jų vilgymo kampas buvo mažesnis (78–97 °). Lyginant su komercinio PDMS plėvele (Sylgard 184) (101 °). Susintetintos plėvelės yra skaidžios 0,1 M NaOH tirpale. Nustatyta, kad plėvelės labiau skaidosi, kai poliesterių sintezei naudojamas didesnis SORB arba PEG ir mažesnis MRA kiekis. Didžiausias masės praradimas stebimas po pirmos savaitės (14–35 %). Skylant poliesteriui, visų plėvelių paviršius tampa nelygus ir porėtas.

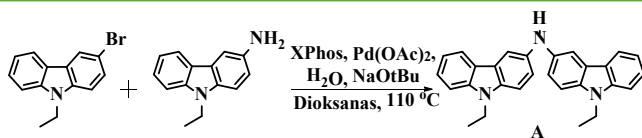
A. Ilčiukaitė,  
V. Getautis

*Kauno technologijos  
universitetas*

## TEIGIAMUS KRŪVININKUS TRANSPORTUOJANTYS KETURIS KARBAZO- LILCHROMOFORUS TURINTYS FLUORENO DARINIAI EFEKTYVIEMS PEROVSKITINIAMS SAULĖS ELEMENTAMS

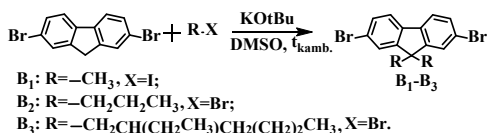
Saulės energija yra pats galingiausias žinomas energijos šaltinis. Šiuo metu didžiąją dalį rinkos užima silicio Saulės elementai (SE), tačiau silicio apdorojimas yra labai brangus ir sudėtingas procesas. Todėl mokslininkai ieško pigesnių arternatyvų silicio SE. Vieni iš perspektyviausių yra perovskitiniai SE, kurių efektyvumas per pastarąjį dešimtmetį išaugo iki 27 % [1]. Šie elementai pasižymi konstrukcijos paprastumu bei pigiomis žaliavomis. Tačiau susiduriama su keletą trūkumų jų komercializavimui. Pirmia, krūvininkų pernašai elemente naudojami organiniai puslaidininkiai yra brangūs [2], antra, perovskitas yra gana nestabilus. Šiuo metu vyksta intensyvi paieška paprastesnių sintezės metodų, kurių metu būtų gaunami pigesni, bet efektyvūs puslaidininkiai. Taip pat siekama sukurti puslaidininkius, kurie pasižymėtų apsauginėmis savybėmis, taip užtikrinant prietaisų ilgaamžiškumą.

Žinant, jog junginiai su karbazolo fragmentais pasižymi aukštu krūvininkų judriu bei suteikia galimybę medžiagas naudoti SE be legiravimo, kaip šoninius naujų molekulių fragmentus nuspręsta naudoti bis(9-etil-9*H*-karbazol-3-il)aminą (prekursorių **A**). Pastarasis gautas 3-amino-9-etilkarbazolui reaguojant su 3-brom-9-etilkarbazolu.



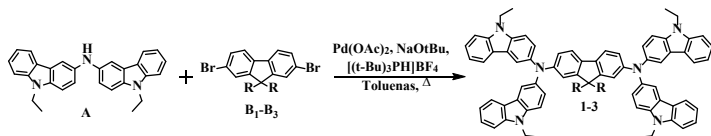
**1. pav.**  
*Prekursoriaus A sintezės schema.*

Prekursoriai **B**<sub>1</sub>, **B**<sub>2</sub>, **B**<sub>3</sub> gauti prie dibromfluoreno prijungus atitinkamai metil-, propil- bei 2-etilheksilo grandinėles.



**2. pav.**  
*Prekursorių B<sub>1</sub>-B<sub>3</sub> sintezės schema.*

Prie gautų fluoreno darinių **B**<sub>1</sub>-**B**<sub>3</sub> prijungtas karbazolo klasės junginys **A** ir išskirti tiksliniai produktai **1-3**.

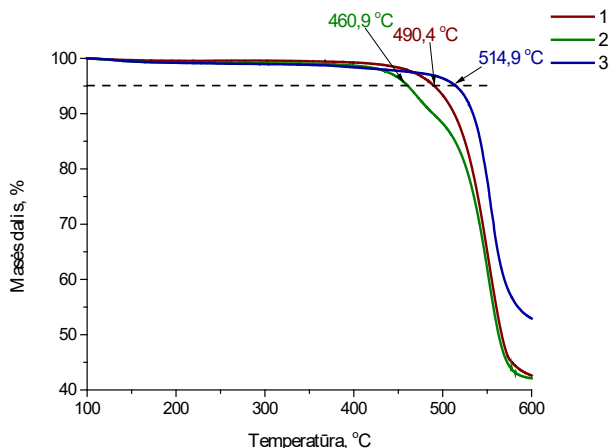


**3. pav.**  
Tikslinių junginių  
1-3 sintezės schema.

1: R = -CH<sub>3</sub>, X = I;  
2: R = -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, X = Br;  
3: R = -CH<sub>2</sub>CH(CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, X = Br.

Naujų tikslinių organinių puslaidininkių **1-3** išeigos siekia 50 %. Gautų tikslinių junginių tinkamumo perovskitiniams Saulės elementams įvertinimui buvo nustatytos jų terminės ir elektrinės savybės.

Geba sudaryti plonas, patvarias bei labilias organines plėveles yra svarbi STM savybė [3]. Siekiant išsiaiškinti, kaip sočių alifatinių grandinėlių ilgis paveikia morfologines medžiagų savybes bei jų terminį stabilumą, buvo atliktos tikslinių junginių diferencinės skenuojamosios kalometrijos (DSK)<sup>1</sup> ir termogravimetrinės analizės (TGA)\*.



**4. pav.**  
Junginių 1-3 termo-  
gravimetrinės kreivės.

Paveiksle 4 pateiktos junginių **1-3** termogravimetrinės kreivės. Iš gautų duomenų matoma, kad junginys **1** 5% masės praranda prie 490 °C, medžiaga **2** prie 460,9 °C temperatūros, tačiau prijungus ilgesnes sočias alkilines grandines terminis patvarumas padidėja, t. y. viršija 500 °C.

### 1 lentelė. Medžiagų **1-3** terminės charakteristikos

Junginys	T <sub>st.</sub> °C		T <sub>5% mas. nuost.</sub> °C
	Pirmas kaitinimas	Antras kaitinimas	
<b>13</b>	197,9	196,2	490,4
<b>14</b>	181,6	183,0	460,9
<b>15</b>	126,7	126,8	514,9

<sup>1</sup> DSK ir TGA tyrimus atliko m.d. L. Pečiūltė (VU) ir dr. P. Danilovas (KTU)

Analizuojant DSK tyrimų rezultatus, nustatyta, jog visi tiksliniai junginiai yra molekuliniai stiklai, t. y. turi stabilią amorfinę būseną. Tiek pirmojo, tiek antrojo kaitinimo metu yra fiksuojamos stiklėjimo temperatūros 126 – 196 °C intervale, o aušinimo metu jokie virsmai nevyko. Prijungus ilgesnius alkilinius pakaitus į molekulę, molekulinio stiklo susidarymo temperatūrą (**1**  $T_{st.} = 196$  °C, **2**  $T_{st.} = 183$  °C, **3**  $T_{st.} = 126$  °C) žemėja. Tikslinių junginių **1-3** DSK tyrimų rezultatai yra pateikti 1 lentelėje.

Gerai krūvininkų pernašai Saulės elemente skyles transportuojančio puslaidininkio HOMO lygmuo privalo būti 4,8–5,5 eV ribose [4]. Lyginant susintetintų junginių **1-3** jonizacijos potencialus ( $I_p$ )\* matoma, kad ilgesni alkilinių grandinių fragmentai,  $I_p$  vertę didina (**1** – 4,72 eV, **2** – 4,74 eV, **3** – 4,96 eV).

Dar viena labai svarbi skyles transportuojančių medžiagų savybė yra elektronų judrumas<sup>2</sup>. Gautų medžiagų **1-3** dreifiniai judriai matuoti Kserografiniu laiko lėkio metodu. Kadangi grynų medžiagų sluoksnių išlieti nepavyko, į bandinius buvo pridėta priedų. Iš gautų matavimų verčių apskaičiuotas krūvininkų judris grynose medžiagose pagal formulę:

$$R = \sqrt[3]{\frac{M}{N_A \delta} \cdot \frac{m_{TM} + m_{BM}}{m_{TM}}}$$

čia  $M$  – tikslinių junginių molinė masė,  $m_{TM}$  ir  $m_{BM}$  – tikslinės medžiagos ir priedo masės,  $\delta = 1,2$  g/cm<sup>3</sup> – plėvelės tankis,  $N_A$  – Avogadro skaičius.

Elektronų judrumų ir jonizacijos potencialų matavimų rezultatai pateikti 2 lentelėje.

**2 lentelė.** Junginių **1-3** jonizacijos potencialų ir dreifinių judrių matavimų rezultatai.

Junginys	$I_p$ , eV	$\mu(E = 0)$ , cm <sup>2</sup> /V·s	$\mu(E = 6,4 \cdot 10^5$ V/cm), cm <sup>2</sup> /V·s
<b>1</b>	4,72	$3,7 \cdot 10^5$	$1,6 \cdot 10^3$
<b>2</b>	4,74	$1,2 \cdot 10^5$	$1,2 \cdot 10^3$
<b>3</b>	4,96	$3 \cdot 10^5$	$5,0 \cdot 10^4$ ( $E = 1 \times 10^6$ V/cm)

Gauti junginiai pasižymi tinkamomis dreifinio judrio vertėmis. Geriausia krūvininkų pernaša pasižymi junginys **1**. Iš rezultatų matoma, jog prie fluoreno fragmento prijungus ilgesnes alkilines grandinėles, krūvininkų dreifinio judrio vertės žemėja.

Atlikus tyrimų analizę stebima trumpų metilgrandinėlių teigiama įtaka terminėms,  $I_p$  bei dreifinio krūvininkų judrio vertėms. Matomai, didesni pakaitai molekulyje apsunkina molekulės plokščios erdvinės struktūros susidarymą bei molekulių susipakavimą. Iš gautų terminių ir fotoelektrinių tyrimų rezultatų galima teigti, jog tiksliniai junginiai **1-3** gali būti panaudoti, kaip teigiamus krūvininkus pernešančios medžiagos perovskitiniuose SE.

## Literatūra

- [1] SALIBA, M. ir kt. *Nature Energy*, 2016, 1, 15017 p.
- [2] MALI, SAWANTA ir kt. *Nanoscale*, 2016, 8, 10528–10540 p.
- [3] SHIROTA, Y. *Journal of Materials Chemistry*. 2000, 10, 1–25p.
- [4] PAOLA, V. ir kt. *Materials*. 2017, 10, 1087, 45 p.

<sup>2</sup> Jonizacijos potencialo ir krūvininkų dreifinio judrio tyrimus atliko dokt. E. Kamarauskas ir doc. V. Jankauskas (VU).

**G. Inkraitė,  
R. Skaudžius**

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

## **LUTECIO OKSIORTOSILIKATO SINTEZĖ BEI STUKTŪROS MODIFIKAVIMAS LEGIRUOJANT MAGNIU IR BORU**

Scintiliatoriai, kaip medžiagos, mokslininkų bei kitų tyrėjų jau yra naudojami ne vieną dešimtmetį. Jie įeina į kompiuterinės tomografijos (CT) ir pozitronų emisijos tomografijos (PET) prietaisų detektorių sudėtį bei yra įrenginių, kurie matuoja ir nustato radioaktyvųjų užterštumą, pagrindas. Šiuo metu, mokslininkai didelį dėmesį skiria sintetindami naujus scintiliatorius, kurie yra naudojami padedant išsaugoti sveikatą: nustatyti ląstelių pokyčius, vėžį, ar perspėti apie grėsmę sveikatai – radioaktyviąją taršą. Šiems junginiams, be aukšto emisijos intensyvumo, labai svarbu turėti kaip įmanoma trumpesnes gesimo trukmes. Scintiliatoriai, turintys greitas gesimo trukmes, vienu metu gali fiksuoti daugiau signalų, dėl ko CT ar PET prietaisuose bus gaunami ryškesni ir aukštesnio kontrasto vaizdai, o radioaktyvi tarša nustatyta kelis kartus greičiau [1].

Viena iš medžiagų, kuri gali būti naudojama kaip scintiliatorius, yra ceriu legiruotas lutecio oksiertosilikatas arba LSO:Ce. Palyginus su labai plačiai naudojamu scintiliatoriumi itrio aliuminio granatu, legiruotu ceriu, šis junginys, pasižymi aukštesne energijos skiriamąja geba ir didesniu medžiagos tankiu [2]. Dėl šių pranašumų ir gerų liuminescencinių savybių, ceriu legiruoti LSO scintiliatoriai yra plačiai naudojami PET ir radioaktyviojo užteršimo aptikimo įrangoje. Visas svarbias ir reikalingas charakteristikas galima modifikuoti įvedant į struktūrą kitus elementus. Kai į kristalinę gardelę yra įterpiami jonai, tokie kaip  $Mg^{2+}$ , didelė tikimybė, kad gesimo laikas sutrumpės, o emisijos intensyvumas bus aukštesnis nei tos medžiagos, kurioje nėra papildomų legirantų. Magnio įtaka gerinant liuminescencines savybes yra akivaizdi, kadangi apie šių savybių pokytį jau yra rašoma mokslinėje literatūroje [3]. Tačiau, siekiant gauti geresnes savybes turinčius scintiliatorius, galima išskirti struktūros modifikavimą kitu elementu – boru. Apie legiravimą šiuo jonu informacijos literatūroje, būtent minėtoje sistemoje, nėra. Tiesa, jau yra ištirtas šio elemento poveikis lutecio aliuminio granato matricoje, tačiau mažesniu mastu, palyginti su  $Mg^{2+}$ . Be abejo, atlikti tyrimai įrodo, kad jis padeda pagerinti liuminescencines savybes [4]. Šiame projekte sintetinamas lutecio oksiertosilikatas, legiruotas ceriu bei boru (LSO:Ce:B), kartu su papildomu magnio jonų kiekiu, siekiant palyginti gautų junginių savybes.

Projekto metu zolių-gelių metodu buvo sintetinami skirtingi, ceriu legiruoti, lutecio oksiertosilikato junginiai. Šie fosforai gali būti naudojami kaip scintiliatoriai, kurie pasižymi trumpesnėmis gesimo trukmėmis, lyginant su silikatais, kurių sudėtyje nėra

boro ir/ar magnio. Siekiant nustatyti gautos fazės grynumą bei junginio struktūrą buvo atliekama rentgeno spindulių difrakcinė analizė (XRD), o dalelių morfologijai iširti - tyrimas skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM). Taip pat visiems silikatams buvo išmatuotos liuminescencinės savybės: kvantinė išeiga, gesimo trukmė bei emisijos ir sužadinimo spektrai.

---

### Literatūra

- [1] Wu Y., Koschan M., Li Q., et. al. *Journal of Crystal Growth*, 2018, 498, 362-371.
- [2] Avdeichikov V.V., Bergholt L., Guttormsen M., et. al. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 1994, 349, 216-224.
- [3] Wu Y., Koschan M., Foster C., et. al. *Crystal Growth Design*, 2019, 19, 7, 4081-4089.
- [4] Foster C., Wu Y., Koschan M., et. al. *Journal of Crystal Growth*, 2018, 486, 126 – 129.

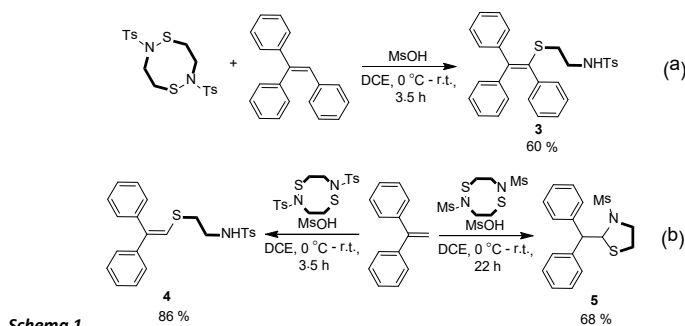
A. Jurys,  
E. Orentas

Vilniaus universitetas,  
Chemijos ir geomokslų fakultetas

## CIKLINIŲ SULFENAMIDŲ TAIKYMAS S, N-HETEROCIKLŲ SINTEZĖJE, FOTOREDOKSO IR BROENSTED RŪGŠČIŲ KATALIZĖS SĄLYGOMIS

Biologiškai aktyvūs junginiai, ypač pasižymintys priešdiabetiniu, priešvėžiniu, antipsichotiniu ar spaudimą mažinančiu poveikiu, dažnai savo struktūroje turi sieros ir azoto heterociklines sistemas. Tiomorfolino ir tiazepino fragmentai yra dominuojantys, tačiau vis dažniau aprašomi farmakoforai, turintys dvigubuosius ryšius anglies grandinėje tarp sieros ir azoto atomų [1]. Didžioji dalis heterociklinių junginių, turinčių du heteroatomus, yra gaunami remiantis ciklizacijos reakcijomis, kuriose S ir N heteroatomai pasižymi jiems natūraliai būdingomis nukleofilinėmis savybėmis. Šis reaktingumas smarkiai apriboja pradinių junginių, taikomų sintezėje pasirinkimo spektrą. Mūsų anksčiau pradėti tyrimai sulfenamidų chemijos srityje parodė, kad šio tipo junginiams būdingas didelis sieros atomo elektrofiliskumas, t. y. veikiant juos nukleofilais susidaro nukleofilas-siera ryšys, priešingai klasikinei sintezei, susidarant elektrofilas-siera ryšiumi. Toks neįprastas reaktingumas atveria kelius heterociklinių sistemų sintezei panaudojant lengvai prieinamus nukleofilinius reagentus, įskaitant ir plačiai paplitusius nefunkcionalizuotus alkenus.

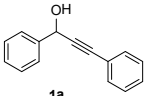
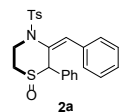
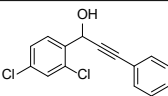
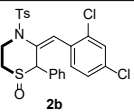
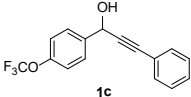
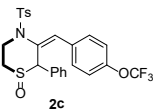
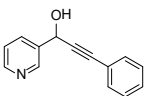
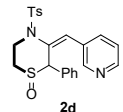
Šios praktikos metu buvo tęsiama sintezė panaudojant ir alkenus reakcijoje su cikliniais sulfenamidais. Reakcija tarp 2,6-ditozil-1,5,2,6-ditiadiazokano ir trifenileteno ar 1,1-difeniletieno nedavė norimų gauti tiomorfolinų darinii, o buvo gauti acikliniai benzenesulfenamidai **3** ir **4** (Schema 1, a ir b). Panaudojant ciklinį sulfenamidą, turintį mažiau erdviškai ekranuojančią apsauginę grupę, 2,6-bis(metilsulfofil)-1,5,2,6-ditiadiazokaną, buvo gautas thiazolidinas **5** (Schema 1, b).



Schema 1

Pasitelkiant Mislow-Braverman-Evans persigrupavimą [2] buvo gauti tiomorfolino-1-oksido dariniai **2** (Lentelė 1). Reakcijoje naudojami propargilio alkoholio dariniai **1** gaunami iš pigių ir komerciškai prieinamų aldehidų bei fenilacetilenu, o 2,6-ditotil-1,5,2,6-ditiadiazokano sintezė nereikalauja chromatografinio gryninimo [3]. Gauti produktai **2** turintys elektronų ištraukiančias grupes, donuojančias ar net heterociklinį fragmentą (Lentelė 1). Be to junginių **2** aukštas diastereoselektyvumas, tiesa, absoliuti konfigūracija dar nenustatyta dėl to reikalingi papildomi tyrimai.

**Lentelė 1.** Junginių **2** sintezės rezultatai iš junginių **1**.

Substratas	Produktas	Išeiga (%)	dr santykis
 <p><b>1a</b></p>	 <p><b>2a</b></p>	66	24:1
 <p><b>1b</b></p>	 <p><b>2b</b></p>	50	23:1
 <p><b>1c</b></p>	 <p><b>2c</b></p>	59	19:1
 <p><b>1d</b></p>	 <p><b>2d</b></p>	65	>30:1

### Literatūra

- [1] Fringuelli R., Milanese L., Schiaffella F., *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, 2005, **5**, 1061;
- [2] (a) Rayner D. R.; Miller E. G., Bickart P., Gordon A. J., Mislow K. *J. Am. Chem. Soc.*, 1966, **88**, 3138; (b) Bickart P., Carson F. W., Jacobus J., Miller E. G., Mislow K. *J. Am. Chem. Soc.*, 1968, **90**, 4869; (c) Braverman S., Stabinsky Y. J., *Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1967, 270; (d) Evans D. A., Andrews G. C., Sims C. L., *J. Am. Chem. Soc.*, 1971, **93**, 4956;
- [3] Javorskis T., Bagdžiūnas G., Orentas E., *Chemical Communications*, 2016, **52**, 4325-4328.



**G. Kavaliauskaitė,  
A. Valiūnienė**

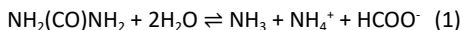
*Vilniaus universitetas,  
Chemijos institutas*

## IMPEDIMETRINIO URĖJOS JUTIKLIO FORMAVIMAS BERLYNO MĖLYNOJO PAGRINDU

Urėja (karbamidas, šlapalas) tai organinis junginys, kuris yra galutinis baltymų skaidymo produktas. Urėja aptinkama žmogaus organizmo skysčiuose. Padidėjęs urėjos kiekis kraujyje gali būti inkstų nepakankamumo ar kepenų pažeidimo požymis [1]. Dėl šios medicininės priežasties, analizinės sistemos, skirtos urėjos aptikimui, yra svarbios ir reikalingos.

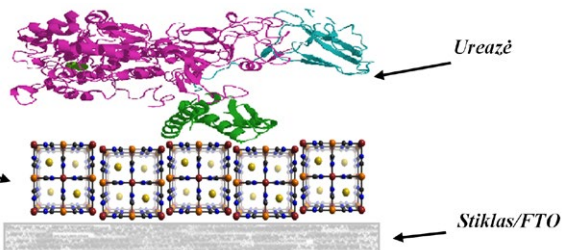
Šiame darbe pristatomos analizinės urėjos aptikimo sistemos, kai analizinis signalas registruojamas naudojant greitosios Fourier transformacijos elektrocheminio impedanso spektroskopijos metodą. Darbo metu suformuoti dvejų tipų, impedimetrinis ir impedimetrinis biologinis urėjos jutikliai. Impedimetrinis jutiklis suformuotas elektrochemiškai nusodinant Berlyno mėlynojo (BM) sluoksnį ant stiklo plokštelės, padengtos laidžiuoju fluoru dopuoto alavo oksido (*angl.* FTO) sluoksniu (stiklas/FTO). Biologinis impedimetrinis jutiklis taip pat suformuotas ant stiklas/FTO pagrindo. Biologinio jutiklio formavimas susideda iš šių pagrindinių etapų: 1) elektrochemiškai, naudojant ciklinės voltamperometrijos metodą, nusodinimas Berlyno mėlynojo sluoksnis; 2) ant stiklas/FTO/BM plokštelės užliejamas ištirpinto fermento, ureazės, sluoksnis; 3) suformuotas stiklas/FTO/BM/ureazė elektrodas laikomas virš gliutaro aldehido garų, fermentas imobilizuojamas elektrodo paviršiuje. Principinė jutiklio schema pateikiama 1 paveiksle.

Suformuoto impedimetrinio jutiklio veikimas pagrįstas elektrooksidaciniu urėjos skaidymu į  $\text{NH}_4^+$  jonus bei Berlyno mėlynojo selektyvumu  $\text{NH}_4^+$  jonams [2], o biologinio impedimetrinio urėjos jutiklio veikimas paremtas ureazės ir urėjos fermentine reakcija (1) bei Berlyno mėlynojo selektyvumu  $\text{NH}_4^+$  jonams [2], kurie yra minėtos fermentinės reakcijos (1) šalutinis produktas.

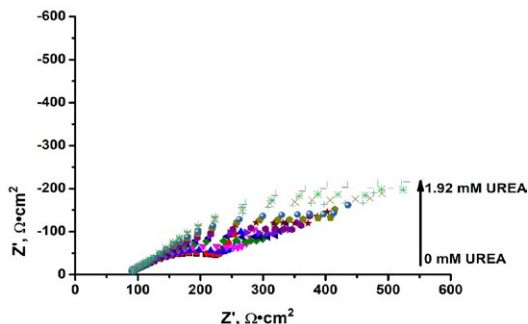


**1 pav.**  
Sukonstruoto  
biologinio impe-  
dimetrinio urėjos  
jutiklio principinė  
schema.

Berlyno mėlynasis

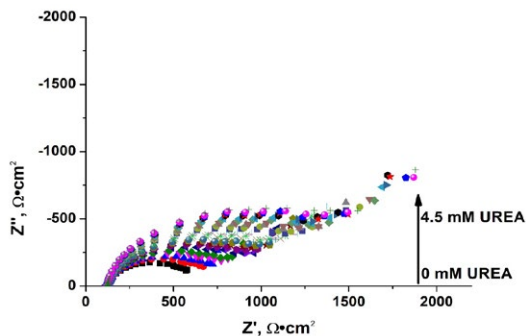


Visi elektrocheminiai matavimai atlikti trijų elektrodų sistemoje; darbinis elektrodas – stiklas/FTO/BM/ureazė, pagalbinis elektrodas – Pt viela, palyginamasis elektrodas – Ag| AgCl| KCl<sub>SOTUS</sub>, celė užpildyta fosfatiniu buferiu (PBS, pH 7.1). Nustatytos impedimetrinio urėjos jutiklio analizės aptikimo ribos 0 – 1,92 mM, o biologinio impedimetrinio jutiklio analizės aptikimo ribos 0 – 4,5 mM. Tiriamųjų stiklas/FTO/BM ir stiklas/FTO/BM/ureazė elektrodų elektrocheminio impedanso spektrų priklausomybės nuo urėjos kiekio PBS tirpale pateikiamos Nyquist koordinatių sistemoje, atitinkamai, 2 ir 3 paveiksluose.



**2 pav.**

Impedimetrinio urėjos jutiklio elektrocheminio impedanso spektrai, kai sistemoje didinamas urėjos kiekis. Elektrocheminio impedanso spektrai registruoti fosfatiniame buferyje pH 7,1, esant potencialui  $E = 0,8V$ , dažnių intervale 610 mHz – 20 kHz.

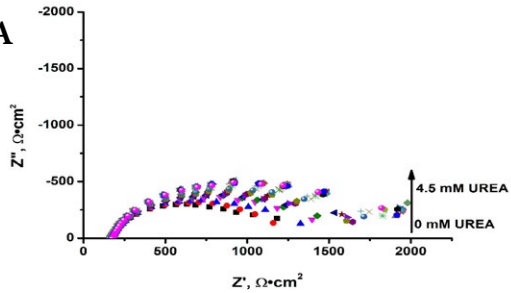
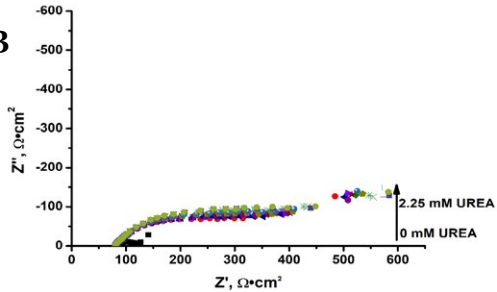


**3 pav.**

Biologinio impedimetrinio urėjos jutiklio elektrocheminio impedanso spektrai, kai sistemoje didinamas urėjos kiekis. Elektrocheminio impedanso spektrai registruoti fosfatiniame buferyje pH 7,1, esant potencialui  $E = 0,2V$ , dažnių intervale 763 mHz – 50 kHz.

Suformuoto biologinio impedimetrinio urėjos jutiklio regeneracija ir tolimesnis veikimas buvo tiriami 3 (4 pav. A) ir 7 (4 pav. B) dienos po jutiklio pagaminimo. Tyrimų metu nustatyta, kad jutiklis gali būti regeneruojamas ir veikia, kai yra praėjusios 3 dienos po jo pagaminimo.

Mokslinių tyrimu metu nustatyta, kad impedimetriniai Berlyno mėlynojo pagrindo urėjos jutikliai gali būti sukonstruojami ir panaudojami kaip urėjos aptikimo sistemos. Tokių sistemų elektrocheminis impedansas didėja, kai, analizės metu, yra didinama urėjos koncentracija. Impedimetrinis urėjos jutiklis pasižymi analizės aptikimo intervalu nuo 0 iki 1,92 mM, o biologinis impedimetrinis urėjos jutiklis pasižymi analizės aptikimo intervalu nuo 0 iki 4,5 mM.

**A****B****4 pav.**

**A)** Biologinio impedimetrinio urėjos jutiklio elektrocheminio impedanso spektrai, kai sistemoje didinamas urėjos kiekis. Elektrocheminio impedanso spektrai registruoti fosfatiniame buferyje pH 7,1, esant potencialui  $E = 0,2V$ , dažnių intervale 763 mHz – 50 kHz. Elektrocheminio impedanso spektrai registruoti po 3 parų nuo biologinio impedimetrinio jutiklio pagaminimo. **B)** Biologinio impedimetrinio urėjos jutiklio elektrocheminio impedanso spektrai, kai sistemoje didinamas urėjos kiekis. Elektrocheminio impedanso spektrai registruoti fosfatiniame buferyje pH 7,1, esant potencialui  $E = 0,2V$ , dažnių intervale 763 mHz – 50 kHz. Elektrocheminio impedanso spektrai registruoti po 7 parų nuo biologinio impedimetrinio jutiklio pagaminimo.

### Literatūra

- [1] Pundir C.S., Jakhar S., Vinay N., Biosensors and Bioelectronics, 2019, 123, p. 36 – 50
- [2] Karyakin A. A., Karyakina E. E., Gorton L., Electrochemistry Communications, 1999, 1, p. 78 – 82

A. Kizalaitė,  
A. Žarkov

Vilniaus Universitetas,  
Chemijos ir Geomokslų fakultetas,  
Chemijos institutas

## MAGNETINĖMIS IR ANTIBAKTERINĖMIS SAVYBĖMIS PASIŽYMINČIO BETA-TRIKALCIO FOSFATO SINTEZĖ IR TYRIMAS

Kalcio fosfatai yra pagrindinės kaulų ir dantų sudedamosios dalys, todėl jie vaidina esminį vaidmenį žmonių kasdieniame gyvenime. Dėl šios priežasties šios medžiagos yra plačiai taikomos įvairiose medicinos srityse, kaip ortopedija bei odontologija. Medicinoje kalcio fosfatai naudojami įvairiausiose formose, nuo plonų dangų ant metalinių implantų, padedančių implantavimui į kaulą, iki biokeramikų, kurios naudojamos kaip sintetiniai kaulo pakaitalai [1-3].

Beta-trikalčio fosfatas ( $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ;  $\beta\text{-TCP}$ ) pasižymi artima natūraliam kauliniam audiniui struktūra ir chemine sudėtimi. Taip pat šis kalcio fosfatas organizmo sąlygomis lengvai suskaidomas ir gali būti panaudotas naujo kaulinio audinio augimui paskatinti bei struktūrai atkurti [4]. Šiam junginiui būdingas didelis biosuderinamumas ir bioaktyvumas [5]. Tačiau panašumas į natūralų kaulą apsunkina gydymo proceso stebėjimą. Be to,  $\beta\text{-TCP}$  nepasižymi itin geromis mechaninėmis savybėmis ir gera tirpimo kinetika biologinėje terpėje.

Yra gerai žinoma, kad legiravimas kitais jonais netgi labai žemuose lygmenyse gali drastiškai paveikti įvairių medžiagų fizikines ir morfologines savybes [6]. Tuo pačiu metu buvo parodyta, kad medžiagų paviršiaus savybės, tokios kaip mikroporėtumas, dalelių dydis ir su tuo susijęs paviršiaus plotas vaidina lemiantį vaidmenį biomedžiagų osteoindukcijos procese [1].  $\beta\text{-TCP}$  taip pat gali būti funkcionalizuojamas legiruojant jį įvairiais elementais, kurie keičia šio junginio struktūrą ir savybes. Kalcio fosfatų dalinis pakeitimas keletu elementų vis dar yra nauja tyrimų sritis, atverianti kelius platesniam šių junginių pritaikymui. Fe ir Zn yra svarbūs žmogaus organizmui mikroelementai. Fe įeina į baltymų, atsakingų už dujų pernašą ir saugojimą, struktūrą. Šis elementas yra daugelio baltymų kofaktorius, siejamas su daugiau nei 200 fermentinių sistemų. Fe įterpimas į kalcio fosfatų struktūrą gali suteikti jiems magnetinių savybių. Moksliniai tyrimai parodė, kad magnetinėmis savybėmis pasižymintys sintetiniai kalcio fosfatai gali būti taikomi vėžinių susirgimų gydymui pasitelkiant hipertermiją [7, 8], biologiniam vaizdavimui [9], tiksliniam vaistų pristatymui [10]. Tuo tarpu daugiausia Zn žmogaus organizme randama kauliniame audinyje, kur jis dalyvauja įvairiuose osteogeniniuose procesuose [11].  $\text{Zn}^{2+}$  jonais legiruoti sintetiniai kalcio fosfatai pasižymi greitesniais medžiagų apykaitos procesais ir antibakterinėmis savybėmis [12-14].

$\beta\text{-TCP}$  dalinai pakeisto  $\text{Fe}^{3+}$  ir  $\text{Zn}^{2+}$  jonais sintezė buvo atlikta nusodinimo metodu. Buvo susintetinta serija junginių, kuriuose Fe ir Zn kiekis buvo nuo 0 iki 5 mol%.

Sintezės produktų terminis skilimas buvo tiriamas pasitelkiant termogravimetriją (TG). Miltelių struktūra ir fazinis grynumas buvo įvertinti naudojant rentgeno spindulių difrakcinę analizę (XRD), Furjė transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR) ir Ramano spektroskopiją. Elektronų paramagnetinio rezonanso spektroskopija (EPR) buvo naudojama papildomam junginių apibūdinimui bei gauti informacijai apie  $\text{Fe}^{3+}$  jonų užimamas  $\text{Ca}^{2+}$  kristalografines padėtis. Susintetintų mėginių magnetinės savybės buvo tiriamos skirtingo stiprio magnetiniuose laukuose. Pasitelkus skenuojančią elektroninę mikroskopiją (SEM) buvo įvertintos gautų miltelių bei iš jų suformuotos keramikos morfologinės savybės. Mėginių cheminei sudėčiai nustatyti buvo naudojama induktyviai susietos plazmos optinės emisijos spektrometrija (ICP-OES). Taip pat buvo atliktas kristalinės gardelės parametru tikslinamas Rietveld metodu. Biologinis susintetintų junginių suderinamumas buvo tikrinamas naudojant zebriųjų danijų (*Danio Rerio*) embrionus. Taip pat buvo išmatuotas gautos keramikos geometrinis susitraukimas, tankis bei Vickers kietumas.

---

### Literatūra

- [1] Habraken, W., Habibovic, P. ir kt., *Materials Today*, 2016, 19(2): p. 69–87.
- [2] Chudinova, E. A., Surmeneva M. A. ir kt., *Colloids Surf. B*, 2019, 176(1): p. 130–139.
- [3] Dorozhkin, S.V., *Materials*, 2013, 6(1): p. 3840–3942.
- [4] Gao, P., Zhang, H. ir kt., *Scientific Reports*, 2016, 6(1): p. 23367.
- [5] Xie, L., Yuanyi, Y. ir kt., *RSC Advances*, 2019, 9(2): p. 781–789.
- [6] Tkachenko, S., Horynova, M. ir kt., *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2018. 81: p. 16–25.
- [7] Singh, R.K., Srivastava, M. ir kt., *Materials Science and Engineering: C*, 2017, 78: p. 715–726.
- [8] Srinivasan, B., Kolanthai, E. ir kt., *The Journal of Physical Chemistry B*, 2019, 123(26): p. 5506–5513.
- [9] Kalidos, M., Basha, R. Y. ir kt., *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 2019, 7(126): p. 126.
- [10] Izadi, A., Meshkini, A. ir kt., *Materials Science and Engineering: C*, 2019, 101(1): p. 27–41.
- [11] Hesarakı, S., Farhangdoust, S. ir kt., *Materials Science-Poland*, 2013, 31(2): p. 281–287.
- [12] Fadeeva, I. V., Gafurov, M. R. ir kt., *BioNanoScience*, 2017, 7(2): p. 434–438.
- [13] Predoi, D., Iconaru, S. L. ir kt., *Nanomaterials*, 2019, 9(4): p. 22.
- [14] Bhattacharjee, A., Gupta, A. ir kt., *Ceramics International*, 2019. 45(9): p. 12225–12233.

M. Koplūnaitė,  
D. Tauraitė

Vilniaus Universiteto  
Biochemijos Institutas

## MODIFIKUOTŲ PIRIMIDINO NUKLEOTIDŲ SINTEZĖ IR JŲ JUNGIMAS Į DNR

Nukleotidai yra organinės molekulės, turinčios labai platų pritaikymą. Natūralūs nukleotidai yra DNR ir RNR monomerai, jie taip pat svarbūs ląstelės metabolizmui. Nukleozidų trifosfatai ATP, GTP, CTP ir UTP ląstelėje atlieka energijos pernašos funkciją, kuri reikalinga aminorūgščių, baltymų, ląstelės membranos sintezei ir t.t. Nukleotidai taip pat dalyvauja ląsteliniame signalo pernešime bei atlieka kofaktorių vaidmenį. Tad nieko nestebina, jog natūralūs bei modifikuoti nukleotidai yra plačiai tyrinėjami. Modifikuoti nukleotidai pasitelkiami įvairiems ląstelinės ir molekulinės biologijos eksperimentams. Šie junginiai naudojami kaip substratai polimerazėms, tiriami kaip fermentų slopikliai, taip pat žymimi fluorescencinėmis bei radioaktyviomis žymėmis.

Norint išsaugoti Watson-Crick porų susidarymą, nukleobazės dažniausiai modifikuojamos pirimidinų C5 ir 7-deazapurinų C7 pozicijose. Nukleotidų modifikacijos kitose pozicijose yra prasčiau ištirtos. Kol kas žinoma labai nedaug informacijos apie modifikacijas purinų N<sup>6</sup> ir O<sup>6</sup> bei pirimidinų O<sup>4</sup> ir N<sup>4</sup> pozicijas, tad šio darbo tikslas buvo susintetinti literatūroje neaprašytus N<sup>4</sup> pozicijoje aminorūgštimis modifikuotus 2'-deoksicitidino 5'-trifosfatus ir juos panaudoti biocheminiuose tyrimuose, tiriant minėtus junginius kaip substratus polimerazėms.

Tikslui pasiekti sudaryti šie uždaviniai:

- Blokuotomis aminorūgštimis modifikuotų 2'-deoksicitidino nukleozidų sintezė.
- Deblokuotomis aminorūgštimis modifikuotų 2'-deoksicitidino nukleozidų sintezė.
- Susintetintų nukleozidų fosforilimas iki nukleozidų 5'-trifosfatų.
- Susintetintų junginių biocheminiai tyrimai naudojant polimerazes.

Praktikos metu susintetinta 12 naujų, mokslinėje literatūroje neaprašytų junginių. Pirmiausia vykdytos trijų stadijų sintezės metu gauti 3 Boc apsaugine grupe blokuotomis aminorūgštimis modifikuoti 2'-deoksicitidino nukleozidai: N<sup>4</sup>-glicinoil-Boc-2'-deoksicitidinas, N<sup>4</sup>-tirozinoil-Boc-2'-deoksicitidinas ir N<sup>4</sup>-metioninoil-Boc-2'-deoksicitidinas.

Susintetinus Boc apsaugine grupe blokuotomis aminorūgštimis modifikuotus nukleozidus, šie buvo deblokuojami. Atlikus deblokavimo reakcijas buvo gauti dar 3 deblokuotomis aminorūgštimis modifikuoti 2'-deoksicitidino nukleozidai: N-(4-(2'-deoksicitidinil))glicinamidas bei N-(4-(2'-deoksicitidinil))tirozinamidas, N-(4-(2'-deoksicitidinil))metioninamidas.

Susintetinti modifikuoti nukleozidai panaudoti nukleotidų sintezei. Pagal Yoshikawa protokolą susintetinti 6 nauji nukleozidų trifosfatai - 3 Boc apsaugine grupe blokuotomis aminorūgštimis modifikuoti 2'-deoksicitidino 5'-trifosfatai: *N*<sup>4</sup>-glicinil-Boc-2'-deoksicitidino 5'-trifosfatas, *N*<sup>4</sup>-tirozinoil-Boc-2'-deoksicitidino 5'-trifosfatas, *N*<sup>4</sup>-metioninoil-Boc-2'-deoksicitidino 5'-trifosfatas bei 3 deblokuotomis aminorūgštimis modifikuoti 2'-deoksicitidino 5'-trifosfatai: *N*-(4-(2'-deoksicitidinil))glicinamido 5'-trifosfatas, *N*-(4-(2'-deoksicitidinil))tirozinamido 5'-trifosfatas, *N*-(4-(2'-deoksicitidinil))metioninamido 5'-trifosfatas.

Susintetinti modifikuoti nukleozidų 5'-trifosfatai panaudoti biocheminiams tyrimams su polimerazėmis. Atlikus pradmens prailginimo reakcijas su DNR polimerazėmis TdT ir φ29 nustatyta, jog fermentai substratais geba panaudoti visus susintetintus nukleotidus. TdT į oligonukleotidą geriau jungia Boc apsauginę grupę turinčius nukleotidus, nei deblokuotus junginius. DNR polimerazė φ29 visus modifikuotus 2'-deoksicitidinus į DNR grandinę įjungia. Susintetintus nukleotidus panaudojus PGR reakcijoms nebuvo gauta produktų - junginiai nėra tinkami substratai šioms reakcijoms.

---

### Literatūra

- [1] Musheshe, N., Schmidt, M. & Zaccolo, M. cAMP: From Long-Range Second Messenger to Nano[domain Signalling. *Trends in Pharmacological Sciences* **39**, 209-222 (2018).
- [2] Joosten, V. & Berkel, W. J. v. Flavoenzymes. *Current Opinion in Chemical Biology* **11**, 195-202 (2007).
- [3] Menendez-Arias, L., Alvarez, M. & Pacheco, B. Nucleoside/Nucleotide Analog Inhibitors of Hepatitis B Virus Polymerase: Mechanism of Action and Resistance. *Current Opinion in Virology* **8**, 1-9 (2014).
- [4] Hirao, I. et al. An Unnatural Hydrophobic Base Pair System: Site-Specific Incorporation of Nucleotide Analogs into DNA and RNA. *Nature Methods* **3**, 729-735 (2006).
- [5] Anderson, J. P., Angerer, B. & Loeb, L. A. Incorporation of Reporter-Labeled Nucleotides by DNA Polymerases. *BioTechniques* **38**, 257-264 (2005).
- [6] Chen, K. et al. Advances in the Development of Aptamer Drug Conjugates for Targeted Drug Delivery. *WIREs Nanomedicine and Nanobiotechnology* **9**, Epub 1438 (2016).
- [7] Cavaliere, A., Probst, K. C., Westwell, A. D. & Slusarczyk, M. Fluorinated Nucleosides as an Important Class of Anticancer and Antiviral Agents. *Future Medicinal Chemistry* **9**, 1809-1833 (2017).
- [8] Gollnest, T. et al. Membrane-Permeable Triphosphate Prodrugs of Nucleoside Analogues. *Angewandte Chemie* **55**, 5255-5258 (2016).
- [9] Hottin, A. & Marx, A. Structural Insights into the Processing of Nucleobase-Modified Nucleotides by DNA Polymerases. *Accounts of Chemical Research* **49**, 418-427 (2016).
- [10] Jakubovska, J., Tauraitė, D., Birštonas, L. & Meškys, R. *N*<sup>4</sup>-Acyl-2'-Deoxycytidine-5'-Triphosphates for the Enzymatic Synthesis of Modified DNA. *Nucleic Acids Research* **46**, 5911-5923 (2018).
- [11] Kobori, A., Miyata, K., Ushioda, M., Seio, K. & Sekine, M. A New Method for the Synthesis of Oligodeoxyribonucleotides Containing 4-*N*-Alkoxy-carbonyldeoxycytidine Derivatives and Their Hybridization Properties. *Journal of Organic Chemistry* **67**, 476-485 (2002).

**P. Luižys,  
M. Daškevičienė**

*Kauno technologijos  
universitetas*

## **NAUJO KETURIS KARBAZO- LILCHROMOFORUS SU DIFENILAMINO FRAGMENTAIS TURINČIO ORGANINIO PUSLAIDININKIO PEROVSKITINIAMS SAULĖS ELEMENTAMS SINTEZĖ IR SAVYBĖS**

Kiekvienais metais dėl ekonomikos ir gyventojų skaičiaus augimo pasaulinis energijos poreikis sparčiai auga, todėl intensyviai ieškoma šaltinių, kurie galėtų patenkinti šį energijos poreikį. Didžiausią nepanaudotą potencialą turi saulės energija, kurios metinis energijos kiekis tūkstančius kartų didesnis už kitų rūšių energijos kiekį. Todėl nenuostabu, kad moksliniams tyrimams šioje srityje kuriant naujos kartos saulės elementus, kurie teoriškai galėtų patenkinti žmonijos energijos poreikius, skiriamas didžiulis dėmesys. Šiuo metu pasaulyje 90% rinkos užima silicio pagrindu kurtos saulės celės siekiančios 25,6% konversijos efektyvumą [1]. Tačiau šie saulės elementai turi keletą trūkumų. Pavyzdžiui, sudėtinga gamybos technologija dėl didelio naudojamo silicio grynumo. Dėl minėtų priežasčių silicio elementų gamybos kaštai labai išauga, todėl ieškoma jiems alternatyvų.

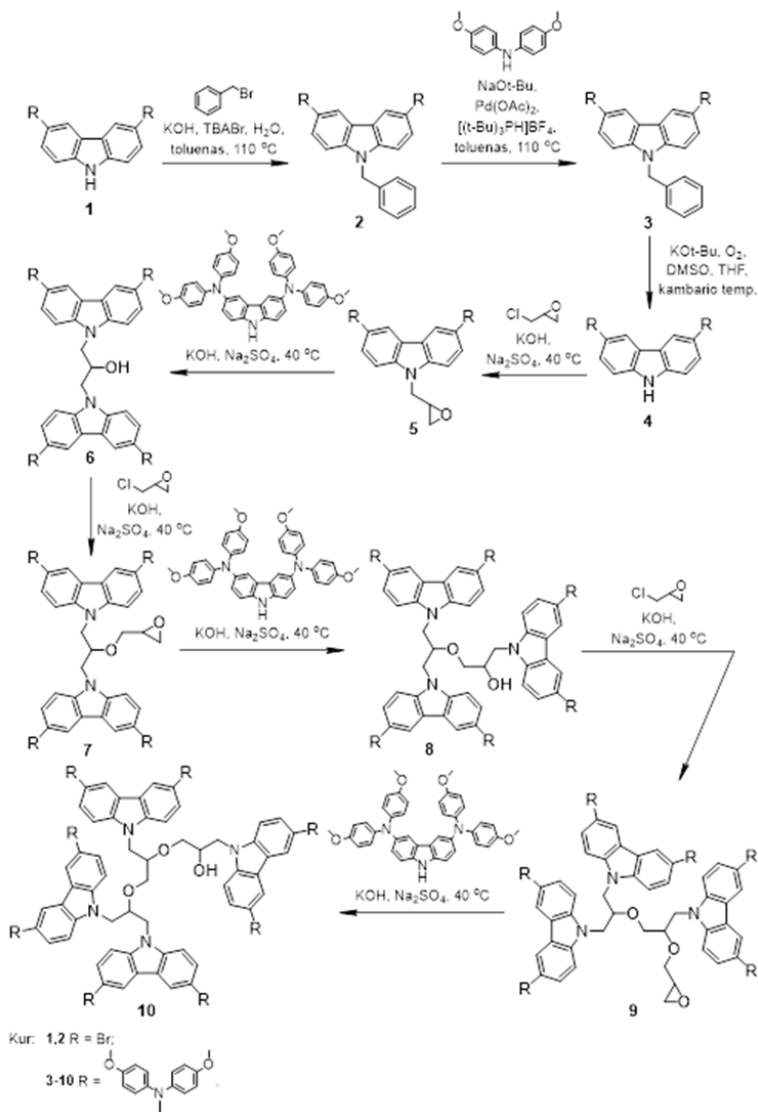
Viena iš alternatyvų gali būti perovskitiniai saulės elementai, kurie per paskutinį dešimtmetį demonstruoja labai gerus rezultatus. Šių saulės celių efektyvumas per jų tyrimo metus padidėjo nuo 3,9% (2009m.) [2] iki 25,2% (2019m.) [3]. Šie saulės elementai teikia daug vilčių, kad jie taps efektyviais, pigiais ir lengvai konstruojamais saulės energijos konversijos į elektros energiją prietaisais. Tačiau jie turi kelis svarbius trūkumus, tokius kaip įrenginio stabilumas ir ilgaamžiškumas, todėl išlieka aktualu tęsti tyrimus šioje srityje.

Vienas iš būdų spręsti perovskitinėse saulės celėse išskylančias problemas yra skylių transportinio sluoksnio modifikavimas, keičiant tam naudojamo junginio struktūrą. Šiuo metu saulės elementų tyrimuose kaip teigiamus krūvininkus pernešantis organinis puslaidininkis dažniausiai naudojamas Spiro-OMeTAD. Celių efektyvumas su šiuo junginiu siekia daugiau kaip 20%. Tačiau prietaisai sukonstruoti su šia medžiaga turi trūkumų. Pirma, Spiro-OMeTAD yra linkęs susikristalinti saulės celėse, taip sumažindamas prietaiso efektyvumą [4], antras trūkumas – jo laidumui pagerinti pridedamos joninės medžiagos, kurios tampa greitos prietaiso degradacijos priežastimi. Kaip p-tipo organiniai puslaidininkiai saulės elementuose dažnai yra naudojami karbazolo dariniai, kurie pasižymi junginio stabilumu ir geru laidumu. Todėl nauji karbazolo darinių puslaidininkiai galėtų išspręsti saulės celių stabilumo ir laidumo problemas.

Darbo tikslas – susintetinti keturis karbazolilchromoforus su difenilamino fragmentais turintį organinį puslaidininkį efektyviems perovskitiniams saulės elementams.



Pradžioje 3,6-dibromkarbazolui (**1**) tolueno virimo temperatūroje reaguojant su benzilbromidu, reakcijoje dalyvaujant kalio hidroksidui, tetrabutilamonio bromidui bei vandeniui buvo išskirtas tarpinis junginys **2** su užblokuotu N-H ryšiu (1 pav.). Buchwald-Hartwig reakcijos metu pastarajam reaguojant su bis(4-metoksifenil)aminu buvo gautas junginys **3**. Šį ištirpinus DMSO ir veikiant 1M kalio tertbutoksido tirpalu THF, dalyvaujant deguoniui, susintetintas **4**.



**1 pav.**  
Tikslinio produkto su keturiais karbazolio chromoforais sintezės schema.

Dalį gauto junginio **4** veikiant epichlorhidrinu 40°C, esant kalio hidroksidui ir bevandeniui natrio sulfatui, buvo išskirtas **5**. Susintetinus karbazolus su bis(4-metoksifenil)amino pakaitais **4** ir **5**, toliau buvo atlikta dimerų ir jų glicidinių eterių sintezė. Medžiagai **5** tetrahidrofurane reaguojant su **4**, reakcijoje dalyvaujant kalio šarmui ir bevandeniui natrio sulfatui, buvo išskirtas junginys **6**. Analogiškomis jau minėtomis sąlygomis gautas dimeras **6** buvo pervestas į jo glicidinį eterį **7**. Kitame žingsnyje tarpiniui junginiui **7** reaguojant su **4** buvo padidintas karbazolilo fragmentų skaičius molekulėje, išskiriant trimerą **8**. Pastarajam reaguojant su epichlorhidrinu susintetintas tarpinis produktas **9**. Paskutinėje sintezės stadijoje medžiagai **9** sureagavus su **4** buvo išskirta keturis karbazolilo chromoforus turinti molekulė **10**. Susintetintų junginių **2–10** struktūros įrodytos naudojant šiuolaikinius instrumentinės analizės metodus.

Gauto tikslinio junginio tinkamumas perovskitiniams saulės elementams nustatomas charakterizuojant terminės, optinės ir elektrinės savybės. Diferencinės skenuojamosios kalorimetrijos (DSK) tyrimo metu tiriama junginio morfologinė struktūra. Nustatyta medžiagos **10** stiklėjimo temperatūra lygi 126 °C, tai yra, junginys turi stabilią amorfinę būseną ir yra molekulinis stiklas. Kita junginių savybė yra terminis stabilumas, kuris yra nustatomas termogravimetrinės analizės (TGA) metodu. Analizės metu nustatyta skilimo temperatūra lygi 385°C. UV/RŠ absorbcijos spektras suteikia informacijos apie konjugotąją dvigubųjų ryšių sistemą. Tyrimo metu nustatytas junginio **10** elektromagnetinės spinduliuotės absorbcijos maksimumas yra 303 nm, o išmatuotas molinis absorbcijos koeficientas, esant minėtam sugerties maksimumui yra  $1,519 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ . Elektrinės savybės įvertinamos nustatant junginio jonizacijos potencialą (Ip). Siekiant gero prietaiso veikimo medžiagos Ip vertė turi patekti į intervalą tarp 4,9 – 5,4 eV. Išmatuotas medžiagos **10** Ip = 5,01 eV. Kitas būdas įvertinti junginių tinkamumą krūvio pernašai yra tiriamųjų medžiagų dreifinio judrio išmatavimas. Tyrimo metu išmatuotos dreifinio judrio vertės, esant elektrinio lauko stipriui lygiam nuliui ( $\mu_0 = 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ) ir kai lauko stipris yra  $6,4 \cdot 10^5 \text{ V/cm}$  ( $\mu = 2,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ). Įvertinus terminių, optinių ir elektrinių savybių tyrimų rezultatus, galima teigti, kad naujas keturis karbazolilchromoforus turintis junginys gali būti panaudotas saulės elementų gamyboje.

## Išvados

1. Nustatyta, kad planuotas pakopinės sintezės kelias yra tinkamas išskirti teigiamus krūvininkus pernešantį tikslinį produktą **10**, o išskirto organinio puslaidininkio struktūra patvirtinta instrumentinės analizės metodais.
2. Iš DSK analizės duomenų nustatyta, kad medžiaga **10** yra molekulinis stiklas. TGA duomenys patvirtino, kad susintetintas junginys yra termiškai stabilūs iki 385 °C.
3. UV/RŠ sugerties spektro duomenys parodo, kad galutiniame junginyje **10** tarp karbazolilo chromoforų yra dvigubųjų ryšių konjugacija.
4. Nustatyta junginio **10** jonizacijos potencialo vertės yra 5,01 eV patenka į intervalą, siekiant sėkmingo junginio panaudojimo perovskitiniuose saulės elementuose. Iš išmatuoto dreifinio judrio galima spręsti, kad molekulinio stiklo **10** skylių pernašos vertė yra pakankama, kad šią medžiagą būtų galima panaudoti saulės celių gamyboje.

---

## Literatūra

- [1] Masuko K. ir kt. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 2014, 4(6), 1433–1435.
- [2] Šaliba M. ir kt. *Angewandte Chemie International Edition*, 2018, 57(10), 2554–2569.
- [3] Best Research-Cell Efficiencies, <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.20190802.pdf> [žiūrėta 2020-01-26], (2019).
- [4] Spehr T. ir kt. *Chemical Reviews*, 2007, 107, 1011-1065.

**M. Marčinskas,  
T. Malinauskas**

*Kauno technologijos  
universitetas, Cheminės  
technologijos fakultetas*

## **ORGANOMETALINIŲ PREKURSORIŲ, SKIRTŲ NEORGANINIO PUSLAIDININKIO VARIO TIOCIANATO SLUOKSNIŲ FORMAVIMUI, SINTEZĖ IR TYRIMAS**

Spartus populiacijos augimas yra neatsiejamas nuo didėjančių sunaudojamos energijos poreikių, o pagrindinis ir svarbiausias energijos šaltinis išlieka iškastinis kuras, kurio rezervai nepaliaujamai senka. Žinant tai, vis didesnis dėmesys yra skiriamas atsinaujinančių energijos šaltinių vystymui, tobulinimui bei praktiniam taikymui, tarp kurių, vienomis potencialiausių yra laikomos fotovoltinės sistemos [1]. Dabartinėje saulės elementų pramonėje, dominuojantys įrenginiai yra kristalinio silicio saulės elementai (c-Si-SE), kurie pasižymi tokiomis pageidautinomis savybėmis kaip ilgalaikis stabilumas bei patikimas energijos konversijos našumas (PCE), o jų gamybos procesai yra puikiai žinomi [2]. Kita vertus, c-Si-SE gamybos kaštai yra pakankamai dideli, todėl c-Si-SE negali visapusiškai konkuruoti ir pakeisti iškastinį kurą [3].

Kaip vieni iš galimų c-Si-SE konkurentų netolimoje ateityje gali būti laikomi perovskitiniai saulės elementai (PSE). Pagrindinis PSE komponentas perovskitas pasižymi įvairiomis savybėmis, tinkamomis naujos kartos saulės elementams konstruoti: perovskito sluoksnių dengimo įvairove, šviesos absorbcija plačiame spektre, pakankamai geru laidumu bei tolerancija sluoksnio defektams [1]. Efektyviems PSE konstruoti paprastai yra naudojami įvairūs krūvininkus pernešantys junginiai, iš kurių skylės transportuojančios medžiagos (STM) daro didelę įtaką ne tik įrenginių PCE, bet ir pačio perovskito stabilumui. Šiuo metu plačiausiai tyrinėjamos ir taikomos STM yra mažamolekuliniai ir polimeriniai puslaidininkiai, kurių savikaina neretai yra pakankamai didelė, o laidumas prastas, todėl juos būtina legiruoti. Dauguma legirantų daro neigiamą įtaką PSE stabilumui ir tai yra viena iš didžiausių kliūčių, siekiant komercializuoti naujos kartos saulės elementus [4].

Neorganiniai puslaidininkiai yra perspektyvūs kandidatai norint pakeisti organinius analogus, kadangi jų laidumas yra pakankamai aukštas ir tai leidžia išvengti legirantų naudojimo. Didelė dalis jų neabsorbuoja saulės šviesos regimojoje bei infraraudonojoje spektro dalyse, kuriose šviesą absorbuoja krūvininkus generuojančios perovskito medžiagos. Taip pat, neorganiniai puslaidininkiai neretai yra gerokai pigesni nei organiniai junginiai, o tai yra svarbus kriterijus saulės elementų gamintojams. Plačiausiai ištirti *p*-tipo neorganiniai puslaidininkiai PSE konstravimui yra NiO<sub>x</sub>, CuSCN, CuO<sub>x</sub>, V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, CuS ir MoO<sub>2</sub>. Tarp jų, vienus iš geriausių rezultatų demonstruoja CuSCN, PSE našumui pasiekiant 20,4 %. Nepaisant to, CuSCN nėra tirpus įprastiniuose organiniuose tirpikliuose, o jo tirpinimui tinkantys tirpikliai, tokie kaip dietil sulfidas (DES) ar amoniakinis vanduo, nėra tinkami perovskitiniam saulės elementams konstruoti [5].

Šiame darbe buvo susintetinta serija organometalinių kompleksinių junginių, siekiant juos panaudoti kaip įprastiniuose organiniuose tirpikliuose tirpius CuSCN prekursorius. Visi junginiai buvo gauti nesudėtingomis vieno žingsnio reakcijomis, gryninti greitais ir nebrangiais metodais bei pasižymėjo santykinai neaukštomis terminio skilimo temperatūromis. Geriausią tirpumą įprastiniuose organiniuose tirpikliuose pademonstravo 4-(5-nonilpiridino) ir tri-*tret*-butilfosfino ligandus turintys CuSCN kompleksiniai junginiai, kurių tirpumas chloroforme siekė atitinkamai 20 mg/ml ir 45 mg/ml.

Anksčiau minėtų prekursorių sluoksniai buvo dengiami ant stiklo substratų bei perovskito paviršių, naudojant sukamojo liejimo (angl. *spin-coating*) metodiką. Gauti sluoksniai buvo atkaitinti virš atitinkamo kompleksinio junginio terminio skilimo temperatūros, susiformuojant CuSCN sluoksniams.

---

### Literatūra

- [1] Wang, R., Mujahid, M., Duan, Y., Wang, Z. K., Xue, J., Yang, Y. *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 47, 1808843.
- [2] Bozzola, A., Kowalczewski, P., Liscidini, M., Redorici, L. *Advances in Physics: X*, 2019, 4, 1, 1548305.
- [3] Louwen, A., Sark, W., Schropp, R., Faaij, A. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 2016, 147, 295-314.
- [4] Calió, L., Kazim, S., Grätzel, M., Ahmad, S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2016, 55, 47, 14522-14545.
- [5] Yang, Y., Pham, N. D., Yao, D., Zhu, H., Yarlagadda, P., Wang X. *Chin. Chem. Lett.*, 29, 8, 1242-1250.

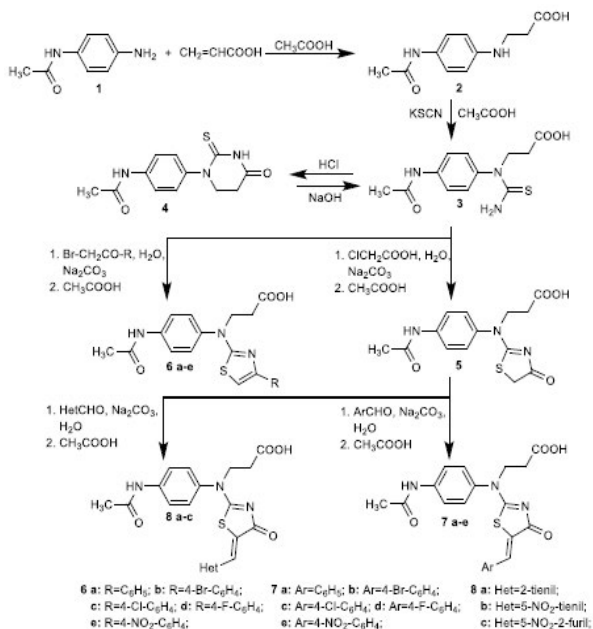
R. Minickaitė,  
V. Mickevičius

Kauno technologijos universitetas,  
cheminės technologijos fakultetas)

## FUNKCIONALIZUOTŲ AMINOTIAZOLŲ SU AROMATINIAIS IR HETEROCIKLINIAIS PAKAITAIS SINTEZĖ IR TYRIMAS

Gamtiniai ir sintetiniai tiazolo dariniai pasižymi labai plačiu biologinio aktyvumo spektru. Derinant įvairius aminorūgščių ir azotą, sierą turinčius heterociklinius farmakoforus, daugeliui kurių būdingos antimikrobinės, fungicidinės, analgetinės, raminančios, priešvėžinės savybės, galima susintetinti junginius, pasižyminčius specifiniu biologiniu aktyvumu. [1]

Pradinis junginys *N*-[4-(acetilamino)-fenil]-β-alaninas (**2**) susintetintas iš 4-ami-noacetanilido (**1**) ir akrilo rūgšties (1 pav.), remiantis literatūros šaltiniu [2].



1 pav.  
Aminotiazolo dari-  
nių sintezės schema

Planuojama tiazolo darinių sintezės schema

3-[(4-acetamidofenil)(karbamotioil)amino]propano rūgštis (**3**) sintezė buvo vykdoma dviem etapais. Iš pradžių  $\beta$ -alaninas **2** yra virinamas su kalio tiocianatu acto rūgštyje 24 valandas. Šios reakcijos metu susidaro ciklinis produktas *N*-[4-(tetrahidro-4-okso-2-tioakso-1(2*H*)-pirimidinil)fenil]-acetamidas (**4**). Sekantis tioureido rūgšties sintezės etapas – susidariusio ciklinio produkto **4** deciklizavimas. Ištirpinus junginį 5 % vandeniniame natrio šarmo tirpale, susidaro tioureido rūgšties natrio druska, kuri į rūgštinę formą paverčiama ją rūgštinant 5 % druskos rūgšties tirpalu iki pH 6.

Kitoje darbo dalyje ištirta 3-[(4-acetamidofenil)(4-okso-4,5-dihidro-1,3-tiazol-2-il)amino]propano rūgštis (**5**) sintezė ir kondensacijos reakcija. Junginys **5** gautas vykdant tioureido rūgšties **3** ir monochloracto rūgšties kondensacijos reakciją vandeniėje terpėje, esant natrio karbonato, mišinio virimo temperatūroje. Susintetinus 3-[(4-acetamidofenil)(4-okso-4,5-dihidro-1,3-tiazol-2-il)amino]propano rūgštį (**5**), iš-tirtos jos kondensacijos reakcijos su aromatiniais bei heterocikliniais aldehidais. Visos reakcijos vykdytos vandenyje, esant natrio karbonato, mišinio virimo temperatūroje. Lyginant su tiazolono **5**  $^1\text{H}$  BMR spektru, **7c** junginio spektro intervale 7,54-7,75 m. d. pastebima daugiau aromatinių ir tiazolono žiedo protonų signalų.  $^{13}\text{C}$  BMR spektre tarp 119,75 m. d. ir 172,21 m. d. taip pat matomas aromatinių ir tiazolono anglies atomų signalų pagausėjimas.

Trečiame darbo etape atlikta aminotiazolo darinių su aromatiniais pakaitais sintezė. Tioureido rūgšties **3** kondensacija su įvairiais bromacetofenonais buvo vykdoma vandenyje, esant natrio karbonato, mišinio virimo temperatūroje. Po reakcijos tiazolo fragmentą turinčios aminorūgštys **6 a-e** į laisvą formą transformuotos reakcijos mišinius parūgštinus acto rūgštimi iki pH 6. Junginio **6c**  $^1\text{H}$  BMR spektre ties 2,07 m. d. stebimas  $\text{CH}_3$  grupės protonų singletas. Ties 2,66 m. d. esantis tripletas priskiriamas  $\text{CH}_2\text{CO}$  grupės protonams, o ties 4,15 m. d.  $\text{NCH}_2$  grupės protonams. Lyginant su pradine medžiaga **3**, aromatinėje srityje matomas smailių pagausėjimas, intervale tarp 7,19 ir 7,87 m. d. esantys signalai priskiriami aromatinių ir tiazolo žiedo protonams. Singletas, esantis ties 10,13 m. d., priskiriamas  $\text{NH}$  grupės protonui.  $^{13}\text{C}$  BMR spektre ties 24,02 m. d. esantis signalas priskiriamas  $\text{CH}_3$  grupės anglies atomui, ties 32,35 m. d. matomas signalas priskiriamas  $\text{CH}_2\text{CO}$  grupės anglies atomui, o ties 48,50 m. d. matoma smailė priklauso  $\text{NCH}_2$  grupės anglies atomui. Intervale 103,50-168,48 m. d. pastebimos smailės priskiriamos aromatinių ir tiazolo žiedų anglies atomams. Smailės, esančios 169,55 m. d. ir 172,64 m. d. priklauso  $\text{CH}_3\text{CO}$  ir  $\text{COOH}$  grupių anglies atomams.

---

### Literatūra

- [1] Rutkauskas, K.; Zubrienė, A.; Tumosienė, I.; Kantminienė, K.; Mickevičius, V.; Matulis, D. Benzenesulfonamides bearing pyrrolidinone moiety as inhibitors of carbonic anhydrase IX: synthesis and binding studies // *Medicinal chemistry research*. New York: Springer. ISSN 1054-2523. eISSN 1554-8120. 2017, vol. 26, iss. 1, p. 235-246.
- [2] Rutkauskas, K., Jakienė, E., Beresnevičius, Z. J. *Chemija ir cheminė technologija*, 2003, 2, 68–73 p.

**Projektas bendrai finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0086) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).**

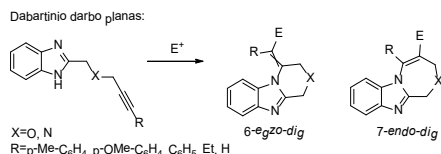
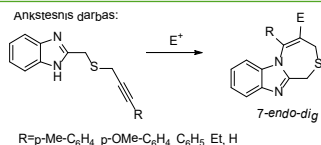
I. Misiūnaitė,  
R. Bukšnaitienė

Chemijos ir geomokslų  
fakultetas, Vilniaus universitetas

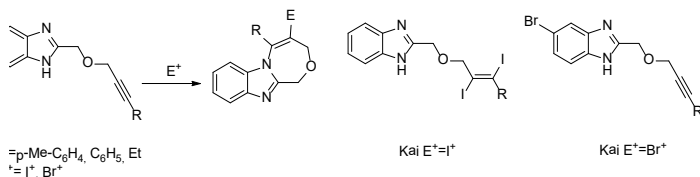
## BENZIMIDAZOL-2-ILALKINŲ ELEKTROFILINIŲ CIKLIZACIJOS REAKCIJŲ TYRIMAS

Kondensuoti benzimidazolai yra svarbūs statybiniai blokai organinėje chemijoje, tačiau žinomi sintezės keliai yra riboti. Šie junginiai savo sudėtyje turintys O- ar N- atomus dažniausiai gaunami C-H aktyvavimo [1], rodžio katalizuojamose ciklizacijos [2], kietafazės sintezės [3], radikalinės ciklizacijos [4] ar Cu/I<sub>2</sub> inicijuojamose elektrofilų tandeminėse reakcijose [5]. Visi šie sintezės metodai reikalauja griežtų reakcijos sąlygų. Pastaruoju metu funkcionalizuotų alkinų elektrofilų inicijuojamos reakcijos sulaukia vis didesnio dėmesio, taip yra todėl, kad šiuo metodu galima gauti įvairius heterociklinius ir karbociklinius junginius, kurie yra naudingi tarpiniai natūralių produktų ir vaistų sintezėje [6]. Kadangi elektrofilų inicijuojamos reakcijos naudojant 2-((3-pakeistus 2-propin-1-il)oksi)metil-1*H*-benzimidazolus ar *N*-((2-1*H*-benzimidazolil)metil)-3-pakeistus 2-propin-1-aminus šiai dienai yra mažai išnagrinėtos atsiveria puikios galimybės tyrimams.

Mūsų laboratorijoje buvo atlikti literatūroje neaprašyti elektrofilų inicijuojamų ciklizacijos reakcijų tyrimai su 2-(3-pakeistais 2-propin-1-il)tio)metil-1*H*-benzimidazolais naudojant skirtingus elektrofilus. Nustatyta, kad 2-(3-pakeisti 2-propin-1-il)tio)metil-1*H*-benzimidazolai sudaro 7-*endo-dig* ciklizacijos produktus. Norėdami praplėsti reakcijų galimybes bei įvertinti heteroatomo esančio sistemoje įtaką nusprendėme susintetinti 2-(3-pakeistus 2-propin-1-il)oksi)metil-1*H*-benzimidazolus bei *N*-((2-1*H*-benzimidazolil)metil)-3-pakeistus 2-propin-1-aminus ir atlikti jų ciklizacijos tyrimus su pasirinktais elektrofilais.



Išmėginus keturis skirtingus 2-((3-pakeistų 2-propin-1-il)oksi)metil-1*H*-benzimidazolų sintezės kelius nustatyta, jog geriausias metodas tiksliniams junginiams gauti –propargilalkoholiams reaguojant su metil-2-chloracetatu išskiriant atitinkamas rūgštis, kurios sulydytos su benzen-1,2-diaminu sudaro produktus 16-61% išeigomis. *N*-((2-1*H*-benzimidazolil)metil)-3-pakeistiems 2-propin-1-aminams gauti buvo pasirinkti keli sintezės keliai, tačiau kol kas nerastas vienas tinkamas metodas jiems sintetinti. Turint pradinius junginius buvo ištirtos jų ciklizacijos reakcijos su įvairiais elektrofilų šaltiniais. Nustatyta, jog benzimidazol-2-ilalkinai dalyvaudami šio tipo reakcijose su pasirinktais elektrofilais 7-*endo-dig* keliu suformuoja septynnarius žiedus. 2-((3-Pakeistų 2-propin-1-il)oksi)metil-1*H*-benzimidazolų reakcijose su I<sub>2</sub> gaunami ne tik cikliniai produktai, bet ir jodo prisijungimas prie trigubojo ryšio, o atliekant reakciją su *N*-bromosukcinimidu (NBS) išskirti elektrofilinio aromatinio pakeitimo produktai.



## Literatūra

- [1] Tan, K. L., Vasudevan, A., Bergman, R. G., Ellman, J. A., Souers, A. J., *Org. Lett.* **2003**, 5, 2131-2134.
- [2] Anastasiou, D., Campi, E. M., Chaouk, H., Jackson, W. R., *Tetrahedron* **1992**, 48, 7467-7478.
- [3] Allin, S. M., Bowman, W. R., Karim, R., Rahman, S. S., *Tetrahedron* **2006**, 62, 4306-4316.
- [4] Aldabbagh, F., Bowman, W. R., *Tetrahedron* **1999**, 55, 4109-4122.
- [5] Ouyang, H. C., Tang, R. Y., Zhong, P., Zhang, X. G., Li, J. H., *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 223-238.
- [6] (a) Yue, D., Della, C. N., Larock, R. C., *Org. Lett.* **2004**, 6, 1581-1584. (b) Mehta, S., Waldo, J. P., Larock, R. C., *J. Org. Chem.* **2009**, 74, 1141-1147. (c) Zhou, C., Dubrovsky, A. V., Larock, R. C., *J. Org. Chem.* **2006**, 71, 1626-1632.



**A. Pakalniškis,  
R. Skaudžius,  
Ž. Stankevičiūtė**

*Chemijos institutas, Vilniaus  
universitetas, Naugarduko 24,  
LT-03225 Vilnius, Lietuva*

## **SKIRTINGŲ PAREMTŲ GDPO<sub>4</sub> „ŠERDIS – APVALKALAS“ STRUKTŪRŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS**

Įprastinis vėžio gydymui naudojamas metodas yra chemoterapija, tačiau ji turi gana daug trūkumų, pvz. mažas naudojamų vaistų stabilumas ar tirpumas. Šis būdas taipogi sukelia stiprius šalutinius efektus: plaukų slinkimą, sveikų ląstelių mirtį, apetito netekimą ir t.t. [1]. Dėl šių priežasčių vėžio tyrimai susilaukia gan daug dėmesio iš mokslininkų visame pasaulyje. Tiriama daug skirtingų metodų, kurie galėtų būti panaudoti kovai su šia liga. Tai gali būti inovacijos tokios kaip nauji ir efektyvesni vaistų kūrimas, ankstyvos stadijos auglių aptikimo gerinimas arba sudėtingesnės – imunoterapija ar net vakcinų kūrimas [2]. Kitas novatoriškas gydymo būdas remiasi multifunkcinių nanodalelių naudojimu, ir potencialiai galėtų būti taikomas ir diagnozavime, ir gydyme. Šios dalelės galėtų sujungti vienu metu ir liuminescencinį biologinį vaizdavimą, ir veikti kaip kontrastiniai agentai magnetinio rezonanso metu siekiant pagerinti auglių aptikimą [3]. Tai pat jos galėtų būti naudojamos kaip vaistų nešikliai, siekiant pagerinti vaistų patekimą į auglius. Nanodalelės yra linkę kauptis augliuose, o ne pasklisti po visą organizmą, tad vaistus būtų galima sukonzcentruoti taip išvengiant daugelio šalutinių poveikių. Vienas potencialus junginys, kurio nanodalelės galėtų būti panaudojamos – tai retųjų žemių elementais legiruotas GdPO<sub>4</sub>. Kadangi Gd<sup>3+</sup> jonai turi 7 nesuporuotus f elektronus, jie sukelia stiprų kontrastą magnetinio rezonanso metu. Papildomas šios medžiagos legiravimas optiškai aktyviais jonais pvz.: Eu<sup>3+</sup>, Er<sup>3+</sup>, Yb<sup>3+</sup>, leistų jas taip pat naudoti įprastiniame liuminescenciniame arba aukštynverčiame vaizdavime. Nepaisant to, vis dar yra daug iššūkių, susijusių su šių medžiagų gaminiu bei gaunamomis savybėmis. Junginiai, naudojami tokiam tikslui, turi atitikti daugelį griežtų kriterijų. Vienas jų – mažas dalelių dydis, kuris siekia apie 100 nm. Jos privalo būti netirpios biologinėje terpėje, neskliti bėgant laikui ir t.t. [4]. Tačiau mažas dalelių dydis gana smarkiai prastina liuminescencines savybes, todėl viena iš naudojimo funkcijų yra prarandama. Siekiant to išvengti yra kuriamos „šerdis – apvalkala“ struktūros [5]. GdPO<sub>4</sub> taip pat gali susidaryti kelias skirtingas kristalines struktūras, kurios daro įtaką liuminescencinėms savybėms bei dalelių stabilumui, tad dar reikia daug tyrimų, jog visi šie veiksniai būtų pilnai įvertinti.

Šiame darbe buvo paruoštos įprastinės liuminescencijos europium legiruotos bei aukštynvertės liuminescencijos iterbiu bei erbiu/tuliu legiruotos GdPO<sub>4</sub> nanodalelės, naudojant hidroterminį metodą. Šios dalelės buvo apvilktos papildomais GdPO<sub>4</sub>, SiO<sub>2</sub> ir Ag apvalkalais. Rentgeno spindulių difrakcinė analizė buvo pasitelkta

siekiant įvertinti jų terminį stabilumą bei grynumą. Naudojant gautus duomenis buvo apskaičiuoti gardelės parametrai. Skenuojanti ir peršviečiamoji elektroninės mikroskopijos buvo panaudotos nustatyti dalelių morfologiją, dydį bei ar sėkmingai buvo uždėtas apvalkalas. Tai pat buvo atlikti dalelių liuminescenciniai matavimai biologinėje terpėje.

---

### Literatūra

- [1] Nurgali, K., Abalo R., *Frontiers in pharmacology* 2018, 9, 245-245.
- [2] Ramaswami, R., V. Harding, *Postgraduate Medical Journal*, 2013, 89, 652.
- [3] Cheng, L., Yang K., *Biomaterials*, 2012, 33, 2215-2222.
- [4] Yoshioka, Y., Higashisaka K., *Nanomaterials in Pharmacology*, 2016, 39, 185-199.
- [5] Homann, C., Krukewitt L., *Angewandte Chemie International Edition*, 2018, 57, 8765-8769.

**D.Palinauskas<sup>1</sup>,  
G.Bagdžiūnas<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius,  
Fizinių ir Technologijos Mokslų Centras,  
Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup> Biochemijos institutas, Bioanalizės skyrius,  
Gyvybės Mokslų Centras, Vilniaus Universitetas,  
Saulėtekio al. 7, LT-10223, Vilnius, Lietuva

## **ELEKTROAKTYVIŲ MOLEKULIŲ SAVITVARKIŲ MONOSLUOKSNIŲ ANT SKAIDRIŲ ELEKTRODŲ FORMAVIMAS IR TAIKYMAS**

**Įvadas.** Skaidrūs ITO elektrodai yra plačiai taikomi saulės elementuose, šviestukuose, elektrochrominiuose stikluose ir biojutikliuose. Tačiau ITO pasižymi prasta adhezija su organinėmis puslaidininkinėmis medžiagomis ir, dėl aukštos darbinės funkcijos, ITO yra prastas elektrodas krūvininkų injekcijai ar ištraukimui. Hidrofilinis ITO paviršius neleidžia efektyviai prieiti hidrofobinėms analitėms prie paviršiaus ir įvykti krūvininkų pernašai. Šios apribojimus galima apeiti tolygiai padengiant ITO elektrodų paviršių savitvarkiais elektroaktyvių molekulių monosluoksniais per kuriuos galėtų vykti efektyvus krūvininkų tuneliavimas. Savo ruožtu, įvairiai funkcionalizuoti organiniai junginiai yra efektyvūs skyles transportuojantys puslaidininkiai ir pasižymintys žemu jonizacijos potencialu, ir yra hidrofobiniai, todėl gali būti taikomi šioms reikmėms. Taip pat izoaloksazino heterociklą turintis riboflavino vitaminas gali būti taikomas kaip elektroaktyvi molekulė, kuri gali formuoti monosluoksnius. Šis junginys yra oksidoreduktazėse paplitęs kaip kofaktoriaus dalis, kuris gali atlikti elektronų donoro ir protonų akceptorius vaidmenį oksidacijos ir redukcijos fermentinėse reakcijose. Šios suformuotos struktūros gali būti aktualios dėl medžiagų ekonomijos, nes ant paviršiaus naudojami mikrogramų eilės medžiagų kiekiai, taip pat dėl gebėjimo demonstruoti unikalias elektrochromizmo savybes, bei kaip jutikliai, skirti aptikti labai mažus medžiagų kiekius (nuo 1 nM iki 1 μM).

**Darbo tikslas.** Suformuoti elektroaktyvių molekulių, turinčių izoaloksazino aktyvius fragmentus, savitvarkius monosluoksnius ant skaidrių ITO elektrodų ir ištirti analičių aptikimo savybes.

**Sintezės metodika.** Skaidrūs elektrodai buvo aktyvuojami 80 °C temperatūros 30 % H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> ir koncentruoto amoniako mišiniu, santykiu - 1:3, 20 minučių. Vėliau ITO elektrodai buvo plaunami dejonizuotu vandeniu. Dinatrio flavino adenino dinukleotido (FAD) ir riboflavino monosluoksniai ant ITO buvo formuojami adsorbicijos būdu, įmerkiant aktyvuotą ITO į atitinkamą tirpalą. FAD ir riboflavino 2 mg/mL koncentracijos tirpalai buvo ruošiami dejonizuotame vandenyje.

**Darbo eiga.** Prieš tiriant adsorbicijos būdu suformuotus FAD ir riboflavino monosluoksnius, ciklinės voltamperometrijos metodu buvo ištirti FAD ir riboflavino tirpalų redokso procesai esant skirtingai vandeninio tirpalo pH vertei. Nustatyti FAD ir riboflavino oksidacijos ir redukcijos potencialai esant 4,6 ir 7,3 pH vertėms. 100 mM Citratinis buferis, į kurį papildomai pridėta 0,1 M KCl elektrolito, laidumui pagerinti, užtikrino 4,2 pH vertę, 7,3 pH vertę užtikrino 100 mM + 0,1 M KCl fosfatinis buferis. FAD ir riboflavino koncentracijos tirpaluose buvo lygios 1 mM.

Elektrochemiškai aktyvus plotas buvo tiriamas vandeniniame 0,1 M KCl ir 5 mM  $K_3[Fe(CN)_6]$  tirpale ciklovoltamperometriiniu metodu, skenuojant skirtingais potencialo sklaidimo greičiais nuo 10 iki 100 mV/s. Aktyvi elektrodo ploto dalis buvo apskaičiuota iš oksidacijos srovės tankio nuo potencialo sklaidimo greičio kvadratinės šaknies tiesinės priklausomybės, pagal Randles-Sevcik lygtį (1):

$$J = 0,4463nF\chi C \left( \frac{nFvD}{RT} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

čia  $J$  – srovės tankis ( $A/cm^2$ ),  $n$  – perneštų elektronų skaičius redokso proceso metu,  $F$  – Faradėjaus konstanta ( $9,647 \cdot 10^4 C/mol$ ),  $C$  – redokso agento koncentracija ( $mol/cm^3$ ),  $R$  – idealiųjų dujų konstanta ( $8,3144 J/(K \cdot mol)$ ),  $T$  – absoliučioji temperatūra (K),  $v$  – potencialo sklaidimo greitis (V/s),  $D$  – redokso poros difuzijos koeficientas. Difuzijos koeficientas  $[Fe(CN)_6]^{4-}/[Fe(CN)_6]^{3-}$  redokso porai yra  $7,6 \cdot 10^{-6} cm^2/s$ .

FAD ir riboflavino monosluoksniais modifikuotų elektrodų atsakas į gliukozės koncentraciją buvo tiriamas pridėdam tam tikrą 0,1 M tūrį D-gliukozės tirpalo ir skenuojant plačiame nuo -1 V iki 1 V potencialo intervale 30 mV/s greičiu. Srovės didėjimas ties FAD ir riboflavino redokso signalais priklausomai nuo gliukozės koncentracijos vaizduojamas 1 paveiksle. Gliukozės oksidacijos tyrimas buvo atliktas nuo 0 mM iki 11,6 mM koncentracijos intervale, nes į šį intervalą patenka fiziologinės gliukozės koncentracijos žmogaus organizme. Maksimalus srovės tankis ( $J_{max}$ ) ir Michael-Menten konstantos ( $K_M$ ) buvo apskaičiuotos netiesinės regresijos metodu remiantis (2) lygtimi:

$$J = \frac{J_{max} \cdot [S]}{K_M + [S]} \quad (2)$$

čia  $[S]$  – gliukozės koncentracija (mM)

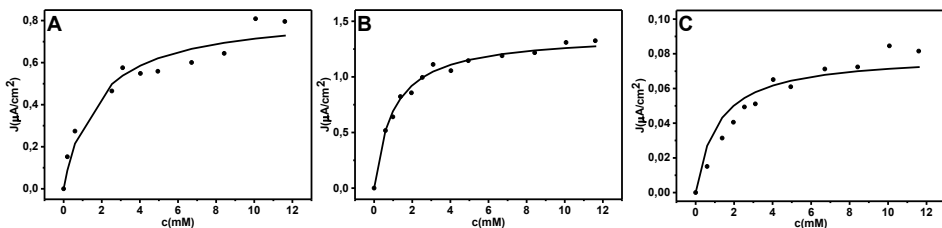
Aptikimo ribos buvo skaičiuojamos remiantis (3) lygtimi:

$$AR = \frac{3,0 \cdot \sigma}{S} \quad (3)$$

čia  $\sigma$  – standartinis signalo nuokrypis,  $S$  – vidutinis jautris. Koeficientas 3,0 yra signalo ir triukšmo santykis. Vidutinis jautris yra srovės priklausomybės nuo gliukozės koncentracijos tiesinėje srityje krypties koeficientas.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** FAD ir riboflavinas fosfatiniame buferyje (pH=7.3) negrįžtamai redukuojasi ties -0,72 V potencialu pagal  $Ag/AgCl/Cl^-$  elektrodą. Padidinus gliukozės koncentraciją iki 5,7 mM, pastebimas redukcijos srovės tankio padidėjimas ties šiuo signalu. Sumažinus tirpalo pH iki 4,3 (citratinis buferis), FAD ir riboflavino ciklovoltamperogramos įgauna grįžtamo redokso proceso formą. Oksidacijos ir redukcijos srovių santykiai indikuoja redokso proceso grįžtamumą, kai šis santykis lygus 1, redokso procesas yra visiškai grįžtamas. Riboflavinui ir FAD šie santykiai artimi vienetui ir atitinkamai lygūs 0,85 ir 0,79. Apskaičiuotas redokso potencialas riboflavinui ir FAD (pH=4,3) lygus -0,24 V pagal  $Ag/AgCl/Cl^-$ . Pridėjus gliukozės į riboflavino ir FAD tirpalus acetatiniame buferyje stebimas oksidacijos ir redukcijos srovės tankių padidėjimas. Todėl buvo padaryta išvada, kad šiais junginiais modifikuotas ITO paviršius galėtų reaguoti į gliukozės koncentraciją šiomis sąlygomis.

Nustatytos aktyviosios riboflavino ir FAD monosluoksniais modifikuotų elektrodų ploto dalys yra lygios atitinkamai 0,66 ir 0,54. Aktyviojo ploto dalis nustatyta ITO elektrodai lygi 0,48. Ploto padidėjimas lyginant su tuščiu ITO elektrodu yra stebimas dėl elektrochemiškai aktyvių FAD ir riboflavino molekulių padengimo.



**1 pav.**

Srovės tankio priklausomybė nuo gliukozės koncentracijos tirpale (pH = 7,3): A – ITO elektrodas modifikuotas riboflavinu, B – ITO elektrodas modifikuotas FAD. C – FAD modifikuoto elektrodo srovės tankio priklausomybė nuo gliukozės koncentracijos citratiniame buferyje (pH=4.6)

1 Pav. A ir B srovės tankio didėjimas, redukciniėje srityje, buvo matuotas ties -0,72 V potencialu, kur buvo matomas srovės pokytis pridėjus į FAD ir riboflavino tirpalus gliukozės tirpalo. 1 Pav. C FAD modifikuoto ITO elektrodo srovės tankio didėjimas matuojamas buvo matuojamas ties -0,25 V potencialu (redukcinė sritis), kai tirpalo pH lygus 4,6. Didėjant gliukozės koncentracijai, 1 pav. A, B ir C kreivių forma atitinka tipišką fermento katalizuojamos reakcijos greičio kitimą, didėjant substrato koncentracijai. FAD ir riboflavinai turi elektrochemiškai aktyvią izoaloksazino grupę, kuri dalyvauja gliukozės oksidacijos procese kaip gliukozės oksidazės kofaktoriaus FAD aktyvioji dalis. Taikant (2) ir (3) lygtis buvo apskaičiuoti parametrai, geriausiai apibūdinantys gautus duomenis, yra surašyti 1 lentelėje. Pagal (3) lygtį aptikimo riba yra proporcinga atvirkštinei vidutinio jautrio reikšmei, todėl gauti monosluoksniai pasižymi aukšta aptikimo riba dėl mažo vidutinio jautrio. Aptikimo riba sutampa su žemesniąja tiesinio intervalo reikšme (1 lentelė).

**1 lentelė** Gliukozės oksidacijos kinetikos parametrai

Mėginys	Potencialas; V	Tiesinė sritis; mM	Vidutinis jautris; $\mu A / (cm^2 \cdot mM)$	Aptikimo riba; mM	$K_M$ ; mM
Riboflavinai (pH = 7,3)	-0,72	0,63 - 4,03	0,14	0,63	1,72
FAD (pH = 7,3)	-0,72	0,40 - 1,96	0,58	0,40	0,99
FAD (pH = 4,6)	-0,25	0,64 - 1,96	0,02	0,64	1,16

**Padėka.** Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal dotacijos sutarties Nr. 09.3.3-LMT-K-712 „mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“

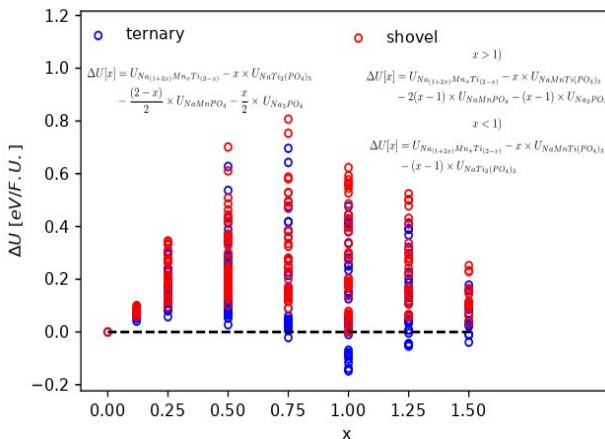
**G. Snarskis<sup>1</sup>,  
L. Vilčiauskas<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Fizikos fakultetas,  
Vilniaus universitetas  
<sup>2</sup> Chemijos institutas,  
Vilniaus universitetas

## NA-MN-TI-PO4 SISTEMOS FAZINĖS DIAGRAMOS ANALIZĖ NAUDOJANTIS PIRMINIŲ PRINCIPŲ SKAIČIAVIMAI

Elektrocheminių įkraunamų baterijų kūrimas yra viena iš svarbiausių dabartinių mokslo ir technologijų temų. Nors ličio jonų akumuliatoriai tampa pirmaujančia technologija, yra susiduriama su daugybe problemų, tokių kaip sauga ir retos bei brangios (kobalto, ličio) gamybai reikalingos žaliavos. Natrio jonų akumuliatoriai yra perspektyvi alternatyva tais atvejais, kai nereikia ypač didelio energijos tankio ir gali būti pagrįsta nebrangiomis ir plačiai paplitusiomis medžiagomis [1].

„Natrium Superlionic Conductor“ (NASICON) karkaso junginiai šiuo metu sulaukia didžiulio akumuliatorių tyrimų bendruomenės dėmesio [2]. Šiame darbe dalis Na-Mn-Ti-PO4 fazinės diagramos, atitinkanti skirtingų Mn koncentracijų  $\{0 \leq x \leq 1,5\}$  kietus tirpalus NTP-123 sistemoje  $\text{Na}_{(1+2x)}\text{Mn}_x\text{Ti}_{(2-x)}(\text{PO}_4)_3$  buvo sukonstruotas naudojant energijų skleidimą klasteriais metodą, pagrįstą periodiniais tankio funkcijų teorijos skaičiavimais [3]. Rezultatai (1 pav.) rodo išskirtinį struktūrų termodinaminį stabilumą ties  $x=1,0$  koncentracija, kas gali būti panaudota kaip naudinga informacija planuojant ir sintetinant Mn-pakeistus NASICON junginius ir suponuoja, kad reikia persvarstyti kai kurias anksčiau publikuotas šių medžiagų savybes [4,5].



**1 pav.**  
Susidarymo energijų  
diagrama. Atvejais kai  
 $x=1,0$  koncentracija yra  
naudojama kaip atskaitos  
taškas pažymėta raudonai.

---

## Literatūra

- [1] Nayak, P. K.; Yang, L.; Brehm, W.; Adelhelm, P, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57**, 102-120 (2018).
- [2] Jian, Z.; Hu, Y.-S.; Ji, X.; Chen, W. *Adv. Mater.*, **29**, 1601925 (2017).
- [3] H. Gao and J. B. Goodenough, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, 12768–12772 (2016).
- [4] Puchala, B.; van der Ven, A., *Phys. Rev. B*, **88**, 094108 (2013).
- [5] Lei, Ping, et al., *Chem. Commun.* **55**, 509-512 (2019).

**L. M. Svirskaitė,  
E. Kasparavičius,  
T. Malinauskas**

*Kauno technologijos  
universitetas, Cheminės  
technologijos fakultetas*

## **NAUJŲ NEIGIAMUS KRŪVININKUS PERNEŠANČIŲ ORGANINIŲ PUSLAIDININKIŲ SU „INKARINIAIS“ FRAGMENTAIS SINTEZĖ IR TYRIMAS**

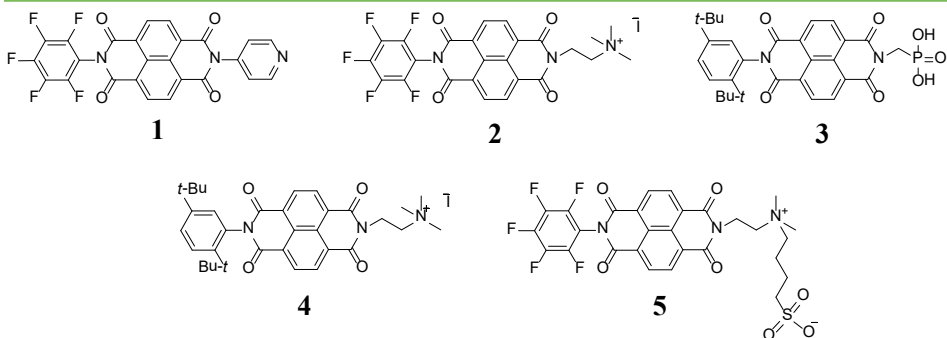
Sparčiai didėjant žmonių populiacijai ir augant jų poreikiams reikalingi milžiniški energijos kiekiai. Pagrindiniai elektros energijos išgavimo būdai yra iškastinio kuro (nafta, anglis ir gamtinės dujos) deginimas arba branduolinė energija. Tačiau tokiu mastu naudojami neatsinaujinantys gamtiniai šaltiniai netolimoje ateityje bus išsekvoti. Be to, į aplinką išskiriami degimo produktai prisideda prie klimato pokyčių, o branduolių dąlijimosi ciklo metu susidariusios radioaktyvios atliekos izoliuojamos jas palaidojant giliai po žeme [1,2].

Šiuo metu kuriant naujus energijos generavimo prietaisus pagrindinis uždavinys yra gauti kuo daugiau „švarios“ elektros energijos sumažinant aplinkos taršą. Perspektyviausia alternatyva – saulės energija. Per metus išspinduliuotas saulės energijos kiekis 100 kartų viršija visų žinomų iškastinio kuro atsargų energijos kiekį [3]. Šiuo metu perspektyviais energijos generavimo prietaisais laikomi perovskitiniai saulės elementai (PSE), kurie konvertuoja krintančią elektromagnetinę spinduliuotę į elektros energiją. Šie įrenginiai neturi daugumos, rinkoje dominuojančių silicio saulės elementų, trūkumų – gamyba paprasta ir pigi, o pasiektas energijos konversijos efektyvumas itin aukštas (25,2 %) [4]. Tam, kad PSE sugeneruota energija taptų konkurencinga naudojamam iškastiniam kurui ar silicio pagrindu pagamintam saulės elementui, reikia perkopti jau esamą PSE našumo rekordą bei išspręsti ilgalaikio stabilumo problemą. Ši problema siejama su būtinybe legiruoti *p* tipo puslaidininkius Li-TFSI, *t*-BP ar FK 209, kurie dėl higroskopškumo, santykinai žemos *t*-BP virimo temperatūros ir galimų piridinuotų darinių susidarymo pagreitiną pačio perovskito ir saulės elemento degradaciją [5,6]. Todėl vis daugiau tyrėjų dėmesio sulaukia inwertuotos struktūros PSE, kuriuose legiravimas nėra būtinas ir stabilumas gali būti ženkliai pagerinamas. Tačiau tokios architektūros prietaisuose plačiai naudojami *n* tipo puslaidininkiai, tokie kaip fullerenas ( $C_{60}$ ) ir jo modifikuoti dariniai ( $PC_{61}BM$ ), yra labai brangūs (>1500 Eur). Be to, modifikavimas yra sudėtingas ir gaunamos darinių išeigos mažos, aukštoje temperatūroje molekulės linkusios sukibti į didesnius agregatus, kas pablogina sluoksnio morfologiją ir padidina krūvininkų rekombinaciją [7].

Šio darbo tikslas – susintetinti neigiamus krūvininkus transportuojančius 1,4,5,8-naftalentetrakarboksidiimidus su „inkarinėmis“ amonio, fosfonrūgšties, sulfonrūgšties grupėmis (1 pav.). Tikėtina, kad molekulių struktūroje esančios „inkarinės“ grupės turėtų sudaryti joninius arba koordinacinius ryšius su perovskite



esančiu Pb atomu suformuojant ant pastarojo paviršiaus savitvarkį monosluoksnį. Tai pat prijungiant didelį hidrofobiškumą suteikiančią apsauginę pentafluorfenil arba di-*tret*-butilfenil fragmentus gerokai pagerinamas perovskito atsparumas drėgmei.



**1 pav.**

Gautų naftalentetrakarboksidiimidų struktūros

Ištyrinėjus termines, optines, elektrochemines savybes bei stabilumo tyrimus buvo nustatyta, kad naftalentetrakarboksidiimidai **1**, **2**, **3**, **4** gali būti panaudoti kaip neigiamus krūvininkus transportuojančios medžiagos konstruojant perovskitinius saulės elementus. Tolimesnis fotovoltinių charakteristikų nustatymas buvo atliktas konstruojant invertuotos struktūros prietaisus. Pagamintų prietaisų fotovoltinės charakteristikos buvo lyginamos su kontroliniu saulės elementu be elektronų pernešančio sluoksnio ir analogišku įrenginiu, turinčiu neigiamus krūvininkus transportuojantį  $C_{60}$  sluoksnį.

**1 lentelė.** PSE fotovoltinės charakteristikos naudojant naftalentetrakarboksidiimidus **1** ir **4**

Perovskitinio saulės elemento sudėtis	Monosluoksnio formavimo metodas	$V_{oc}$ , V	$J_{sc}$ , mA/cm <sup>2</sup>	FF, %	Našumas, %
ITO/ MeO-2PACz/ perovskitas/ BCP/ Cu	–	0,91	14,66	39,9	5,36
ITO/ MeO-2PACz/ perovskitas/ $C_{60}$ / BCP/ Cu	–	1,14	22,2	80,5	20,2
ITO/ MeO-2PACz/ perovskitas/ ETM <b>1</b> / BCP/ Cu	Sukamojo liejimo principas (angl. <i>spin coating</i> )	0,96	17,06	59,42	9,83
ITO/ MeO-2PACz/ perovskitas/ ETM <b>4</b> / BCP/ Cu	Sukamojo liejimo principas (angl. <i>spin coating</i> ).	0,93	20,02	64,8	12,14
ITO/ MeO-2PACz/ perovskitas/ ETM <b>4</b> / BCP/ Cu	Mirkymo metodas	0,93	17,75	64,73	10,07

Invertuotos struktūros perovskitiniai saulės elementai sukonstruoti su naftalendiidų **1** arba **4** savitvarkiu monosluoksniumi pademonstravo didesnį prietaiso efektyvumą (atitinkamai 9,38 %, 12,14 % ir 10,7 %) nei kontrolinis įrenginys (5,36 %). Vis dėlto, prietaisų su šių puslaidininkių monosluoksniais gauti šviesos konversijos efektyvumai nusileido  $C_{60}$  pagrindu gauto prietaiso našumui (20,2 %). Nepaisant to, rezultatai parodė, kad naftalentetrakarboksidiimidų savitvarkiai monosluoksniai yra perspektyvi tyrimų sritis. Šiuo metu tyrinėjamos naftalentetrakarboksidiimidų **2** ir **3** fotovoltinės charakteristikos bei bandoma optimizuoti elektronus transportuojančių medžiagų struktūras.

---

## Literatūra

- [1] Ellabban, O., Haitham, A. R. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2014, 39, 748–764.
- [2] Steinhauser, G., Brandl, A. *Science of the Total Environment*. 2014, 800–817.
- [3] Sum, T. C., Mathews, N. *Energy Environmental & Science*, 2014, 7, 2518–2534.
- [4] NREAL Transforming energy [žiūrėta 2020-06-29]. <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.20200311.pdf>.
- [5] Kasparavičius, E., Magomedov, A. *Chemistry – A European Journal*, 2018, 24, 9910–9918
- [6] Magomedov, A., Kasparavičius, E. *Journal of Materials Chemistry C*, 2018, 6, 8874.
- [7] WU, F., Gao, W. *Journal of Materials Chemistry A*, 2018, 6, 4443–4448.

A. Zinovičius<sup>1</sup>,  
I. Morkvėnaitė-Vilkončienė<sup>2</sup>,  
A. Kisieliūtė<sup>1</sup>, A. Ramanavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Fizikinės chemijos katedra,  
Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų  
fakultetas, Vilniaus Universitetas

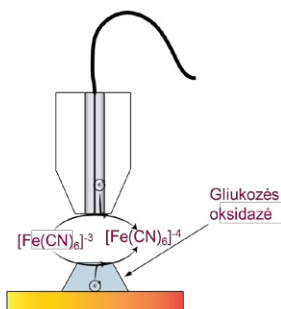
<sup>2</sup> Mechatronikos ir robotikos katedra,  
Mechanikos fakultetas, Vilniaus Gedimino  
Technikos Universitetas

## LOKALIZUOTO ELEKTROCHEMINIO IMPEDANSO TAIKYMO BIOLOGINIAME GLIUKOZĖS JUTIKLYJE GALIMYBIŲ TYRIMAS

Diagnostika ir tyrimai yra vieni iš svarbiausių šiuolaikinės medicinos įrankių, todėl jiems yra skiriama pakankamai daug dėmesio. Tobulėjant technologijoms, vis daugiau pradedama taikyti biologinės kilmės medžiagos, siekiant pagerinti jutiklių tikslumą, atsako laiką bei sumažinti kainą. Tokie jutikliai yra vadinami biologiniais. Juos sudaro pagrindinės dvi dalys: i) biologinio atpažinimo dalis ir ii) signalo vertiklis [1]. Vertiklis fiksuoja pokytį, įvykusį ant biologinio atpažinimo dalies, ir jį paverčia analitiškai naudingą, pavyzdžiui, elektriniu signalu [2].

Šio tipo jutikliai pradėti naudoti ganėtinai seniai, tačiau ne dažnai juos tirti yra naudojama skenuojanti elektrocheminė mikroskopija. Sujungus šį metodą su elektrocheminio impedanso spektroskopija yra gaunama inovatyvi ir retai naudojama skenuojanti elektrocheminio impedanso mikroskopija [3], kurią naudojant, galima atlikti lokalius impedanso matavimus.

Šiame darbe buvo tiriamas biologinis gliukozės jutiklis skenuojančia elektrochemine ir impedanso mikroskopijomis. Lyginant su kitomis elektrocheminėmis metodikomis ji pasižymi unikaliomis savybėmis: i) SECM pozicionavimo sistema leidžia pasirinkti tikslią skenavimo vietą, ii) zondas tyrimo metu neliečia bandinio paviršiaus, todėl mėginys nėra pažeidžiamas, iii) taip pat tyrimus galima atlikti palankiomis bandiniui sąlygomis [3]. Skenuojančios elektrocheminės mikroskopijos tyrimų metu buvo nustatyta, kad sudarytoje sistemoje mažiausia aptinkama fermento koncentracija siekė 100 pg/ml.

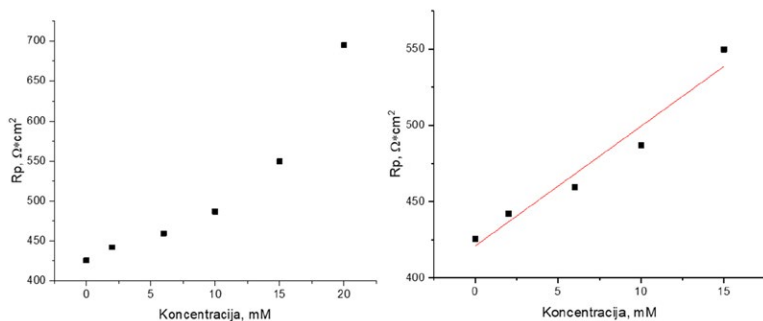


1 pav.

Principinė redukcijos-oksidacijos konkurencinio režimo schema, kai mediatorius yra kalio ferocianidas/kalio fericianidas.

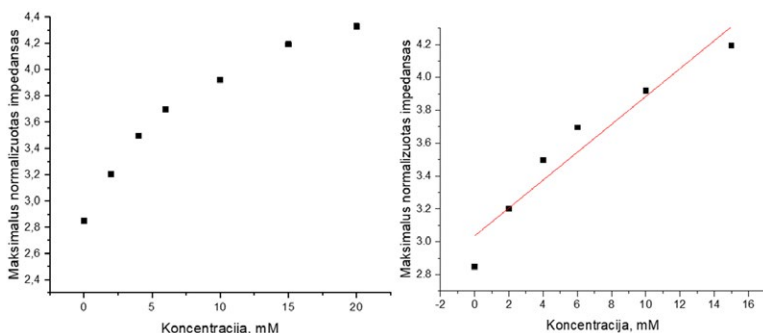
5 pav. Oksidacijos-redukcijos konkurencinis režimas

Pasitelkus plačiai naudojamą elektronų tarpininką elektrocheminio impedanso spektroskopijos tyrimuose: kalio ferocianidas/kalio fericianidas bei naudojant redukcijos-oksidacijos konkurencinį režimą buvo gauta (**1 pav.**), kad krūvio pernašos varža yra tinkamiausias parametras stebėti gliukozės koncentracijos kitimą. Gliukozės koncentraciją šiuo metodu galima patikimai stebėti nuo 0 iki 15 mM (**2 pav.**).



**2 pav.**  
Krūvio pernašos varžos priklausomybė nuo gliukozės koncentracijos. Gliukozės koncentracija buvo didinama nuo 0 iki 20mM esant 1mM – kalio ferocianido/kalio fericianido, potencialas +200mV, 0,01mV amplitudė, dažnių intervalas 0,1 Hz – 50 kHz, 1s integravimo laikas.

Atlikus kintamosios srovės-atstumo priklausomybės tyrimus buvo nustatyta, kad gliukozės oksidazės reakciją patogiausia stebėti esant 10 Hz dažniui, reakcija vykstanti virš imobilizuoto fermento mėginyje esant gliukozės yra vyksta 2,5 karto greičiau nei esant virš petri lėkštelės. O keičiant gliukozės koncentraciją maksimalus pasiektas impedanso dydis pradeda nusistovėti esant 15 mM gliukozės koncentracijai (**3 pav.**).



**3 pav.**  
Maksimalaus impedanso, gauto atliekant kintamosios srovės-atstumo priklausomybės matavimus, priklausomybė nuo gliukozės koncentracijos. Gliukozės koncentracija buvo didinama nuo 0 iki 20mM, 1mM – kalio ferocianido/kalio fericianido, atlikta 10 Hz dažnyje, potencialas +200mV, 0,01mV amplitudė, 1s integravimo laikas.

Apibendrinant galima teigti, kad skenuojanti elektrocheminio impedanso mikroskopija yra tinkama biologinio gliukozės jutiklio stebėjimui ir jo tobulinimui.

---

## Literatūra

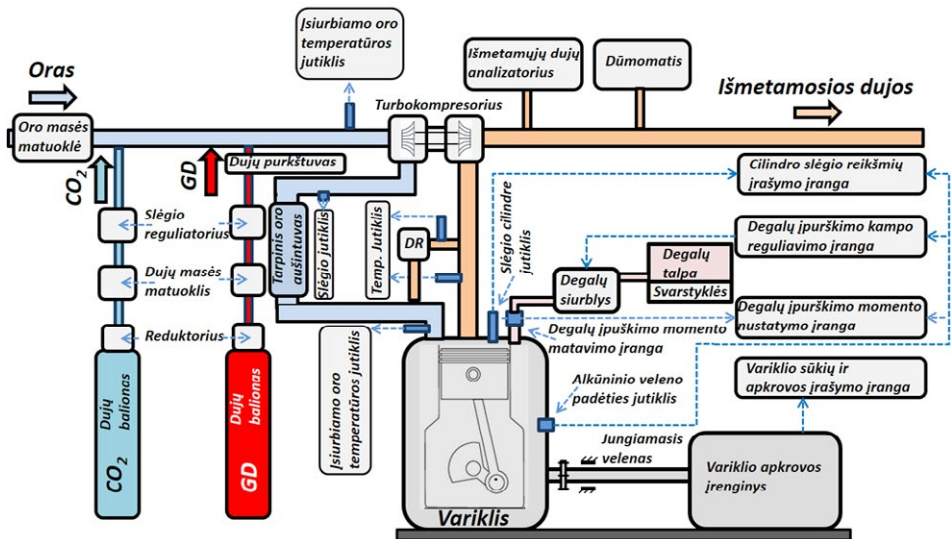
- [1] N. Bhalla, P. Jolly, N. Formisano, P. Estrela, Introduction to biosensors, *Essays Biochem.* 2016, 60, 1–8. <https://doi.org/10.1042/EBC20150001>.
- [2] A.N. Kozitsina, T.S. Svalova, N.N. Malysheva, A. V Okhokhonin, M.B. Vidrevich, K.Z. Brainina, Sensors Based on Bio and Biomimetic Receptors in Medical Diagnostic, *Environment, and Food Analysis*, 2018 1–34. <https://doi.org/10.3390/bios8020035>.
- [3] I. Morkvenaite-Vilkonciene, P. Genys, A. Ramanaviciene, A. Ramanavicius, Scanning electrochemical impedance microscopy for investigation of glucose oxidase catalyzed reaction, *Colloids Surfaces B Biointerfaces*. 2015, 126 598–602. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2015.01.007>.
- [4] M.M.N. Zhang, Y.T. Long, Z. Ding, Filming a live cell by scanning electrochemical microscopy: Label-free imaging of the dynamic morphology in real time, *Chem. Cent. J.* 2012, 6, 1–6. <https://doi.org/10.1186/1752-153X-6-20>.

**E. Bučinskas,  
A. Rimkus**

*Vilniaus technologijų ir  
dizaino kolegija*

## **AUTOMOBILIŲ TRANSPORTO TARŠOS EMISIJŲ MAŽINIMO GALIMYBIŲ TYRIMAS IŠKASTINIUS DEGALUS PAKEIČIANT IŠ BIOATLIEKŲ GAMINAMAIS DVIKUBAIS BIODEGALAIS**

Nepaisant vis griežtesnių aplinkos apsaugos keliamų reikalavimų dyzeliniams automobilių vidaus degimo varikliams, dyzeliniu varomi automobiliai išlieka populiariausia transporto priemone. Siekiant sumažinti dyzelinių variklių išmetamųjų teršalų kiekį yra atlikta nemažai tyrimų naudojant alternatyviuosius degalus. Slėginio uždegimo vidaus degimo varikliams kaip alternatyvius degalus galima naudoti biodyzeliną, taip pat įvairius degalų mišinius. Vienas iš tokių mišinių yra dyzelino ir biodujų mišinys. Skysti ir dujiniai degalai tiekiami atskirai. Toks degalų tiekimo būdas vadinamas dvigubu degalų tiekimu (angl. dual fuel). Siekiant sumažinti išmetamųjų dujų emisijas būtų tikslinga naudoti atsinaujinančius alternatyviuosius degalus.



**1 pav.**  
Bandyto įranga

Bandymai atlikti naudojant slėginio uždegimo variklį 1.9 TDI (1Z), kurio maitinimo sistemoje naudojamas elektronikos valdomas BOSCH VP37 skirstomojo tipo degalų siurblys ir turbokompresorius. Įrengiant dvigubą maitinimo sistemą šitame varikliui buvo sumontuota papildoma dujų maitinimo sistema Dual fuel (Elpigaz - Degamix), kuri suteikė galimybę elektroniškai valdyti gamtinių dujų (GD) įpurškimą. 98 % gamtinių dujų tūrio sudarė metanas (CH<sub>4</sub>). Lygiagrečiai GD tiekiamos anglies dvideginio (CO<sub>2</sub>) dujos, kurių kiekis reguliuojamas slėgio reguliatoriumi. Palaikant numatytą šių dujų tūrių santykį (60 % GD ir 40 % CO<sub>2</sub>) imituotos biodujos (BD). Šių dujų mišinys tiekiamas prieš turbokompresorių.

Tyrimas atliktas varikliui veikiant  $n = 2000 \text{ min}^{-1}$  sukimosi dažniu ir apkraunant stabdymo apkrovomis  $M_s = 45 \text{ Nm}$ ,  $M_s = 60 \text{ Nm}$  ir  $M_s = 90 \text{ Nm}$ . Tokios apkrovos veikia lengvojo automobilio variklį tolygiai važiuojant 50 – 60 km/h, 80 – 90 km/h, 100 – 110 km/h greičiais. Siekiant tiksliau įvertinti biodujų įtaką, bandymai atlikti atjungus deginių recirkuliacijos vožtuvą. Degalų įpurškimo pradžios momentas visiems bandymams buvo nustatytas  $\theta = 6^\circ$  alkūninio veleno (AV) prieš viršutinį galinį tašką (VGT). Kiekvienas bandymas kartotas 5 kartus, o pastebėjus didesnę degalų sąnaudų rezultatų pokytį, kartojamas papildomai.

Įpurškiamų gamtinių dujų masė apskaičiuota įvertinant, kad dujų energija turi sudaryti tam tikrą dalį degalų energijos. Lygiagrečiai tiekimų CO<sub>2</sub> dujų masė apskaičiuota įvertinant kad jų tūris visais atvejais turi sudaryti 40 % dujų mišinio tūrio. Toks GD ir CO<sub>2</sub> dujų mišinys imituoja biodujas (BD). Bandymai atlikti tiekiant dujas įvairiais srautais, užtikrinant kad biodujų energijos dalis sudarytu 0 %, 40 %, 60 % ir 80 % visų degalų energijos. Biodujų energijos dalis grafikuose pažymėta EBD, %, dyzelinas pažymėtas D, biodyzelinas pažymėtas HVO.

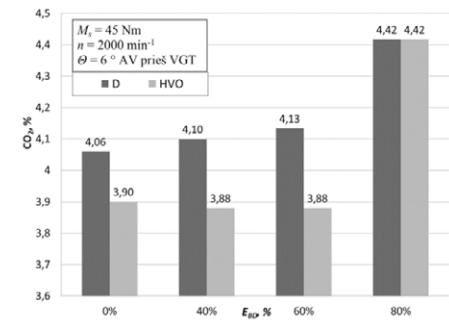
Bandymams panaudotas dyzelinas (257 l) ir HVO biodyzelinas (210 l), dar žymimas Neste MY įsigyti degalinėse. Dujinių degalų mišiniai (510 m<sup>3</sup> nesulėgtų dujų) buvo įsigyta UAB „SGD dujos auto“, kur jos buvo suslėgtos iki 200 bar slėgiu į specialiai pritaikytus balionus.

Varikliui naudojant HVO, anglies dioksido (CO<sub>2</sub>) koncentracija sumažėja ~3,9 % lyginant su įprastiniu dyzelinu, nes HVO degaluose santykinai mažiau anglies. BD energijos dalį didinant iki 60 % ženklus CO<sub>2</sub> emisijos padidėjimo nėra (2 pav. A). Toliau didinant biodujų energijos dalį, anglies dioksido emisijos auga sparčiai naudojant HVO ir susilygina su CO<sub>2</sub> rodikliais, kaip pilotinius degalus naudojant D. Šiuo atveju CO<sub>2</sub> koncentracija ~8,9 % didesnė palyginus su grynu dyzelinu. Anglies dioksido kiekiu prieaugį esant vienodoms variklio darbo sąlygomis galima paaiškinti dideliu anglies dioksido kiekiu biodujose [2].

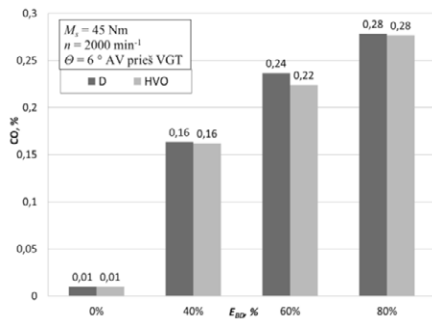
Didėjant biodujų energijos koncentracijai degaluose anglies monoksido (CO) koncentracija išmetamosiose dujose intensyviai auga (2 pav. B). Biodujų sudėtyje esančios CO<sub>2</sub> dujos lemia mažesnę degimo intensyvumą bei temperatūrą ir tai pablogina angliavandenilių pilną oksidaciją. Anglies monoksido emisijų padidėjimą pastebėjo ir kiti tyrėjai [3]. Pastebimas nedidelis anglies monoksido emisijų sumažėjimas pilotiniam uždegimui naudotą dyzeliną pakeitus HVO biodyzelinu, nes antros kartos biodegalai turi mažesnę C/H santykį bei trumpesnę molekulinę grandinę ir lengviau oksiduojasi.

Nesudegusių angliavandenilių (CH) koncentracija deginiuose priklauso nuo degimo proceso cilindre bei cilindro pripildymo šviežiu oru. Dėl biodujose esančio anglies dioksido sumažėja šviežio oro patekimas į cilindrą, taip pat, krenta degimo temperatūra [2]. Didėjant biodujų koncentracijai intensyviai auga nesudegusių angliavandenilių emisijos, tačiau naudojant dvigubus degalus HVO ir BD, lyginant su D ir BD, CH koncentracija nežymiai (~2,5 %) sumažėja esant 60 – 80 % EBD (2 pav. C).

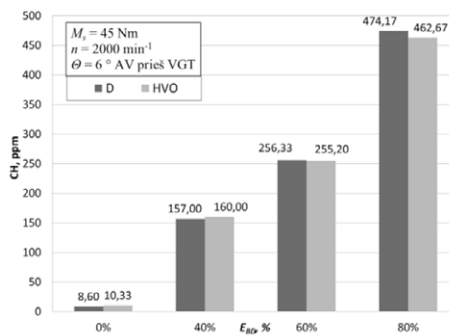
Dūmingumo sumažėjimui ženkliai įtaką (~20 %) daro dyzelino pakeitimas HVO biodyzelinu, nes HVO turi mažesnę C/H santykį bei paprastesnę molekulinę grandinę, dėl ko biodyzelinas pilniau sudega. Biodujas naudojant kartu su HVO dūmingumo mažėjimas pastebimas tik BD energijos koncentracijai viršijus 40 %. Biodujų energijos koncentracijai pasiekus 80 % ir pilotiniam uždegimui naudojant HVO išmetamųjų dujų dūmingumas yra ~48 % mažesnis lyginant su grynu dyzelinu.



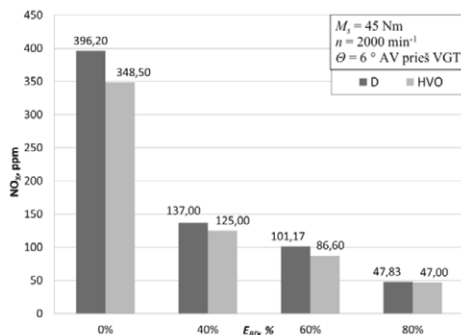
A



B



C



D

## 2 pav.

### Išmetamųjų teršalų pokytis

Dyzeliną pakeitus HVO biodyzelinu matomas ~12 % azoto oksidų (NO<sub>x</sub>) sumažėjimas (2 pav. D) dėl aukštesnio HVO cetaninio skaičiaus ir mažesnio degimo intensyvumo pirminėje intensyvaus degimo fazėje. Dėl BD esančio CO<sub>2</sub> netgi esant 40 % biodujų energijos mišinyje su dyzelinu arba HVO, pastebima beveik 3 kartus mažesnė NO<sub>x</sub> koncentracija deginiuose, nes anglies dvideginis sumažina degimo temperatūrą [1]. Biodujoms sudarant 80 % degalų energijos pasiekiamos iki 8 kartų mažesnės azoto oksidų emisijos lyginant su grynu dyzelinu.



---

### Literatūra

- [1] Deheri, C., Acharya, S. K., Thatoi, D. N., & Mohanty, A. P. (2020). A review on performance of biogas and hydrogen on diesel engine in dual fuel mode. *Fuel*, 260(October 2019), 116337. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116337>
- [2] Mahla, S. K., Singla, V., Sandhu, S. S., & Dhir, A. (2018). Studies on biogas-fuelled compression ignition engine under dual fuel mode. *Environmental Science and Pollution Research*, 25(10), 9722–9729. <https://doi.org/10.1007/s11356-018-1247-4>
- [3] Makareviciene, V., Sendzikiene, E., Pukalskas, S., Rimkus, A., & Vegneris, R. (2013). Performance and emission characteristics of biogas used in diesel engine operation. *Energy Conversion and Management*, 75, 224–233. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2013.06.012>

L. Bučinskas,  
A. Garbaras

*Fizinių ir technologijos  
mokslų centras, Vilnius*

## PAVIRŠINIO IR POŽEMINIO VANDENS SĄVEIKOS TYRIMAS NERIES BASEINO APLINKOJE, NAUDOJANT STABILIJŲ O IR H IZOTOPŲ SANTYKIO MATAVIMO METODUS

Pagrindinis Lietuvoje vandens šaltinis yra požeminis vanduo, kuris naudojamas buitiniams reikmėms ir kaip geriamasis vanduo. Beveik 80 % Lietuvos gyventojų geriamąjį vandenį gauna iš centralizuoto vandentiekio tinklo. Tačiau požeminio vandens šaltiniai gali sąveikauti su paviršiniu vandeniu, kuris savo ruožtu gali būti užterštas. Norint užtikrinti geriamojo vandens kokybę, svarbu žinoti procesus (pvz laiką, per kurį vanduo patenka į vandenvietę), kurie lemia požeminio vandens kokybę. Todėl yra svarbu suprasti ir įvertinti Neries hidrologines savybes, lemiančias paviršinio vandens pernašą į požeminio vandens šaltinius.

Šio projekto tikslas - įvertinti Neries paviršinio vandens sąveiką su požeminio vandens šaltiniais, įvertinti Neries paviršinio vandens dalį požeminio vandens šaltiniuose ir nustatyti upės vandens pernašos į gruntinio vandens šaltinius trukmę. Šio projekto tikslui pasiekti buvo naudojama stabilijų izotopų santykio masių spektrometrijos metodika. Viso darbo metu buvo surinkti 43 Neries, 23 vandentiekio ir 14 vandenviečių bandiniai, kuriems toliau buvo atlikti O ir H izotopų matavimai. Stabilijų izotopų analizėje O ir H izotopų santykiai yra išreiškiami naudojantis  $\delta$  notacija, kuri išreiškia tiriamojo objekto praturtinimą sunkiaisiais izotopais (šiuo atveju  $2H$  ir  $18O$ ) lyginant su tarptautinėmis etaloninėmis medžiagomis ir rezultatai išreiškiami promilėmis [1]:

$$\delta^{18}O = \left[ \frac{\left(\frac{^{18}O}{^{16}O}\right)_B - \left(\frac{^{18}O}{^{16}O}\right)_S}{\left(\frac{^{18}O}{^{16}O}\right)_S} \right] \cdot 1000\text{‰} \quad (1)$$

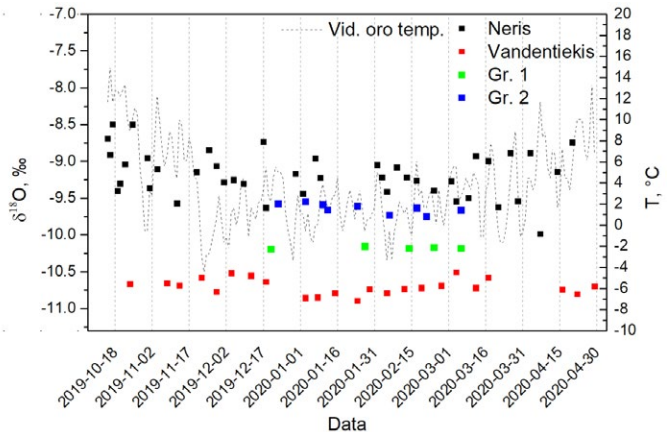
$$\delta^2H = \left[ \frac{\left(\frac{^2H}{^1H}\right)_B - \left(\frac{^2H}{^1H}\right)_S}{\left(\frac{^2H}{^1H}\right)_S} \right] \cdot 1000\text{‰} \quad (2)$$

čia  $(^{18}O/^{16}O)_B$ ,  $(^2H/^1H)_B$  – bandinio izotopų santykis,  $(^{18}O/^{16}O)_S$ ,  $(^2H/^1H)_S$  – etaloninės medžiagos izotopų santykis. O ir H izotopų analizėje naudojamas etalonas SMOW (angl. *Standard Mean Ocean Water*).

Vanduo judėdamas hidrologinėmis sistemomis frakcionuoja, tai yra kinta jo izotopinis santykis. Šaltiniams garuojant, likęs šaltinio vanduo yra izotopiškai praturtinamas sunkiaisiais izotopais, susidarę garai – nuskurdinami. Tai lemia kinetinis izotopų frakcionavimo reiškinys, kuomet lengvesnės  $H_2^{16}O$  molekulės yra greičiau išgarinamos nei  $H_2^{18}O$  molekulės. Kita vertus, kritulių lietaus lašeliai ar sniegės yra praturtinamos

$H_2^{18}O$  ir oro masės judėdamos virš žemyninių regionų yra izotopiškai nuskurdinamos  $H_2^{18}O$  molekulėmis. Taip pat frakcionuoja ir vandenilio izotopai. Šie procesai sukuria sezoninį ciklą paviršiniuose vandenyse, todėl žiemos ir ankstyvo pavasario metu, tirpstant sniegui, vanduo yra nuskurdinamas  $^{18}O$  ir  $^2H$  izotopais, o vasaros ir ankstyvo rudens metu vanduo yra praturtinamas  $^{18}O$  ir  $^2H$  izotopais. Šie vyksmai sukelia sezoninius  $^{18}O/^{16}O$ ,  $^2H/^1H$  pokyčių ciklus, kurie gali būti naudojami įvertinant šaltinius ir vandens pratekėjimo trukmes [2].

Neries, vandentiekio, gręžinio Nr. 1 ir gręžinio Nr. 2  $\delta^{18}O$  verčių kaita projekto laikotarpiu atidėta 1 paveikslėlyje.



Grafike matomas Neries vandens  $\delta^{18}O$  verčių bendras mažėjimas nuo 2019 m. spalio vidurio iki 2020 m. kovo pradžios, o vėlesniu laikotarpiu vertės pradeda didėti. Matyti, jog Neries vandens stabilijų deguonies izotopų santykio vertės susijusios su oro temperatūros pokyčiais – aukščiausios vertės užfiksuotos, kai vidutinė dienos temperatūra siekė  $15,3^{\circ}C$  2019 m. spalio 16 d, o vienos žemiausių verčių užfiksuotos, kai oro temperatūra siekė  $-1^{\circ}C$  2020 m. kovo 14 d. Tai rodo, jog stebima  $\delta^{18}O$  kaita priklauso nuo temperatūrinių pokyčių ore. Gręžiniuose vertės kinta mažuose  $\delta^{18}O$  verčių intervaluose. Toliau remiantis izotopų maišymosi lygtimis [3], buvo apskaičiuota bandinių rinkimo laikotarpio vidutinė Neries upės vandens dalis gręžiniuose: Gr. 1 – 4,9 %, Gr. 2 – 10,8 %.

Gręžiniuose  $\delta^{18}O$  vertės kinta mažesniuose intervaluose dėl lėtai vykstančio paviršinio vandens skverbimosi į giluminius sluoksnius ir požeminio rezervuaro lėtos vandens apykaitos. Todėl Neries vandenyje stebimi sezoniniai svyravimai turėtų atsispindėti ir gręžiniuose su nuslopusia  $\delta^{18}O$  verčių svyravimų amplitude. Tačiau iš rezultatų matome, jog sezoninis  $\delta^{18}O$  verčių kitimas stebimas tik Neries vandens atveju, o gręžinių ir vandentiekio vandens atvejais stebimi tik nežymūs pokyčiai. Tai paaiškina 2019 – 2020 metais užfiksuotas vienas šilčiausių žiemos sezonų, kurio vidutinė temperatūra buvo lygi  $2,6^{\circ}C$ , kai tuo metu 1982 – 2010 metų žiemų vidutinė temperatūra buvo lygi  $-2,8^{\circ}C$ . Taip pat pastaroji žiema buvo beveik besniegė, tik su keliomis dienomis sniego (maks, 0,4 mm sniego). Todėl nebuvo užfiksuota įprasta sezoninio sniego tirpimo sukeliama  $\delta^{18}O$  verčių kaita. Įvertinta pernašos trukmė tarp vandentiekio ir vandenvietės buvo lygi 41 dienai.

---

## Literatūra

- [1] Fry B. *Stable isotope ecology*, 2006, Springer, 521.
- [2] Małozzewski P., Moser H., Stichler W. *Modelling of groundwater pollution by river bank filtration using oxygen-18 data*, 1990, IAHS Publ., 173.
- [3] Hunt R. J., Coplen T. B., Haas N. L., Saad D. A., Borchardt M. A. *Investigating surface water-well interaction using stable isotope ratios of water*, 2005, J. Hydrol.

**E. Petrauskaitė,  
E. Šimoliūnas**

*Vilniaus universitetas,  
Gyvybės mokslų centras,  
Biochemijos institutas*

## **PANTOEA GENTIES BAKTERIJAS INFEKUOJANČIŲ BAKTERIOFAGŲ IDENTIFIKAVIMAS IR CHARAKTERIZAVIMAS**

**Ivadas.** Pastaruoju metu vis didėjantis patogeninių bakterijų atsparumas antibiotikams verčia ieškoti naujų, alternatyvių būdų spręsti šią pasaulinę problemą. Ir nors daugeliu atvejų akcentuojamasi į patogeninių bakterijų sukeliamas žmonių ligas ir jų sprendimo būdus, tačiau nemažiau svarbi ir kovos priemonių prieš milžiniškus nuostolius maisto, žemės ūkio ir veterinarijos pramonėje sukeliančias bakterijas, paieška. Bakteriofagai ar jų pagrindu sukurti produktai – vienas iš sėkmingų pavyzdžių [1,2]. Kitavertus, nepaisant to, kad *Pantoea* genties bakterijos yra vienos gausiausių bakterijų filosoferoje ir yra žinomos ne tik kaip itin svarbūs epifitai ar endofitai, bet ir gali būti susijusios su įvairiomis vabzdžių, gyvūnų ar žmonių ligomis [3,4], šias bakterijas infekuojantys bakteriofagai iki šiol tirti itin menkai, vos keletos virusų, kurie yra identifiukuoti kaip *Pantoea* bakteriofagai, genomai yra paskelbti NCBI duomenų bazėje [5].

Siekiant bent iš dalies pakeisti esamą situaciją, darbo metu buvo atliekamas skyriaus darbuotojų izoliuotų *Pantoea* genties bakterijas infekuojančių bakteriofagų vB\_PagM\_AAM22 (AAM22), vB\_PagM\_SSEM1 (SSEM1), vB\_PagM\_PSKM (PSKM) ir vB\_PagM\_AAM37 (AAM37) identifikavimas ir charakterizavimas taikant tiek klasikinį virusologijos, tiek modernius molekulinės biologijos, biotechnologijos ir biochemijos metodus.

**Darbo tikslas** – naujų bakteriofagų, infekuojančių *Pantoea* genties bakterijas, identifikavimas ir charakterizavimas.

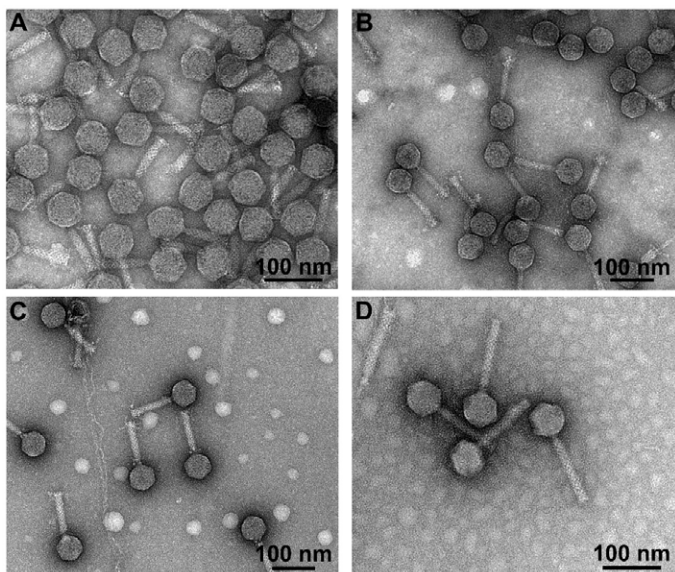
### **Rezultatai ir jų aptarimas.**

#### *Išgrynintų fagų virionų TEM analizė:*

Remiantis bakteriofagų morfologija, nustatyta, kad visi keturi darbo metu tirti bakteriofagai yra *Myoviridae* šeimos virusai, turintys taisyklingos ikosaedro formos galvutes ir ilgą, nelanksčią, susitraukiančią uodegėlę. Bakteriofagų galvutės skersmuo siekia nuo 62,3 nm (bakteriofago AAM22 atveju) iki 67,9 nm (bakteriofagas SSEM1), o išstėtų uodegėlių ilgis yra nuo 85,5 nm (bakteriofago AAM22 atveju) iki 116,2 nm (bakteriofagas SSEM1). Fagų virionų TEM nuotraukos pateikiamos 1 paveiksle.

#### *Bakteriofagų jautrumo chloroformui nustatymas:*

Nustatyta, kad bakteriofagai AAM22, SSEM1, PSKM ir AAM37 tirtomis sąlygomis (5, 10, 30 ir 60 minučių inkubacija 22 °C temperatūroje ir naudojant 50% (V 1:1) chloroformo koncentraciją) yra nejautrūs chloroformui.



**1 pav.**  
*Pantoea* bakteriofagų  
 AAM22 (A), AAM37 (B),  
 PSKM (C) and SSEM1 (D)  
 virionai, stebimi TEM  
 analizės metu.

#### *Bakteriofagų ląstelių-šeimininkų spektro nustatymas:*

Darbo metu, siekiant nustatyti bakteriofagų AAM22, SSEM1, PSKM ir AAM37 galimus šeimininkus, iš viso patikrinti 24 bakterijų kamienai, iš kurių šeši – gamtiniai *Pantoea* izoliatai, o keturi – *Pantoea* kamienai iš DSMZ kolekcijos. Nustatyta, kad iš tikrintų bakterijų kamienų bakteriofagui AAM22 yra jautrus tik vienas *Pantoea agglomerans* izoliatas AUR bei du *P. agglomerans* kamienai iš DSMZ kolekcijos (DSMZ 3493 bei 17872). Tuo tarpu bakteriofagas SSEM1 infekuoja keturis *Pantoea agglomerans* izoliatas (SER, ARC, BSL, DDM). Fagai AAM37 ir PSKM abu infekuoja *Pantoea agglomerans* izoliatą ARC bei du *P. agglomerans* kamienus iš DSMZ kolekcijos (DSMZ 3493 bei 17872). *Pantoea agglomerans* izoliatas AUR yra jautrus fago AAM37 infekcijai, o izoliatai BSL bei DDM jautrūs fagui PSKM. Taip pat nustatyta, kad visi minėtieji bakteriofagai yra plataus temperatūrinio spektro virusai: fagai AAM22, SSEM1, PSKM ir AAM37 formuoja infekcinius centrus temperatūros ribose atitinkamai nuo 4–30, 4–34, 4–35 iki 4–40 °C.

#### *Fagų restrikcijos profilių ir genominės DNR modifikacijų nustatymas:*

Atlikus bakteriofagų AAM22, SSEM1, PSKM ir AAM37 genominės DNR restrikcinę analizę Csp6I, DraI, EcoRII, Eco32I, HhaI ir MboI restrikcijos endonukleazėmis nustatyta, kad bakteriofago AAM22 genominė DNR yra nemodifikuota, o SSEM1, AAM37 bei PSKM genominės DNR yra potencialiai metilintos.

#### *Fagų geno elementų identifikavimas ir anotavimas:*

Bakteriofago SSEM1 geno bioinformatinė analizė atskleidė, kad šio viruso genetinė medžiaga yra linijinė dvigrandė DNR, kurios dydis yra 54982 bp, G+C sąsąta – 44,9%. Genome identifikuoti 97 baltymus koduojantys ASR, tRNR genų nustatyta nebuvo. Fago SSEM1 genome identifikuoti ir anotuoti ASR, koduojantys viriono struktūrinius ir morfogenezės baltymus, taip pat baltymus, susijusius su DNR replikacija, rekombinacija bei atstatymu, nukleotidų metabolizmu, bakterijų lize ir ląstelių-šeimininkės-fago sąveika. Pažymėtina, kad fago SSEM1 genome nebuvo aptikta

genų, susijusių su integracija į ląstelės-šeimininkės genomą, virulentiškumo faktorių ar antibiotikų atsparumo determinančių, kas leidžia teigti, kad šis bakteriofagas turi potencialias galimybes ateityje būti naudojamas kaip viena iš biokontrolės priemonių kovoje prieš patogenines bakterijas. Bakteriofago SSEM1 genomas buvo anotuotas ir paskelbtas NCBI duomenų bazėje (GenBank: MT230534.1).

#### *Bakteriofagų filogenetinė analizė*

Filogenetinė analizė, paremta fagų esminių funkcinių ir struktūrinių genų palyginamąja analize atskleidė, kad bakteriofagas SSEM1 filogenetiniu požiūriu yra artimai susijęs su iki šiol neklasifikuotu *Erwinia* fagu vB\_EamM-Y2, fagas AAM22 potencialiai priklauso *Peatvirus* genčiai, o bakteriofagai AAM37 ir PSKM yra *Dibbivirus* genties atstovai.

#### **Padėka**

Mokslinis tyrimas finansuotas/finansuojamas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0087 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

---

#### **Literatūra**

- [1] Fernandez L., Gutiérrez D., Rodríguez A., García P. *Front. Cell. Infect. Microbiol.*, 2018, 8:296.
- [2] Svircev A., Roach D., Castle A. *Viruses*, 2018, pii: E218.
- [3] Walterson AM., Stavrínides J. *FEMS Microbiol. Rev.* 2015, 39, 968–984.
- [4] Dutkiewicz J., Mackiewicz B., Lemieszek M., Golec M., Milanowski J. *Ann. Agric. Environ. Med.* 2015, 22, 576–588.
- [5] Šimoliūnas E., Šimoliūnienė M., Kaliniene L., Zajančauskaitė A., Skapas M., et al.. *Viruses*, 2018, 10, pii: E583.

**M. Ambrozas,  
A. Juodagalvis**

*Vilniaus universitetas*

## **DRELL-YAN PROCESO TRIUKŠMO ĮVYKIŲ SKAIČIAUS ĮVERTINIMAS KLAIDINGO ATPAŽINIMO METODU**

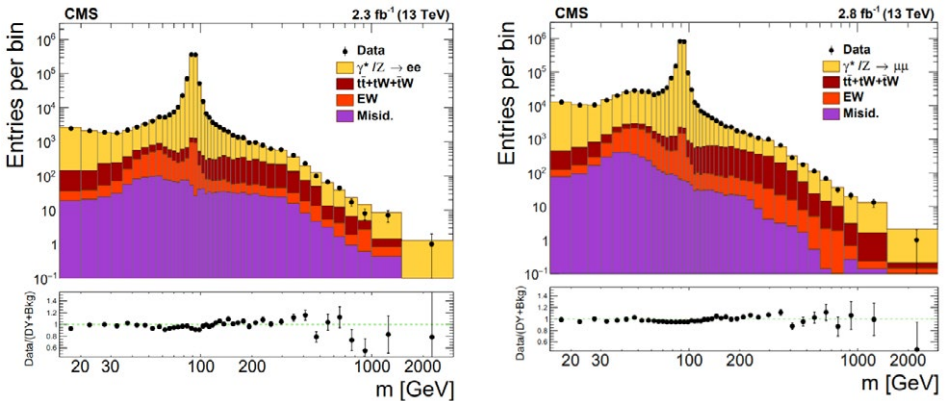
Energingi protonų susidūrimai, vykstantys CERN Didžiajame hadronų greitintuve, padeda tyrinėti mažiausius visatos objektus, tobulinti esamas fizikines teorijas bei vykdyti naujos fizikos paieškas. Protonams susiduriant su didžiule energija, gali įvykti neelastiniai procesai, atskleidžiantys vidinę protonų struktūrą. Pagal dabartinį supratimą, protonai yra sudaryti iš skirtingų rūšių *partonų*: trijų valentinių kvarkų ir virtualių dalelių „jūros“. Tikimybės, kad protono viduje aptiksime konkretaus tipo partonus, yra nusakomos partonų pasiskirstymo funkcijomis. Partonų pasiskirstymo funkcijos negali būti apskaičiuojamos iš pirminių principų. Šios funkcijos nustatomos priderinant jų parametrus prie naujausių eksperimentinių tyrimų rezultatų [1-3].

Galima protonų susidūrimo pasekmė yra kvarko ir antikvarko anihiliacija, kurios metu sukuriama virtualus fotonas arba  $Z$  bozonas, kuris iškart skyla į leptono ir antileptono porą. Tokia reakcija vadinama Drell-Yan procesu [4]. Šis procesas tyrėjams įdomus dėl to, jog jame dalyvauja nevalentinis protono antikvarkas. Drell-Yan proceso diferencialinio reakcijos skerspjūvio matavimai [5-8] pasižymi dideliu tikslumu ir yra naudojami tikslinant partonų pasiskirstymo funkcijas, testuojant perturbatyvų standartinio modelio aprašymą bei nustatinėjant svarbius jo parametrus. Taip pat Drell-Yan proceso tyrimas pagelbėja ir kitus didelių energijų fizikos procesus tiriantiems eksperimentatoriams, kuriems Drell-Yan procesas sudaro didelę triukšmo dalį [9-11].

Svarbi Drell-Yan proceso diferencialinio reakcijos skerspjūvio matavimo dalis – triukšmo įvykių skaičiaus įvertinimas. Egzistuoja nemažai pašalinių procesų, kurių galutinis produktas atrodo labai panašiai į Drell-Yan proceso galutinį produktą. Šie pašaliniai procesai vadinami triukšmais. Galimas ir toks triukšmas, kai protonų susidūrimo metu išlaisvintas partonas sukuria hadronų čiurkšlę, kuri detektoriaus būna klaidingai atpažinta kaip leptonas. Tikimybė, kad čiurkšlė bus identifikuota kaip leptonas, yra labai maža, bet čiurkšlių susidaro daug. Triukšmo įvykių skaičiaus įvertinimui galima būtų pasitelkti modeliuotus protonų susidūrimus, tačiau modeliuojant nėra tiksliai atkartojamos visos tikro eksperimento sąlygos. Tai įneša papildomus matavimo neapibrėžtumus, todėl tikslesniam triukšmo įvykių skaičiaus įvertinimui pasitelkiami matavimų grįsti metodai. Šie metodai pasitelkia tam tikrais parametrais apibrėžtą kontrolinę įvykių sritį, kurioje apskaičiuotas triukšmo įvykių skaičius ekstrapoliuojamas į tiriamąją signalo sritį. Triukšmo procesų, susijusių su hadronų čiurkšlėmis, indėlių galima įvertinti fizikinio objekto klaidingo atpažinimo metodu.



Atliktame darbe klaidingo atpažinimo metodas buvo taikomas įvertinant su klaidingai atpažintomis hadronų čiuirkšlėmis susijusių  $W$ +Jets ( $W$  bozono ir čiuirkšlės) ir  $QCD$  (kelių čiuirkšlių) triukšmo įvykių skaičių. Darbe buvo naudojami CERN CMS detektoriaus 2016 metais užregistruoti protonų susidūrimų duomenys, atitinkantys  $35.9 \text{ fb}^{-1}$  integruotą šviesį ( $\sim 2 \times 10^{15}$  protonų susidūrimų). Triukšmo įvykių skaičius buvo vertinamas elektrono-pozitrono ir miuono-antimiuono galutinėms būsenoms. Įvykdžius į Drell-Yan procesą panašių įvykių atranką buvo nustatinėjama tikimybė, kad dalinę leptono atranką praėjusi čiuirkšlė praeis ir pilną įvykių atranką. Įvertinta tikimybė buvo panaudota su pagalbinais duomenų rinkiniais, kuriuose vienas arba abu leptonai praeina tik dalinę įvykių atranką, nustatant pilną Drell-Yan proceso atranką galinčių praeiti triukšmo įvykių skaičių. Įvertinta, kad su čiuirkšlėmis susiję įvykiai sudaro 0.14% visų Drell-Yan proceso atranką praėjusių elektronų poros įvykių ir 0.02% miuonų poros įvykių. Ankstesnio tyrimo pavyzdys pateiktas 1 pav. Praktikos metu tyrinėti naujesni duomenys, o gauti rezultatai bus naudojami būsime CMS straipsnyje.



1 pav.

Drell-Yan proceso atranką praėjusių elektronų (kairėje) ir miuonų (dešinėje) porų invariantinės masės pasiskirstymai [8]. Juodi taškai vaizduoja CMS detektoriaus užregistruotų įvykių skaičių. Spalvoti stulpeliai vaizduoja skirtingų procesų įverčius. Geltona spalva žymi Drell-Yan procesą. „EW“ žymi dviejų bozonų ir  $DY \rightarrow \tau\tau$  triukšmus. „Misid.“ žymi su hadronų čiuirkšlėmis susijusius  $W$ +Jets ir  $QCD$  triukšmus.

## Literatūra

- [1] NNPDF Collaboration. *The European Physical Journal C*, 2017, 77, 663.
- [2] Alekhin, S. ir kt. *Physical Review D*, 2017, 96, 014011.
- [3] Harland-Lang, L. A. ir kt. *The European Physical Journal C*, 2019, 79, 811.
- [4] Drell, S. D., Yan, T. M. *Physical Review Letters*, 1970, 25, p. 316-320.
- [5] CMS Collaboration. *Journal of High Energy Physics*, 2013, 12, 030.
- [6] ATLAS Collaboration. *Physics Letters B*, 2013, 725, p. 223-242.
- [7] ATLAS Collaboration. *Journal of High Energy Physics*, 2017, 12, 059.
- [8] CMS Collaboration. *Journal of High Energy Physics*, 2019, 12, 059.
- [9] CMS Collaboration. *Physics Letters B*, 2018, 779, p. 283-316.
- [10] CMS Collaboration. *Physics Letters B*, 2017, 768, p. 57-80.
- [11] CMS Collaboration. *Journal of High Energy Physics*, 2018, 11, 151.

**J. Banys,  
J. Vengelis**

*Vilniaus universitetas*

## **IMPULSŲ IŠSKYRIKLIŲ SU ĮVAIRIOS KONSTRUKCIJOS POKELSO ELEMENTAIS TEMPERATŪRINIŲ CHARAKTERISTIKŲ TYRIMAS**

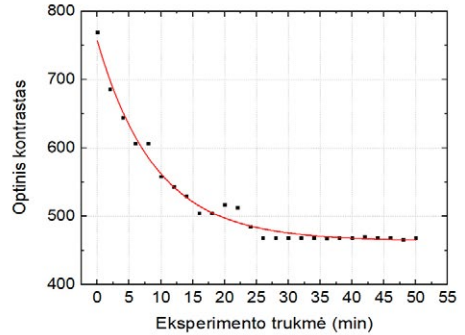
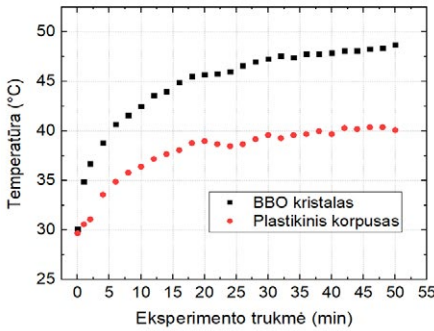
Pokelso elementai yra prietaisai skirti moduluoti lazerinę spinduliuotę. Jie plačiai naudojami lazerių kokybės moduliacijoje, regeneraciniuose stiprintuvuose, lazerinių impulsų išskyrikliuose, lazeriniame atstumų matavime bei pluoštų skenavimo sistemose [1-2]. Kristalas, naudojamas Pokelso elemente, sukuria fazių poslinkį tarp statmenos poliarizacijos bangų, kai prie jo pridodamas elektrinis laukas, t.y. atliekama fazinė moduliacija ir tokiu būdu galima valdyti lazerinės spinduliuotės poliarizaciją bei intensyvumą. Pastaruoju metu Pokelso elementuose yra plačiai naudojami BBO ir DKDP kristalai pasižymintys geromis optinėmis ir mechaninėmis savybėmis bei gerai išvystyta auginimo technologija [3].

Pokelso elementų veikimo efektyvumą nusako optinis poliarizacijos kontrastas. Siekiama, kad jis būtų kuo didesnis, tačiau didelės vidutinės galios lazerinės sistemose svarbu atsižvelgti į terminius reiškinius vykstančius Pokelso elemente: elektrooptiniame kristale atsirandantį temperatūros gradientą dėl kristalo sugerties, ir jo sąlygotus mechaninius įtempimus dėl kurių mažėja Pokelso elemento optinis kontrastas [4-5]. Ši problema tampa vis aktualesnė, nes pramoniniams taikymams skirtų didelės vidutinės galios femtosekundinių lazerinių sistemų paklausa vis didėja, kuriamos vis didesnės vidutinės galios lazerinės sistemos [6]. Taigi terminių reiškinų bei kontrasto temperatūrinių charakteristikų įvertinimas Pokelso elementuose yra svarbūs uždaviniai siekiant užtikrinti stabilų ir efektyvų jų veikimą.

Eksperimente buvo naudojamas 15 W vidutinės galios Yb:KGV femtosekundinis lazeris „Pharos“. BBO ir DKDP Pokelso elementai buvo pastatyti tarp dviejų tarpusavyje sukryžiuotų Glan-Taylor poliarizatorių tokiu būdu realizuojant spinduliuotės intensyvumo moduliatorių. Testuojamų Pokelso elementų temperatūra buvo matuojama termovizoriais „Flir“.

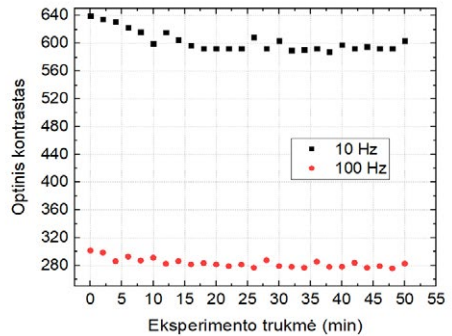
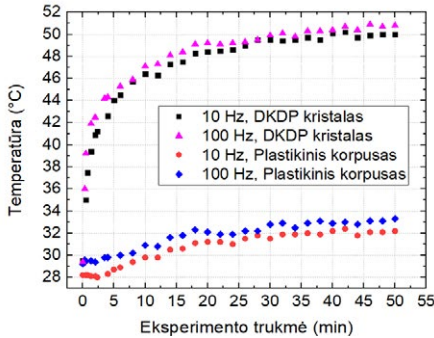
Eksperimento metu buvo nustatyta, kad standartinės konstrukcijos (su žemo šiluminio laidumo plastikiniu korpusu ir be jokio aušinimo) BBO Pokelso elemento kristalo temperatūra pakyla 18,6 °C per visą eksperimento laiką (50 min.). Kontrasto vertė didėjant kristalo temperatūrai sumažėja nuo 769:1 iki 469:1 (1,64 karto) (1 pav.). Pokelso elemento kristalo paviršiaus temperatūra visada pastebimai aukštesnė nei plastikinio korpuso, tai rodo, kad tokia konstrukcija prastai nuveda ir sklaido šilumą nuo BBO kristalo.

Analogiški dėsningumai buvo nustatyti ir standartinės konstrukcijos DKDP Pokelso elementui: DKDP kristalo temperatūra per visą eksperimento trukmę pakyla apie 20 °C, tačiau kontrasto vertė sumažėja tik 1,07 karto. Optinio kontrasto sumažėjimas kylant kristalo temperatūrai gali būti paaiškinamas taip: Pokelso elemento kristalas šyla dėl spinduliuotės sugerties ir akustinių bangų sklaidimo sukkelto šilumos generavimo. Elektrooptiniame kristale atsiradęs temperatūros gradientas lemia mechaninius kristalo įtempimus ir dėl termiškai indukuoto dvejojo lūžio ir fotoelastinio efekto atsiranda papildomas fazės poslinkis tarp statmenos poliarizacijos bangų, mažinantis kontrastą.



**1 pav.**

Standartinio BBO Pokelso elemento kristalo ir korpuso temperatūros (kairėje) bei optinio kontrasto (dešinėje) priklausomybės nuo eksperimento trukmės. Aukštos įtampos impulsų pasikartojimo dažnis 200 kHz, trukmė – 1  $\mu$ s.



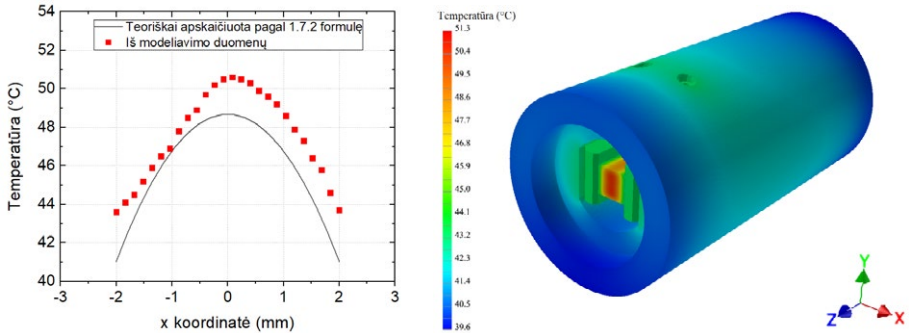
**2 pav.**

Standartinio DKDP Pokelso elemento kristalo ir korpuso temperatūros (kairėje) bei optinio kontrasto (dešinėje) priklausomybės nuo eksperimento trukmės. Aukštos įtampos impulsų pasikartojimo dažniai 10 Hz ir 100 Hz, trukmė – 500 ns.

Standartinės konstrukcijos BBO ir DKDP Pokelso elementuose baigtinių elementų metodu buvo nustatytas juose susidarantis temperatūros pasiskirstymas naudojant Autodesk Inventor ir Autodesk Nastran programas. Modeliavimo metu įvertintas elektrooptiniuose kristaluose susidarantis parabolės formos temperatūros gradientas (3 pav.).

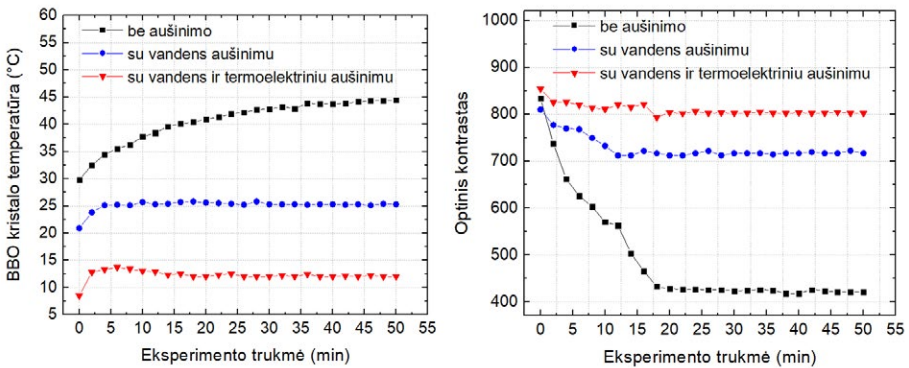
Darbe taip pat pademonstruoti aktyviai bei pasyviai aušinami BBO ir DKDP Pokelso elementai. Nustatyta, kad naudojant specialaus BBO Pokelso elemento aušinimą vandeniui ir aktyvų aušinimą Peltje elementu pasiekiamas apie 2 kartus didesnis ir stabilus optinis kontrastas temperatūrai nusistovėjus nei nenaudojant jokio aušinimo (4 pav.).

Eksperimentiškai pademonstruota, kad BBO ir DKDP Pokelso elementų konstrukcija su didelio šiluminio laidumo keramikiniu korpusu ir papildomu vandens aušinimu sąlygoja efektyvų šilumos nuvedimą nuo elektrooptinio kristalo ir tokiu būdu užtikrinamas iki 1,74 karto didesnis ir stabilus optinis kontrastas lyginant su standartinės konstrukcijos Pokelso elementais.



**3 pav.**

*Kairėje BBO kristale atsirandantis temperatūros gradientas išilgai x ašies. Dešinėje - temperatūros pasiskirstymas esant termodinaminei pusiausvyrai standartiniame BBO Pokelso elemente jį veikiant 15 W vidutinės galios lazerine spinduliuote.*



**4 pav.**

*Aušinama BBO Pokelso elemento kristalo temperatūros (kairėje) bei optinio kontrasto (dešinėje) priklausomybės nuo eksperimento trukmės. Aukštos įtampos impulsų pasikartojimo dažnis 200 kHz, trukmė 1 μs.*

---

### Literatūra

- [1] Bergmann, F. et al. *Applied Science*, 2015, 5(4), 761-769.
- [2] Rezvani, S. A., et al. *Optics Express*, 2018, 26(22), 29460–29470.
- [3] Roth, M. et al. *Physics and Chemistry of Glasses*, 2005, 31(1), 86-95.
- [4] Khristov, I. P. et al. *Optical and Quantum Electronics*, 1983, 15(4), 289-295.
- [5] Ebbers, C. A., Velsko, S. P. *Applied Physics Letters*, 1995, 67(5), 593-595.
- [6] Saraceno, C. et al. *International Society for Optics and Photonics*, 2016, 9835, 98350X.

**J. Berškys,  
S. Orlovas**

*Valstybinis mokslinių  
tyrimų institutas Fizinių ir  
technologijos mokslų centras*

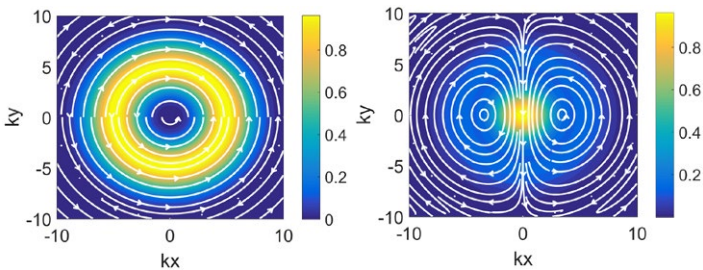
# KOMPLEKSINIO ŠALTINIO VEKTORINIŲ SŪKURIŲ SKLAIDA SUB-BANGINIO DYDŽIO DALELIŲ CHIRALINIAIS KLASTERIAIS IR JOS PRITAIKYMAS GEOMETRINĖS FAZĖS ELEMENTAMS

Viena iš sparčiai besivystančių mokslo šakų yra nanodalelių ir metamedžiagų, sudarytų iš nanostruktūrų sąveikos su elektromagnetinėmis ar akustinėmis bangomis, tyrimai. Dar 1908-aisiais metais Gustavas Mie suformulavo pirmąją teoriją [1], aprašančią plokščios bangos sklaidą nuo sferinės dalelės. Daleles apšviečiančio pluošto forma bei sąsmaukos dydis yra stipriai susiję su paties pluošto poliarizacija [2, 3], todėl lyginant su plokščia banga, vektoriniai aštriai fokusuoti pluoštai sulaukia vis didesnio susidomėjimo.

Šiame darbe yra nagrinėjama kompleksinio šaltinio vektorinių sūkurių sklaida sub-banginio dydžio dalelių chiraliniuose klasteriais ir jos pritaikymas geometrinės fazės elementams. Geometrinė fazė, tai kampas, kuriuo pasukta viena iš elemento sudedamųjų dalių, viso elemento atžvilgiu. Darbe buvo užsibrėžta susipažinti su Mie tipo teorija, aprašančia elektromagnetinio lauko sklaidą per vektorines sferines harmonikas, skaitmeniškai sumodeliuoti skalariinių ir vektorinių kompleksinio šaltinio sūkurių aprašymą per sferines harmonikas ir patikrinti jų korektiškumą bei suskaičiuoti ir atvaizduoti tokių pluoštų sklaidą ir sąveiką su sferinėmis dalelėmis ir meta-atomu sudarytu iš jų.

Teorinėje darbo dalyje yra supažindinama su skalariiniu kompleksinio šaltinio sūkuriu pluošto sprendiniu bei klasikine metodika leidžiančia skalariinį lauką aprašyti vektoriniais bangos lygties sprendiniais.

Antrojeje tiriamojo darbo dalyje yra skaičiuojama skalariinių kompleksinių sūkurių pluoštų sklaidimas vektorinėmis sferinėmis harmonikomis.

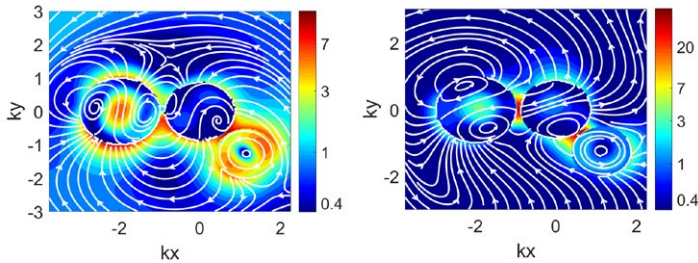


**1 pav.**

*Reguliarus kompleksinio pluošto sūkuriu susidarymas esant sferinei simetrijai ir skersinei elektrinei modai, suskaičiuotas analitiškai (a) bei cilindrinei simetrijai ir skersinei elektrinei modai (b). Baltos strėlytės žymi elektrinio lauko kryptį.*

Pasinaudojus klasikine teorija bei esant skirtingoms simetrijoms, skaičiuojamos tokių pluoštų vektorinės išraiškos sumuojant vektorinius multipolius. To reikia norint aprašyti kompleksinio šaltinio vektorinių sūkurinių pluoštų [4] sklaidą nuo sferinės dalelės. Taip pat šiame skyrelyje yra pateiktas dalelių sklaidos metodas leidžiantis skaičiuoti sklaidą nuo keleto sferų klasterio [5].

Trečiojoje darbo dalyje yra nagrinėjama skaitmeniškai sumodeliuotų skaliarinių ir vektorinių kompleksinio šaltinio sūkurinių, aprašytų per sferines harmonikas, korektiškumas, šie pluoštai atvaizduoti 1 pav. Nustačius reikiamą multipolių skaičių tiksliam pluošto aprašymui, yra skaičiuojama vektorinio kompleksinio sūkurinio pluošto sklaida nuo sferinės dalelės ir meta-atomo, sudaryto iš trijų sferinių dalelių, atvaizduota 2 pav. Apskaičiavus teorijoje aprašytos Jones matricos elementus sumodeliuotas geometrinės fazės elementas.



**2 pav.**

Kompleksinio sūkurinio pluošto sklaida nuo trijų dalelių meta-atomo, esant kritusio pluošto elektrinio lauko skersinės modos sferinei simetrijai (a) ir cilindrinei simetrijai (b). Centrinės dalelės spindulys  $R_c = 70$  nm, šoninių dalelių santykis su centrine dalele  $1.15 : 0.85$ , dalelių santykinė dielektrinė skvarba  $\epsilon = 15.95 + 0.1i$  pluošto bangos ilgis  $\lambda = 500$  nm, kampas kurį sudaro dalelės  $\vartheta = 2.3$  rad ir pluošto  $kz_0 = 5$ ,  $z_0$  – Rėlėjaus ilgis,  $k$  – bangos vektorius. Baltos strėlytės rodo elektrinio lauko kryptį.

Šio darbo metu pavyko kompleksinio šaltinio sūkurinį pluoštą išskleisti vektorinėmis sferinėmis harmonikomis ir pasitelkiant Mie tipo teoriją gauti sklaidos nuo sferinės dalelės ir meta-atomo rezultatus. Nustačius vieno meta-atomo Jones matricą, yra skaitmeniškai sumodeliuotas geometrinės fazės optinis elementas, sudarytas iš daugelio meta-atomų.

### Literatūra

- [1] Mie, G. *Annalen der physik*, 1908, 330(3), 377-445.
- [2] Quabis, S., Dorn, R. *Optics Communications*, 2000, 179(1-6), 1–7.
- [3] Dorn, R., Quabis S. *Physical review letters*, 2003, 91(23).
- [4] Orlov, S., Peschel, U. *Physical Review A*, 2010, 82(6).
- [5] Mackowski, D. *Proceedings of the Royal Society*, 1991, 433, 599-614.

**J. Braver<sup>1,2</sup>,  
A. Gelžinis<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas, Fizikos  
fakultetas, Cheminės fizikos institutas

<sup>2</sup> Fizinių ir technologijos mokslų cent-  
ras, Molekulinių darinių fizikos skyrius

## **MOLEKULINIŲ SISTEMŲ FLUORESCENCIJOS SPEKTRŲ MODELIAVIMAS MIŠRIAIS KVANTINĖS- KLASIKINĖS DINAMIKOS METODAIS**

Lazerinė spektroskopija yra pagrindinis šiuolaikinis informacijos šaltinis, leidžiantis daryti išvadas apie molekulinę sistemų sandarą ir jose vykstančius vyksmus. Tai yra susiję su tuo, kad medžiagos savybes galima sužinoti matuojant jos atsaką į išorinį elektromagnetinį lauką. Pavyzdžiui, fluorescencijos spektrų analizė leidžia nustatyti sistemos energinių lygmenų padėtis ir spręsti apie sąveikos su sistema supančia aplinka stiprį. Kiekybinį spektrų nagrinėjimą palengvina teisingo teorinio modelio parinkimas, kuris padeda išgauti skaitines sistemos parametrų vertes. Taip pat tai suteikia galimybę vertinti įvairių sistemoje vykstančių procesų indėlį į bendrą sistemos elgesį.

Tačiau spektrų modeliavimas vis dar kelia iššūkių vystomiems skaičiavimo metodomams dėl didelės realių molekulinę sistemų parametrų įvairovės. Tikslūs metodai paprastai būna pritaikyti specifinių sistemų klasei arba reikalauja per didelių skaičiavimo resursų. Ieškant naujų skaičiavimo metodikų, neseniai buvo pradėta skirti daugiau dėmesio mišriems kvantiniams-klasikinams metodams, paremtiems kvantinės-klasikinės Liuvilio lygties sprendimu [1]. Ši lygtis yra patogi nagrinėjant kvantines sistemas, sąveikaujančias su aplinka, nes ji leidžia suderinti kvantinę sistemos aprašymą su klasikiniu aplinkos aprašymu. Deja, jos tikslus sprendimas realistiškoms (didelėms) sistemoms yra skaitiškai per brangus, todėl ir čia tenka taikyti tam tikras aproksimacijas kuriant įvairius metodus [2–4]. Skaitiškai efektyvus ir pakankamai tikslus rezultatus leidžiantis pasiekti yra 2012 metais Kapral grupėje pasiūlytas tiesioginių ir atgalinių trajektorijų sprendinio metodas [4, 5] (angl. *Forward-Backward Trajectory Solution*).

Šiame darbe modeliavome molekulinio dimero fluorescencijos spektrus taikant kvantinės-klasikinės Liuvilio lygties tiesioginių ir atgalinių trajektorijų sprendinį (FBTS). Tai leido išsiaiškinti, koks yra šio metodo tikslumas, ir ištirti, ar suskaičiuojamuose spektruose perteikiamos esminės su sistemos sandara susijusios ypatybės.

Fluorescencijos spektrus skaičiavome per dipolių koreliacinę funkciją, kurios skaičiavimui naudojome FBTS metodą. Skaičiavimus atlikome esant įvairiems sistemos parametrų ir palyginome rezultatus su gautais formaliai tikslu hierarchinių judėjimo lygčių metodu [6, 7] (angl. *Hierarchical Equations Of Motion*). Mes nustatėme, kad FBTS metodas visais atvejais leidžia išskirti spektruose esančias smailes. Kintant sistemos parametrų, iširtas kvantinis-klasikinis metodas teisingai atspindi spektrinių linijų išplėtimą ir susiaurėjimo efektus, smaيليų padėčių poslinkį ir jų santykinio intensyvumo pasikeitimus.

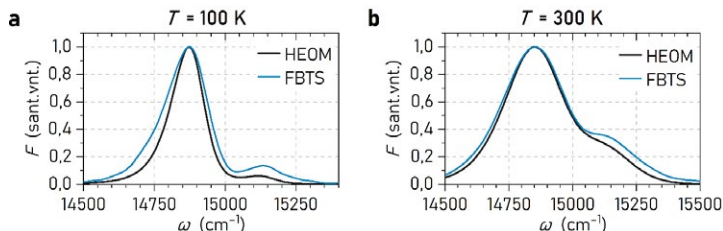


Tačiau taip pat buvo pastebėta, kad daugumoje atvejų FBTS metodas pervertina spektrinių linijų plotį. Labiausiai tai išryškėja, kai:

- sistemos ir aplinkos sąveika yra stipti (žr. pav. 1);
- aplinkos relaksacijos laikas yra mažas (žr. pav. 2);
- aplinkos temperatūra yra žema (žr. pav. 3).

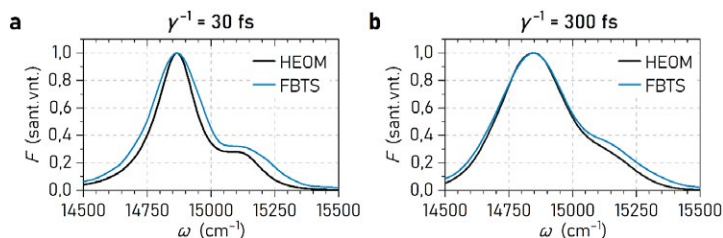
**1 pav.**

Suskaičiuoti fluorescencijos spektrai esant įvairioms sąveikos su aplinka stiprio ( $\lambda$ ) vertėms. **(a)** Fluorescencijos spektrai, suskaičiuoti FBTS ir HEOM metodais. Silpnos sąveikos atvejis. **(b)** Tas pats, kaip ir (a) dalis; stiprios sąveikos atvejis.



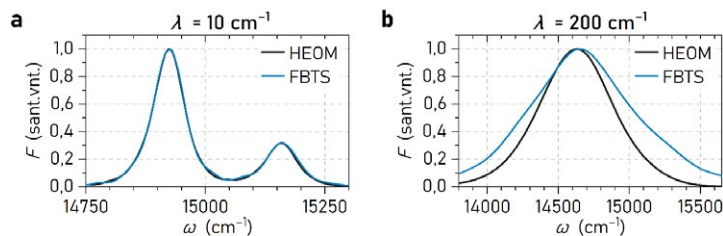
**2 pav.**

Suskaičiuoti fluorescencijos spektrai esant įvairioms aplinkos relaksacijos laiko ( $\gamma^{-1}$ ) vertėms. **(a)** Mažo relaksacijos laiko atvejis. **(b)** Didelio relaksacijos laiko atvejis.



**3 pav.**

Suskaičiuoti fluorescencijos spektrai esant įvairioms aplinkos temperatūros ( $T$ ) vertėms. **(a)** Žemos temperatūros atvejis. **(b)** Aukštos temperatūros atvejis.



Nepaisant metodo trūkumų, galima teigti, jog FBTS metodas yra gana tikslus ir efektyvus, taigi iš principo leidžia apskaičiuoti realių (sudėtingesnių nei dimeras) molekulinį sistemų fluorescencijos spektrus.

### Literatūra

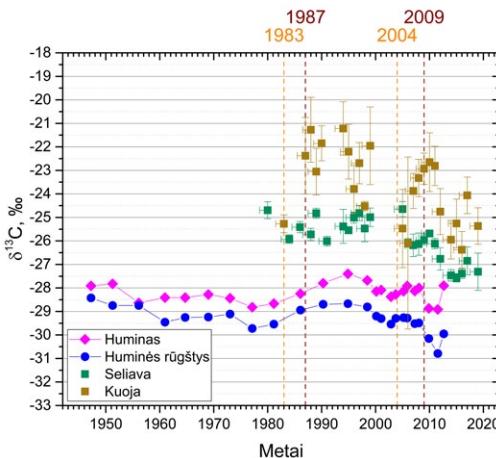
- [1] Kapral, R., *J. Phys.: Condens. Matter*, 2015, 27, 073201.
- [2] Nassimi, A., Bonella, S., Kapral, R., *J. Chem. Phys.*, 2010, 133, 134115.
- [3] Huo, P., Coker, D. F., *J. Chem. Phys.*, 2010, 133, 184108.
- [4] Hsieh, C.-Y., Kapral, R., *J. Chem. Phys.*, 2012, 137, 22A507.
- [5] Hsieh, C.-Y., Kapral, R., *J. Chem. Phys.*, 2013, 138, 134110.
- [6] Xu, R.-X., Tian, B.-L., Xu, J., Shi, Q., Yan, Y., *J. Chem. Phys.*, 2009, 131, 214111.
- [7] Chen, L., Zheng, R., Shi, Q., Yan, Y., *J. Chem. Phys.*, 2009, 131, 094502.

L. Butkus<sup>1</sup>, R. Barisevičiūtė<sup>1</sup>,  
J. Šapolaitė<sup>1</sup>, E. Maceika<sup>1</sup>,  
J. Mažeika<sup>2</sup>, V. Rakauskas<sup>2</sup>,  
V. Remeikis<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Fizinių ir technologijos  
mokslių centras  
<sup>2</sup> Gamtos tyrimų centras

## STABILIJŲ ANGLIES IR AZOTO IZOTOPŲ KAITOS DRŪKŠIŲ EŽERE TYRIMAS

Europos aplinkos agentūra teigia, kad per pastaruosius 150 metų vidutinė temperatūra pasaulyje pakilo beveik 1 °C. Tarpvyriausybė klimato kaitos komisija prognozuoja, kad iki 2100 m. pasaulinė temperatūra gali pakilti 1,8-4,8 °C [1]. Toks temperatūros padidėjimas nuo ikipramoninių laikų viršytų 2 °C. Peržengus šią ribą daug labiau tikėtini negrįžtami ir galbūt katastrofiški pokyčiai. Didėjanti vidutinė temperatūra taip pat turi įtakos vandens telkiniams: pakinta vandens augalija ir fauna. Susidarę organinių bei neorganinių medžiagų koncentracijų pokyčiai daro įtaką visiems ekosistemos metaboliniams procesams, dėl to didėja sistemos eutrofikacija bei šiltnamio dujų išlaisvinimas iš vandens telkinio į atmosferą.



**1 pav.**  
 $\delta^{13}\text{C}$  vertės Drūkšių ežero dugno  
nuosėdų humino (HM) ir humi-  
nių rūgščių (HA) frakcijose bei  
seliavų ir kuojų iš Drūkšių ež.  
žvynuose

Drūkšių ežeras yra unikalus hidrologinis objektas. Nuo 1983 metų, kai buvo pradėtas eksploatuoti Ignalinos atominės elektrinės (IAE) pirmasis energetinis blokas, iki 2009 metų, kai buvo uždarytas antrasis, šio ežero vanduo buvo naudojamas IAE aušinimui. IAE eksploatacijos metu vidutinė ežero temperatūra padidėjo 3-4 °C [2].

Šio darbo tikslas – nustatyti stabilijų anglies izotopų kaitos dėsningumus Drūkšių ežero sistemoje dėl antropogeninio poveikio.  $\delta^{13}\text{C}$  vertės buvo išmatuotos dugno nuosėdų organinėse frakcijose bei skirtingų metų Drūkšių ežero seliavų (*Coregonus albula*) žvynuose.

Stabiliųjų anglies izotopų matavimai Drūkšių ežero dugno nuosėdų humino (HM) ir huminių rūgščių (HA) frakcijose parodė (1 pav.), kad 1953 m. įvykus hidrologiniam pokyčiui ežere (dėl ant ežero ištakos pastatytos hidroelektrinės vandens lygis ežere pakilo 0,3 m),  $\delta^{13}\text{C}$  vertės abiejose frakcijose sumažėjo 0,8 ‰. Nustatyta, kad didėjant Drūkšių ež. eutrofikacijai dugno nuosėdų  $\delta^{13}\text{C}$  didėja.

1995 metais galimai įvyko ežere vyraujančių augalų pokytis, dėl kurio  $\delta^{13}\text{C}$  vertės HM ir HA frakcijose pradėjo mažėti. Taip pat lyginant stabilijų anglies izotopų koncentracijų kitimą žuvyse bei dugno nuosėdose galima pastebėti, kad nuo 2005 metų  $\delta^{13}\text{C}$  kitimas tiek seliavose, tiek HM ir HA frakcijose atitinka vienodą tendenciją: veikiant tik vienam reaktoriui stabilijų anglies izotopų koncentracija nekinta, o po IAE sustabdymo koncentracijos pradeda mažėti. Tai reiškia, kad sumažėjus šiluminei taršai ir azoto bei fosforo išmetimams žymiai sumažėjo šių lokalių efektų poveikis Drūkšių ež. ekosistemai.

---

### Literatūra

- [1] Intergovernmental Panel on Climate Change, „Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change“, 2014.
- [2] P. Meire, M. Coenen, C. Lombardo, M. Robba, ir R. Sacile, Sud., „Integrated Water Management“, t. 80, Dordrecht: Springer Netherlands, 2008.

V. Girdauskas<sup>1,2</sup>,  
A. Michailovas<sup>2</sup>

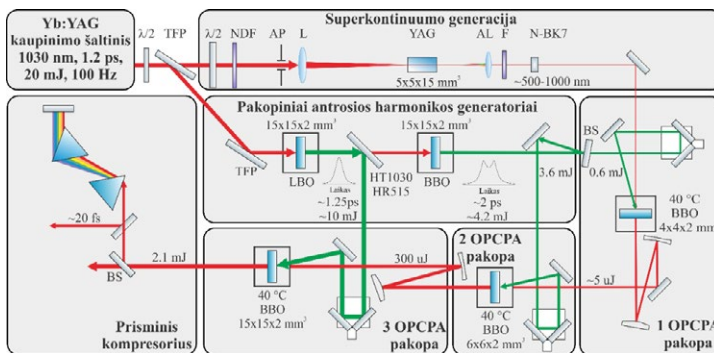
<sup>1</sup> Vilniaus Universitetas  
<sup>2</sup> Fizinių ir technologijos mokslų  
centras FTMC

## PIKOSEKUNDINIŲ KAUPINIMO IMPULSŲ LAIKINĖS FORMOS ĮTAKA OPTINIUI PARAMETRINIUI ČIRPUOTŲ IMPULSŲ STIPRINIMUI

Nebrangūs ir kompaktiški naujos kartos TW eilės smailinės galios lazeriai naudojami medžiagų moksle, netiesinėje optikoje, stipriųjų laukų fizikoje atosekundžių ( $10^{-18}$  s) eilės lazerinių impulsų generacijai. Tokie trumpi šviesos impulsai gali būti naudojami tirti ypač trumpus biologinius, cheminius ir fizikinius procesus. Nuo pirmojo optinio parametrinio čirpuotų impulsų stiprintuvo (OPCPA) sukūrimo [1], buvo pasiūlyta daug pažangių didelės smailinės galios lazerių. Visgi, šiuolaikiniai TW-lygio lazeriai riboja jų panaudojimą dėl didelių fizinių matmenų, didelių kūrimo ir priežiūros išlaidų. Todėl, norint plačiai naudoti didelės smailinės galios lazerius, svarbu sumažinti jų dydį, savikainą, bei pagerinti lazerio energinį efektyvumą.

Šio mokslo tiriamojo darbo tikslas – pritaikius pakopinį antrosios harmonikos generatoriaus impulsų formavimo metodą, ištirti 1.2 ps trukmės kaupinimo impulso gaubtinės formos įtaką optiniam parametriniam čirpuotų impulsų stiprinimui.

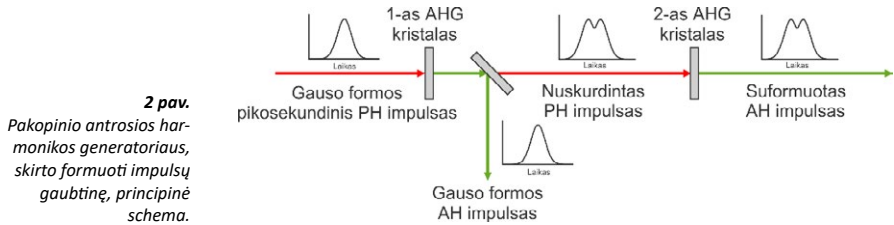
Optinio parametrinio čirpuotų impulsų stiprintuvo kaupinimui ir užkrato signalo generacijai panaudota Yb:YAG stiprintuvo – kompresoriaus lazerinė sistema [2]. Maža dalis energijos atskirta superkontinuumo generacijai [3]. Siekiant valdyti užkrato ir kaupinimo impulsų trukmių santykį buvo papildomai įdedama skirtingo storio N-BK7 stiklo terpės [4]. Kaupinimui panaudotas pakopinis antrosios harmonikos generatorius [5]. OPCPA stiprinimo pakopose naudojami dviejų skirtingų pjovimų BBO kristalai. Principinė tripakopio OPCPA stiprintuvo schema pateikta 1 paveiksle.



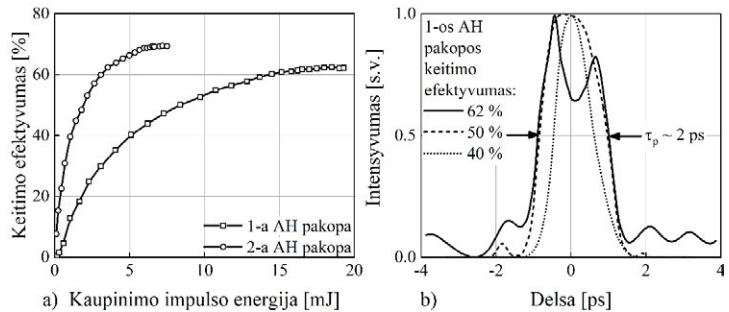
### 1 pav.

Tripakopės OPCPA sistemos principinė schema:  $\lambda/2$  – pusės bangos ilgio fazinė plokštelė, TFP – plonasluoksnis poliarizatorius, NDF – neutralaus optinio tankio filtras, AP – apertūra, L – lęšis, AL – achromatinis lęšis, F – spektrinis filtras, N-BK7 – stiklo terpė, BS – pluošto daliklis, HT1030/HR515 – dichroinis veidrodis (praleidžia  $\lambda=1030$  nm, atspindi  $\lambda=515$  nm).

Čirpuotų impulsų stiprintuvo – kompresoriaus impulsai, kurių centrinis bangos ilgis 1030 nm ir trukmė 1.2 ps, formuojami pakopiniame antrosios harmonikos generatoriuje [5], kurio principas pateiktas 2 paveiksle.



**3 pav.**  
Pakopinio antrosios harmonikos generatoriaus energijos keitimo efektyvumo priklausomybė nuo kaupinio energijos – a ir suformuoto impulso gaubtinės priklausomybė nuo pirmos AHG pakopos energijos keitimo efektyvumo – b.



Pasiestas didžiausias fundamentinės spinduliuotės energijos keitimo į antrąją harmoniką efektyvumas siekė 85 % ir impulso gaubtinė gali būti keičiama tarp Gauso ir dvigubos viršūnės profilio (3 paveikslas).

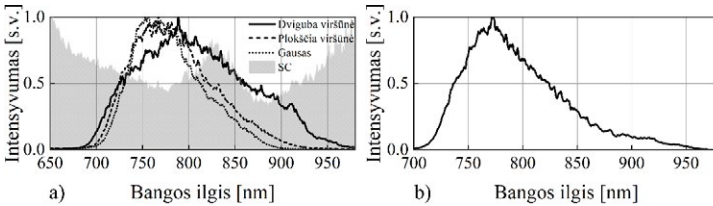
Pasiecta 12.4 mJ impulso energija trečios OPCPA stiprinimo pakopos kaupinimui Gauso skirstinio impulsais ir 4.7 mJ pirmom dviem pakopom keičiamo profilio impulsais. Šiais impulsais buvo kaupinamas plataus spektro užkratas – superkontinuumas ir po trijų stiprinimo pakopų pasiekta 2.1 mJ signalinio impulso energija.

**1 lentelė.** Dviejų OPCPA stiprinimo pakopų priklausomybė nuo kaupinio impulso formos, čia  $\tau_{kaup.}$  – kaupinio impulso pusaukščio plotis,  $E_{kaup.}$  – kaupinio impulso energija,  $E_{sig.}$  – pastiprinto signalinio impulso energija,  $\eta$  – energijos keitimo efektyvumas ir  $\tau_{lim.}$  – spektro pločio ribojama impulso trukmė.

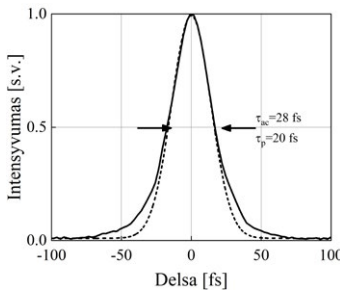
Kaupinio impulso forma	$\tau_{kaup.}$ [ps]	$E_{kaup.}$ [mJ]	$E_{sig.}$ [mJ]	$\eta$ [%]	$\tau_{lim.}$ [fs]
Gauso skirstinio forma	1.2	1.7	0.26	15	11
Plokščios viršūnės forma	1.8	2.5	0.32	13	9.7
Dvigubos viršūnės forma	2.0	3.6	0.30	8.2	8.1

Pirmoje OPCPA pakopoje pastiprinto signalo spektro gaubtinė yra atkartojama antroje pakopoje ir skirtingų formų kaupinimo impulsais pastiprinto signalo spektrai pateikti 4 paveikslu a dalyje. Matoma, kad Gausinio skirstinio bei plokščios viršūnės

impulsais kaupinant OPCPA pakopas, spektro gaubtinės yra beveik identiškos, tačiau dvigubos viršūnės impulsų atveju – spektras daug platesnis ir tolygesnis. Šių spektrų ribojama impulso trukmė siekia 11 fs Gauso formos, 9.7 fs plokščios viršūnės ir 8.1 fs dvigubos viršūnės kaupinimo impulsams.



**4 pav.** OPCPA signalo spektrinės gaubtinės, kaupinant skirtingo profilio impulsais – a ir pastiprinto signalo spektro gaubtinė po trijų OPCPA stiprinimo pakopų – b.



**5 pav.** Pastiprinto ir suspausto signalinio impulso autokoreliacija – ištininė linija ir Gauso skirstinio aproksimacija – punktyrinė linija.

Spektro pločio ribojama trukmė yra 8.6 fs, tačiau naudojant prizminį kompresorių šie impulsai suspausti iki 20 fs trukmės, bet pasitelkus aktyvų fazės gaubtinės valdymą arba čirpuotų veidrodžių sistemą, manoma, kad būtų galima priartėti prie spektro pločio ribojamos impulso trukmės.

### Literatūra

- [1] A. Dubietis, G. Jonušauskas, and A. Piskarskas. Powerful femtosecond pulse generation by chirped and stretched pulse parametric amplification in BBO crystal. *Opt. Commun.*, **88**(4-6):437–440, (1992).
- [2] P. Mackonis and A.M. Rodin. Laser with 1.2 ps, 20 mJ pulses at 100 Hz based on CPA with a low doping level Yb:YAG rods for seeding and pumping of OPCPA. *Opt. Express*, **28**(2):1261–1268, (2020).
- [3] P. Mackonis, A. Petrušėnas, V. Girdauskas, A.M. Rodin, Stable 1100–2400 nm supercontinuum in YAG with picosecond pumping for simplified OPCPA, Conference on Lasers and Electro-Optics Digest, Paper CA-P.43 MON, Munich, Germany, 23–27 June 2019.
- [4] J. Moses, C. Manzoni, S.W. Huang, G. Cerullo, and F.X. Kaertner. Temporal optimization of ultra-broadband high-energy OPCPA. *Opt. Express*, **17**(7):5540–5555, (2009).
- [5] J. Adamonis, R. Antipenkov, J. Kolenda, A. Michailovas, A.P. Piskarskas, A. Varanavicius, and A. Zaukevičius. Formation of flat-top picosecond pump pulses for OPCPA systems by cascade second harmonic generation. *Lith. J. Phys.*, **52**(3), (2012).

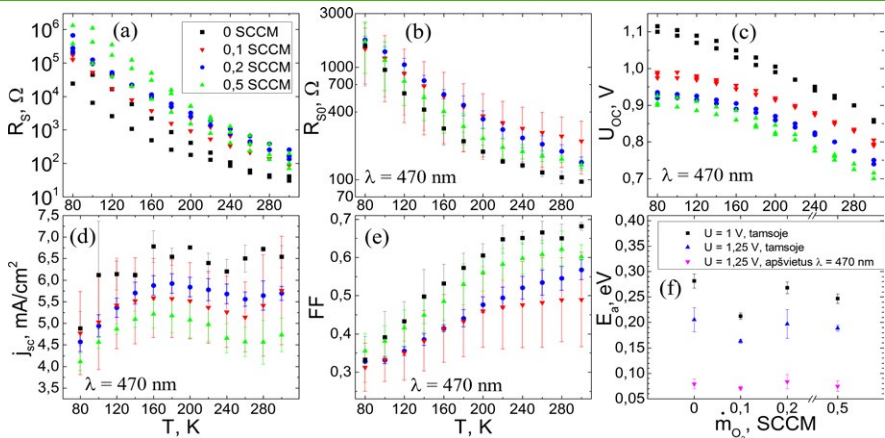
**E. Gvozdiovas,  
V. Kažukauskas**

*Vilniaus universiteto  
Fizikos fakulteto Fotonikos ir  
nanotechnologijų institutas*

# PLONASLUOKSNIO HIDROGENIZUOTO AMORFINIO SILICIO SAULĖS ELEMENTŲ SU $V_2O_{5-x}$ SLUOKSNIŲ FOTOELEKTRINIŲ IR KRŪVIO PERNAŠOS SAVYBIŲ PRIKLAUSOMYBĖS NUO DEGUONIES DUJŲ SRAUTO GAMYBOS METU TYRIMAS

Plonasluoksniai amorfinio silicio saulės elementai (aSi SE) yra pigi alternatyva kristalino Si SE, kuriai būdinga žema gamybos temperatūra bei sumažinti grynos medžiagos kaštai. Buvo tiriami plonasluoksniai (FTO/7,5 nm  $V_2O_{5x}$ /340 nm iaSi:H/1,5 nm LiF/100 nm Al) SE bandiniai. Šiuose SE nusodinami  $V_2O_{5x}$  ir LiF/Al sluoksniai vietoje tipiška legiruojamų  $p$  ir  $n$  tipo sluoksnių [1]. Darbo metu buvo tiriama fotoelektrinių ir krūvio pernašos savybių priklausomybė nuo  $O_2$  dujų masės srauto  $V_2O_{5x}$  sluoksnio nusodinimo metu: 0, 0,1, 0,2, 0,5 SCCM (angl. *standard cubic centimeters per minute*) 80–300 K temperatūrų ruože, kadangi šio parametro įtaką SE savybėms iki šiol nebuvo iširta.

Matavome IV charakteristikas tamsoje bei apšvietus 470 nm bangos ilgio šviesa, rezultatus modeliuojame pagal vieno diodo ekvivalentę grandinę [2, 3]. Šiluminės aktyvacijos energijos nustatytos, matuojant srovės kitimą nuo temperatūros, šildant bei šaldant 5 K/min greičiu (1 pav.).



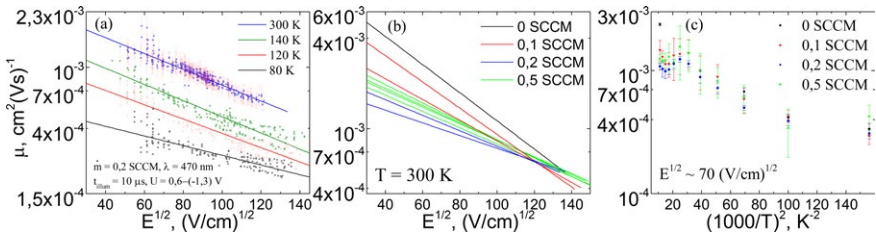
**1 pav.**

Tūrinės varžos a) tamsoje bei b) apšvietus, c) atvirosios grandinės įtampa, d) trumpojo jungimo srovės, e) užpildos faktorius priklausomybės nuo temperatūros esant įvairiems deguonies dujų srautams  $p$ -tipo sluoksnio nusodinimo metu; f) šiluminės aktyvacijos energijos priklausomybė nuo  $O_2$  dujų srauto esant įvairiems išorinėms įtampoms.

Krūvio pernašos savybės buvo tiriamos foto-CELIV metodu [4], įvertinti šviesa sužadintų krūvininkų judriai (2 pav.) bei jų tankio kitimo kinetikos (3 pav.). Apskaičiuoti judriai buvo analizuojami, taikant *Gauss'o* netvarkos modelį (angl. *Gaussian Disorder model* - GDM) [5]. Judris iš eksperimentinių duomenų buvo nustatytas pagal formulę [6]:

$$\mu = \frac{d^2}{2A' t_{max}^2} \left[ \frac{1}{6,2 \left(1 + 0,002 \frac{\Delta j}{j_0}\right)} + \frac{1}{\left(1 + 0,12 \frac{\Delta j}{j_0}\right)} \right]^2, \quad (1)$$

čia  $d$  – bandinio storis,  $A'$  – įtampos augimo sparta,  $t_{max}$  – bandinio atsako signalo viršūnės pasiekimo trukmė,  $j_0$  – nuostovusis srovės tankis,  $j_{max}$  – viršūnės srovės tankis,  $\Delta j = j_{max} - j_0$ .



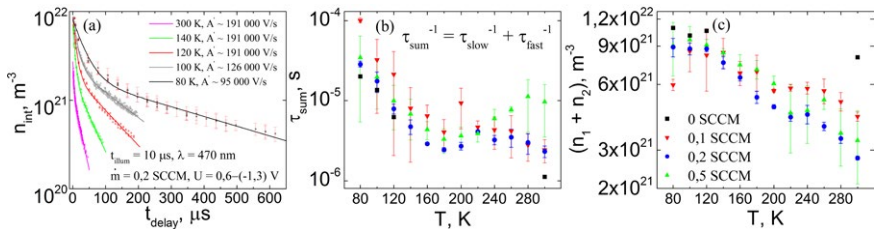
**2 pav.**

a) 0,2 SCCM bandinio šviesa sužadintų krūvininkų judrio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio šaknies (taškai žymi eksperimentinius duomenis, linijos – GDM kreivės); b) įvairių bandinių GDM kreivės kambario temperatūroje; c) šviesa sužadintų krūvininkų judrio priklausomybė nuo atvirkštinės kvadratinės temperatūros.

3 pav. pateiktos foto-CELIV metodu nustatytos krūvininkų tankio kitimo kinetikos, keičiant uždelsimą tarp šviesos impulso išjungimo ir prijungtos įtampos kėlimo pradžios. Rezultatus gerai aprašo dviejų eksponentių gesimo dėsnis:

$$n(t) = n_1 \exp\left(\frac{-t}{\tau_{fast}}\right) + n_2 \exp\left(\frac{-t}{\tau_{slow}}\right), \quad (2)$$

čia  $n_1$  ir  $n_2$  - komponentių pradinės krūvininkų tankio vertės,  $\tau_{fast}$  ir  $\tau_{slow}$  - greitosios bei lėtosios gesimo laikinės komponentės.



**3 pav.**

a) 0,2 SCCM bandinio ištrauktų krūvininkų tankio priklausomybė nuo uždelsimo tarp šviesos išjungimo ir įtampos kėlimo pradžios (taškai žymi eksperimentinius duomenis, tolydžios kreivės – modelio rezultatus); b) šviesa sužadintų krūvininkų gesimo modelio b) suminio laikinio parametro ir c) suminio krūvininkų tankio parametro priklausomybės nuo temperatūros.



Pagrindiniai rezultatai ir išvados:

1. Bandinio atvirosios grandinės įtampa mažėja, augant  $O_2$  dujų srautui p-tipo sluoksnio nusodinimo metu. Atvirosios grandinės įtampa proporcinga elektrono išlaisvinimo darbų  $\phi$  skirtumui tarp SE p ir n sluoksnių, o pereinamųjų metalų oksiduose  $\phi$  sumažėjimas asocijuojamas su deguonies vakansijų tankio padidėjimu [7], todėl šį rezultatą galima sieti su didėjančiu deguonies vakansijų tankiu  $V_2O_{5x}$  sluoksnyje.
2. 0 SCCM bandiniai pasižymi mažiausia tūrine varža, didžiausia fotogeneruojama srove bei užpildos faktoriumi ir, ties kambario temperatūra, šviesa sužadintų krūvininkų judriu, tačiau šiems bandiniams būdinga sparčiausia krūvininkų rekombinacija.
3. Bendru atveju, ryšys tarp  $O_2$  dujų masės srauto p-tipo sluoksnio nusodinimo metu ir SE fotoelektrinių ir krūvio pernašios savybių nėra paprasta koreliacija: mažiausi užpildos faktoriai ir terminės aktyvacijos energijos užfiksuoti 0,1 SCCM bandiniuose, o mažiausias kambario temperatūroje šviesa sužadintų krūvininkų judris – 0,2 SCCM bandiniuose.
4. 300–240 K temperatūrų diapazone lėčiausia šviesa sužadintų krūvininkų rekombinacija stebima 0,5 SCCM bandiniuose, 220–80 K regione – 0,1 SCCM bandiniuose.

---

### Literatūra

- [1] Jung, H., Kwon, J. *Applied Physics Letters*, 2013, 103, 073903.
- [2] Hovel, H. *Semiconductors and Semimetals 11*. Academic Press, Cambridge. 1975. 254.
- [3] Landsberg, P., Klimpke, C. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1977, 354, 101–118.
- [4] Juška, G., Arlauskas, K. *Physical Review Letters*, 2000, 84, 4946–4949.
- [5] Bäessler, H. *Physica Status Solidi B Basic Research*, 1993, 175, 15–56.
- [6] Lorrmann, J., Badada, B. *Journal of Applied Physics*, 2010, 108, 113705.
- [7] Li, Z., Wu, Q. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2008, 19, 366–370.

**G. Klimaitė<sup>1</sup>, J. Mykolaitis,<sup>1</sup>  
A. Tamulevičienė,<sup>2</sup>  
T. Tamulevičius,<sup>2</sup> D. Peckus<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Fizikos katedra, Kauno  
technologijos universitetas  
<sup>2</sup>Medžiagų mokslo institutas,  
Kauno technologijos universitetas

## ULTRASPARTI PLAZMONŲ RELAKSACIJOS DINAMIKA SIDABRO, AUKSO IR VARIO NANODALELIŲ TIRPALUOSE

Pastaruoju metu itin daug dėmesio yra skiriama naujų plazmoninių metalų nanodarinių kūrimui siekiant optimizuoti jų struktūrą, bei ištirti plazmonines savybes. Paviršiaus plazmonų rezonansas (SPR) yra koherentiniai metalo paviršiuje esančių laidumo juostos elektronų virpesiai, sužadinti krintančios šviesos (elektromagnetinės spinduliuotės) [1]. SPR dažnis arba kitaip sugeriamas krintančios šviesos bangos ilgis (sugeriamos ir sklaidomos spinduliuotės) priklauso ne tik nuo geometrinių nanodalelių savybių, bet ir nuo aplinkos terpės ir pačio plazmoninio metalo dielektrinės skvarbos [2]. Dėl savo savybių tauriųjų metalų plazmoninės nanodalelės pasižymi plačiu optoelektriniu panaudojimu: saulės šviesos elementuose, jutikliuose, optiniuose įrenginiuose, šviestukuose, audinių inžinerijoje, onkologinių ligų gydymui ir t. t. [3, 4].

Pasirenkant metalą, kuriame galima sužadinti plazmonų rezonansą, reikia atkreipti dėmesį į metalo savybes. Šios medžiagos turėtų pasižymėti plazmoniniu rezonansu ir galimybe derinti rezonanso bangos ilgį. Tiksliausia yra pasirinkti metalą, kuris turėtų stiprų SPR prie norimo bangos ilgio [5]. Dar svarbu yra metalo cheminis ir mechaninis stabilumas, sintezės technologijų išvystymo lygis.

Šiame darbe buvo tirtos sidabro (Ag), aukso (Au) ir vario (Cu) nanodalelės paruoštos lazerinės abliacijos skystyje metodu (1 lentelė).

**1 lentelė.** Lazerinės abliacijos skystyje parametrai.

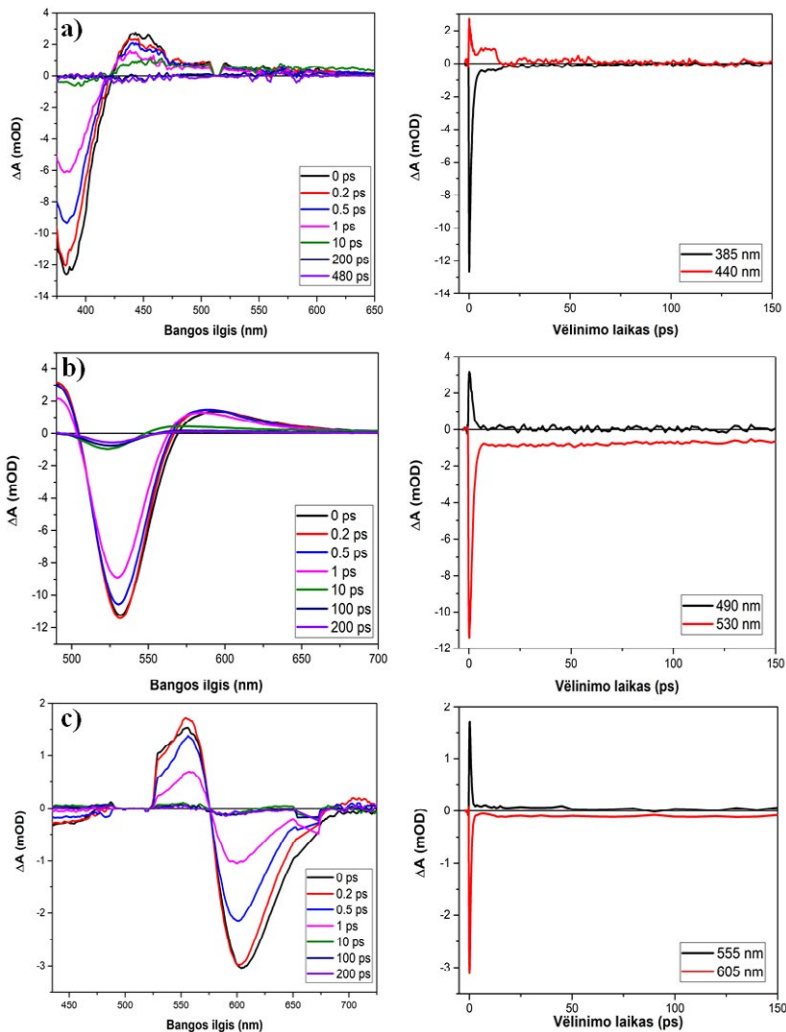
Megžiaga	Tūris	Galia	Impulsų tankis	Ciklų skaičius
Ag	30 ml	4W	100000 imp/mm	30
Au	30 ml	3W	50000 imp/mm	60
Cu	30 ml	3W	20000 imp/mm	150

Tyrimo tikslas – ištirti plazmonų relaksacijos dinamiką įvairiose plazmoninių metalų nanodalelių koloiduose paruoštuose lazerinės abliacijos skystyje metodu, tokiuose kaip sidabras, auksas ir varis. Nustatyti kas lemia šių metalų plazmonų relaksacijos dinamikos savybes.

Tyrimams naudotos TAS (*skirtuminės sugerties spektrometra*), SEM (*skenuojančių elektronų mikroskopas*), nuostoviosios sugerties metodikos. TAS tyrimams buvo naudojamas „Light Conversion“ spektrometras „HARPIA“, paremtas „Light Conversion“ femtosekundiniu lazeriu „Pharos“. „HARPIA“ spektrometru gautų rezultatų

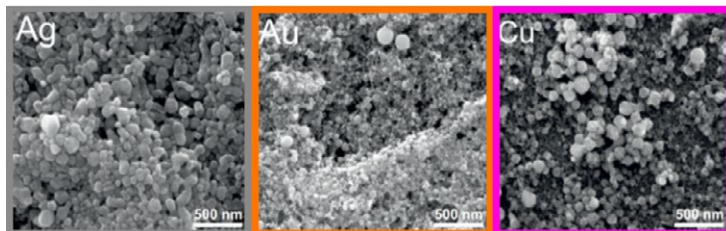
apdorojimui buvo naudota „CarpetView“ programinė įranga. Ag nanodalelės buvo žadinamos 350 nm bangos ilgio, 46  $\mu\text{J}/\text{cm}^2$  intensyvumo lazerine spinduliuote; Au nanodalelės – 350 nm, 32  $\mu\text{J}/\text{cm}^2$ ; Cu nanodalelės – 660 nm, 34  $\mu\text{J}/\text{cm}^2$ . Optiniai tirpalų pralaidumo matavimai atlikti naudojant šviesolaidinį spektrometrą „Avantes“.

Ultraspartūs plazmonų relaksacijos procesai Ag, Au ir Cu nanodalelėse buvo ištirti naudojant TAS metodiką (1 pav.). Pagal 1 pav. esančias skirtuminės sugerties gesimo kreives buvo paskaičiuotos plazmonų relaksacijos trukmės (2 lentelė). Kolloidus paveikus ultratrumpais lazerio impulsais dalelių dydžio analizei panaudota SEM metodika (2 pav.).



**2 lentelė.** Ag, Au ir Cu plazmonų rezonanso relaksacijos laikai.  $\tau_1$ - relaksacijos laikas (ps),  $A_1$ - amplitudė,  $R^2$ - fitinimo tikslumą parodantis dydis.

Bandinys	Bangos ilgis	$\tau_1$	$A_1$	$R^2$
Ag	385 nm	1,31±0.01	1,05±0.004	0,9982
	440 nm	1,703±0.09	0,943±0.0251	0,9931
Au	490 nm	1,939±0,06	1,16±0,001	0,9906
	530 nm	2,18±0,05	1,07±0,01	0,9949
Cu	555 nm	0,77±0.01	1,34±0.02	0,9940
	605 nm	0,79±0.02	1,15±0.012	0,9669



**2 pav.**  
SEM mikrofotografijos.  
Skirtingos spalvos atitinka skirtingos medžiagos nanodalelių dydžių pasiskirstymą.  
Pilka- Ag, oranžinė- Au ir rozinė- Cu.

SEM matavimai parodė, kad lazerinės abliacijos skystyje būdu galima paruošti plazmoninių metalų nanodaleles su palyginti maža dydžių dispersija. TAS rezultatų analizė nustatė, kad plazmonų relaksacijos dinamika ryškiai priklauso nuo pasirinkto plazmoninio metalo. Sparčiausiai plazmonų relaksacija vyksta Cu nanodalelėse, o lėčiausiai Au (2 lentelė).

Padėka. Šis tyrimas buvo finansuojamas pagal Europos Sąjungos fondų investicijos veiksmų programą „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studento mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“ Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0197.

### Literatūra

- [1] Prasad P. N., *Nanophotonics*. John Wiley & Sons, Hoboken, 2004, 30.
- [2] Eustis S., El-Sayed M. A. *Chem. Soc. Rev.* 2006, 35, 209–217.
- [3] Hartland G. V. *Chem. Rev.*, 2011, 111, 3858–3887.
- [4] Meškiniš Š., Peckus D. et.al. *Nanoscale Res. Lett.* 2017, 12, 288.
- [5] Rycenga M., Cobley C. M. et al. *Chem. Rev.*, 2011, 111, 3669–3712.

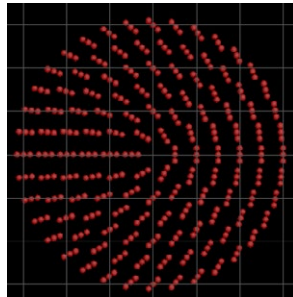
**K. Laurinavičius,  
T. Gertus**

*Valstybinis mokslinių tyrimų  
institutas Fizinis ir technologijos  
mokslų centras*

## **SUB-BANGINIO DYDŽIO DALELIŲ KLASTERIŲ TYRIMAS IR PRITAIKYMAS GEOMETRINĖS FAZĖS FOTONINIŲ ELEMENTŲ GAMYBAI**

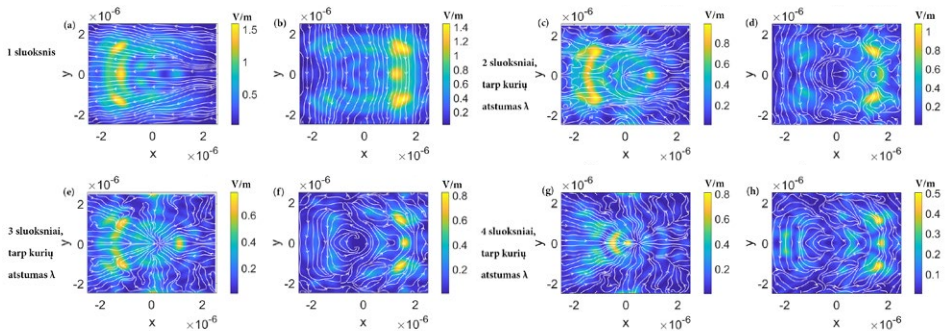
Šiame darbe naudojame Lumerical FDTD programinę įrangą ir tiriamo sub-banginius meta-atomus, skirtus geometrinės fazės elementų kūrimui. Per pastarąjį dešimtmetį metamedžiagų mokslas susilaukė didelio susidomėjimo. Metamedžiagos įdomios todėl, kad galime sukurti tokias medžiagos savybes, kurios gamtoje nėra aptinkamos [1]. Šiame darbe metamedžiagos sudaromos iš pavienių meta-atomų ir tiriama jų pavienis ir kolektyvinis atsakas. Naudojami tokį metamedžiagos kūrimo būdą galime gauti tokias egzotines savybes kaip neigiamas lūžio rodiklis ir pan. Šio darbo metu nagrinėsime metamedžiagas, skirtas optinių elementų, dar žinomų kaip geometrinės fazės elementų, kūrimui. Geometrinės fazės elementai veikia dėl fazės poslinkio, atsirandančio ortogonalios poliarizacijos [2].

**1 pav.**  
*Geometrinės fazės  
elementas iš dvejopai  
laužiančių meta-atomų.  
Struktūra yra S-wave-  
plate elemento tipo.  
Aprašoma kaip  $\alpha = \varphi/2$ ,  
kur  $\alpha$  yra nanogardelės  
pasukimo kampas, o  
 $\varphi$  yra azimuto kampas  
elemente.*



Darbo metu randami optimalūs meta-atomų parametrai, kuomet meta-atomai pasižymi tiek chiralinėmis savybėmis, tiek dvejopalūžiškumu. Išlaikydami bangos ilgio ir struktūros matmenų santykį bei parinkę tinkamas medžiagas, tokius elementus galime pritaikyti plačiam bangos ilgių ruožui. Apsirašę pavienių meta-atomų sąveiką su krintančiu pluoštu per Jones matricas, galime sumodeliuoti kolektyvinį elemento - S-waveplate - atsaką. Vėliau naudojame Lumerical FDTD programinę įrangą atliekami S-waveplate modeliavimai tiek su 500 nm tiek su 300  $\mu\text{m}$  bangos ilgiais. Naudojant dvejopalūžiškumo savybes turinčius meta-atomus, modeliuojame S-waveplate radialinės poliarizacijos keitiklį (1 pav.).

Darbo metu pastebėta, kad vieno sluoksnio meta-atomų gauti radialinei ar azimutinei poliarizacijai nepakanka, todėl padidiname kolektyvinį fazinį vėlinimą naudodami kelis meta-atomų sluoksnius (2 pav.). Keičiant atstumus tarp sluoksnių buvo rastas optimalus atstumas, kuris pasirodė esąs lygus bangos ilgiui.



**2 pav.**

*Elektrinio lauko skirstiniai praėjus geometrinės fazės elementų sudarytą iš skirtingų kiekių sluoksnių dvejetainį laužiančių dalelių, išlaikant atstumą tarp sluoksnių  $\lambda$ . Baltos linijos atitinka elektrinio lauko vektorius kryptį. Struktūra yra S-waveplate elemento tipo.*

Šio darbo metu pastebėta, kad didinant sluoksnių skaičių, azimutinės ir radialinės poliarizacijos kokybė gerėja, tačiau bendras sistemos pralaidumas krenta. Vieno sluoksnio atveju pralaidumas 39 %, dviejų sluoksnių - 26 %, trijų sluoksnių - 18 % ir keturių sluoksnių - 12 %.

Darbo metu suformuluotos išvados:

- Iš trijų sub-banginio dydžio sferų yra įmanoma sukurti meta-atomą, kuris pasižymi arba dvejomu lūžiu arba chiralishkumu.
- Ištirtas radialinės poliarizacijos keitiklis (S-waveplate). Naudojant bent 2 geometrinės fazės elemento sluoksnius, sudarytus iš dvejetainių laužiančių sub-banginių dalelių, galime suformuoti azimutinės ir radialinės poliarizacijos pluoštus.
- Geriausios kokybės azimutinės ir radialinės poliarizacijos pluoštai gaunami, kai atstumas tarp geometrinės fazės elemento sluoksnių yra lygus bangos ilgiui.
- Didinant sluoksnių kiekį, praėjusio pluošto kokybė gerėja, tačiau bendras pralaidumas mažėja.

### Literatūra

[1] Meinzer, N., Barnes, W.L., *Nature Photonics*, 2014, 8(12), 889.  
 [2] Roux, F.S. *Journal of the Optical Society of America*, 2006, 23, 476-482.

**D. Litvinas<sup>1</sup>,  
S. Juršėnas<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Vilniaus universiteto  
Fizikos fakultetas*

<sup>2</sup> *Vilniaus universiteto  
Fizikos fakulteto Fotonikos  
ir nanotechnologijų institutas*

## SAVAIMINĖS SPINDULIUOTĖS STIPRINIMAS DVIMAČIŲ PEROVSKITŲ SLUOKSNIUOSE

Didelio ploto puslaidininkinių prietaisų sritis išgyvena pakilimą dėl perspektyvių, intensyviai jau apie dešimt metų tiriamų pusiau organinių metalų halidų perovskitų medžiagų (gardelė įprastai kubinė). Technologų dėmesį traukia perovskitų savybės: valdomas draustinis tarpas, išsidriekęs per visą optinę sritį; aukštas krūvininkų judris bei difuzijos nuotolis; menkas gaudyklių tankis; lengvai įdiegiama liejimo iš tirpalo gamybos technologija.

Nuo halidų jonų migracijos degraduojantį tūrinį perovskitą galima stabilizuoti įterpus atskiriančių organinių ligandų pradiniame perovskito tirpale, formuojant stabilią kelių elementariųjų narvelių storio dvimačių lakštų (2D) perovskito fazę. Stebima savotiška daugybinių kvantinių duobių (MQW) sandara, skatinanti eksitonų lokalizaciją storesniuose lakštuose iš plonesnių (didesnė rekombinacijos sparta).

Pastaruoju metu ypač susidomėta perovskitų sluoksnių taikymu puslaidininkinių lazerių technologijoms. Prieš kuriant lazerio spinduliuotės aktyvią terpę, svarbu iširti žadinamo 2D perovskito spinduliuotės stiprinimo ypatybes.

Studentas atliko išsamius 2D perovskitų sužadintų būsenų spektro ir spindulinių vyksmų tyrimus, orientuojantis į lazeriavimui medžiagų tinkamas savybes. Rezultatai panaudoti studento baigiamajame darbe bei ketinami viešinti publikacijoje.

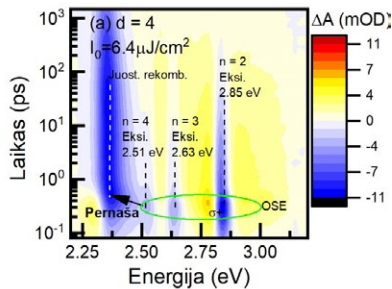
Tirti bandiniai, pagaminti liejimo iš tirpalo būdu, bendradarbiaujant su Japonijos Kiūšiū universiteto tyimų grupe, vadovaujama prof. Ch. Adachi. Galutinė sechiometrinė formulė –  $\text{PEA}_2\text{FA}_{n-1}\text{Pb}_n\text{Br}_{3n+1}$ . Gardelės konstanta  $a$  nusako vienetinio narvelio perovskito lakšte plotį, o gautų dvimačių nanosluoksnių perovskite storis atitinkamai ( $n \cdot a$ ).  $\text{FAPbBr}_3$  perovskito kubinės gardelės periodas pagal [1]  $a = 0.59944$  nm.  $\text{FAPbBr}_3$  monokristalų draustinis tarpas būna įvairus:  $E_g = 2.15$  eV [1], 2.23 eV [2], 2.25–2.33 eV [3]. Dėl erdvinio kvantavimo ( $n \cdot a$ ) mažinimas 2D perovskito nanosluoksnyje didina draustinį tarpą:

$$E_g(n) = E_g^{(bulk)} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2(\epsilon^{(n)})^2 \mu a^2 n^2}.$$

kur efektinė redukuota masė pagal [4]  $\mu = 0.13m_0$ , čia  $m_0$  – elektrono rimties masė. Sugerties kraštas bei liuminescencija slenka į aukštų energijų sritį. Bandiniai atskiriami pagal vidutinę  $n$  vertę – skaičių d. Nanosluoksniai įvardijami natūriniu skaičiumi n. Bandinių storiai, nustatyti profilometru: d=1 - 240.5 nm, d=2 - 153.4 nm, d=3 - 116.5nm, d=4 – 106.3 nm, 3D ( $\text{FAPbBr}_3$ ) - 86.9 nm.

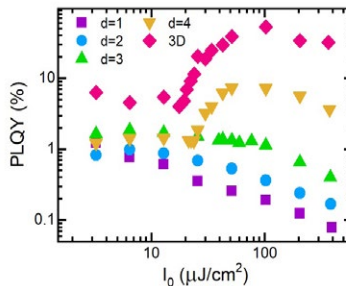
Dvimačiai  $\text{PEA}_2\text{FA}_{n-1}\text{Pb}_n\text{Br}_{3n+1}$  perovskitai pademonstravo šiuos kvantuotų būsenų ypatumus:

- Dėl kvantinės sąspraudos  $\text{PEA}_2\text{FA}_{n-1}\text{Pb}_n\text{Br}_{3n+1}$  perovskitų serijoje mažėjant nanosluoksnių storiui  $n$  šių draustinis tarpas auga nuo 3D vertės (2.378 eV) iki didelės sąspraudos nanosluoksnių  $n = 2$  (3.10 eV) bei  $n = 1$  (3.39 eV).
- Mažo matiškumo dvimačiai perovskitai demonstruoja stiprią eksitoninę sąveiką: iš difuzinio atspindžio spektro nustatytos eksitono ryšio energijos nanosluoksniams  $n = 1$  bei  $n = 2$  atitinkamai 0.27 eV bei 0.24 eV yra Frenkel'io pobūdžio. Dėl šios ypatybės atitinkamų  $d = 1$  bei  $d = 2$  bandinių fotoluminescencija dominuojama lėtos eksitoninės rekombinacijos, kurios našumą (PLQY  $\sim 1\%$ ) mažina stipri eksitonų lokalizacija, nespindulinė rekombinacija ir reabsorbicija.
- Iš skurtuminės sugerties matavimų (pvz. bandiniui  $d = 4$  1 pav.) nustatyta, kad didesnio matiškumo sluoksniuose ( $d = 4$  ir 3D) vyksta energijos pernaša (trukmė 1-2 ps, priklausomai nuo žadinimo intensyvumo) į storus nanosluoksnius ( $n \geq 5$ ), kur maža eksitonų ryšio energija ( $\sim 50$  meV) leidžia įvykti Mott'o virsmui [5]. Susiformavusi elektronų-skylių plazma tarpjuostinės rekombinacijos metu kuria plačią intensyvią luminescencijos juostą su maksimumais ties 2.31 eV bei 2.29 eV atitinkamai. Spindulinės rekombinacijos spartos  $B_{rad}^{(d=4)} = (1.1-1.3) \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1} \cdot \text{cm}^3$ .



**1 pav.** Skurtuminės sugerties spektras  $d = 4$  bandiniui, gautas žadinant sluoksnių 350 nm bangos ilgio  $6.4 \mu\text{J}/\text{cm}^2$  intensyvumo lazerio spinduliu.

- Užpildžius laidumo juostas krūvininkais, didesnio matiškumo perovskitų PL ima stiprinti sustiprintos savaiminės spinduliuotės (ASE) linija. Žadinimo intensyvumo slenksčiai mažėja augant viduriniam perovskito nanosluoksnių storiui: bandiniams  $d = 4$  ir 3D atitinkamai  $24.4$  ir  $18.6 \mu\text{J}/\text{cm}^2$ . Maksimalūs fotoluminescencijos kvantiniai našumai ties  $100 \mu\text{J}/\text{cm}^2$  yra 7.2% bei 53% (žr. 2 pav.).



**2 pav.** Ekstrapoliuota bandinių fotoluminescencijos kvantinio našumo priklausomybė pagal liuksintensyvinę PL charakteristiką bei PLQY vertes ties mažu sužadinimu. Žadinimui abiem atvejais naudotas 350 nm bangos ilgis.



- PL našumą dideliuose žadinimo tankiuose sumažina Auger rekombinacija ( $C_0 \sim 3 \cdot 10^{-27} \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^6$ ), sužadavimo pernaša bei juostų nuskurdinimas.
- 3D perovskitas aukštų sužadavimo intensyvumų režime degraduoja sparčiau, nei dvimatis perovskitas  $d = 4$ , kaip nustatyta iš pakartotinio sužadavimo lazerio impulsais ties  $I_0 = 2I_{thres}$ .

Darbo rezultatų perša išvadą, jog tinkamiausi lazeriavimui perovskitai pasižymi mažu erdvinio kvantavimu, bet mažą medžiagos masės dalį vis vien užimtų organiniai atskirikliai, ribojantys degradavimą ir skatinantys energijos pernašą.

---

### Literatūra

- [1] A. A. Zhumekenov *et al.*, "Formamidinium Lead Halide Perovskite Crystals with Unprecedented Long Carrier Dynamics and Diffusion Length," *ACS Energy Lett.*, vol. 1, no. 1, pp. 32–37, Jul. 2016, doi: 10.1021/acsenergylett.6b00002.
- [2] Sun, Shijing, "Synthesis, characterization and properties of hybrid organic-inorganic perovskites for photovoltaic applications," University of Cambridge, 2017.
- [3] G. Mannino *et al.*, "Temperature-Dependent Optical Band Gap in CsPbBr<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub>, and FAPbBr<sub>3</sub> Single Crystals," *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 11, no. 7, pp. 2490–2496, Apr. 2020, doi: 10.1021/acs.jpcclett.0c00295.
- [4] K. Galkowski *et al.*, "Determination of the exciton binding energy and effective masses for methylammonium and formamidinium lead tri-halide perovskite semiconductors," *Energy Environ. Sci.*, vol. 9, no. 3, pp. 962–970, Mar. 2016, doi: 10.1039/C5EE03435C.
- [5] N. F. Mott, "Metal-Insulator Transition," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 40, no. 4, pp. 677–683, Oct. 1968, doi: 10.1103/RevModPhys.40.677.

**G. Mickūnaitė,  
J. Čeponkus**

*Vilniaus universitetas, Fizikos  
fakultetas, Cheminės fizikos  
institutas, Saulėtekio alėja 3,  
LT-10257 Vilnius*

## **PATOGENINIŲ GRYBELIŲ IDENTIFIKAVIMAS IR JŲ GYVYBĖS CIKLO TYRIMAS VIRPESINĖS SPEKTROMETRIJOS METODAIS**

Ivairūs patogeniniai mikroorganizmai tokie kaip bakterijos ar grybelis sukelia įvairias infekcines ligas, todėl šiuo metu yra svarbu surasti diagnostikos metodą, kuris leistų ankstyvoje infekcijos ar susirgimo stadijoje nustatyti mikroorganizmo rūšį, bei skirti pacientui efektyvų gydymą [1-3].

Projektu metu tirti bakterijų ir grybelių bandiniai. Iš viso gauti 56 bandiniai (9 skirtingų rūšių bakterijos ir 5 skirtingų rūšių grybeliai). Bandinių pavyzdžiai pateikiami 1 pav.

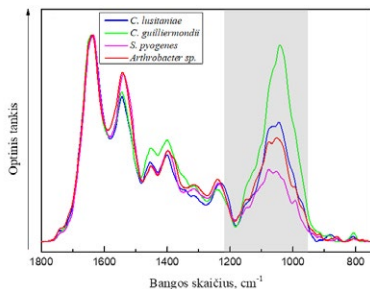


**1 pav.**  
*Bandinių, esančių Petri  
lėkštelėse, pavyzdžiai*

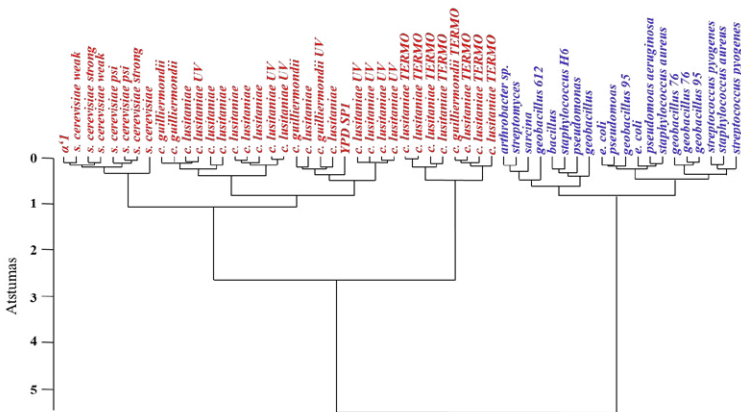
Užregistravus bakterijų ir grybelių spektrus Ramano sklaidos ir infraraudonosios (angl. *infrared* - IR) sugerties spektroskopiniais metodais, nustatyta, kad IR sugerties spektroskopinis metodas yra tinkamesnis patogeninių mikroorganizmų spektrų registravimui. Pagrindinis Ramano sklaidos spektroskopinio metodo trūkumas yra signalo ir triukšmo santykis, taip pat taikant šį metodą spektrai registruojami ilgiau bei sunku užtikrinti tokias pačias eksperimento registravimo sąlygas (lazerio intensyvumą, fokusavimą).

Nustačius, kad IR sugerties spektroskopinis metodas yra tinkamesnis patogeninių grybelių ir bakterijų tyrimams, jis naudotas tolimesnėje tyrimo eigoje. Užregistravus bakterijų ir grybelių IR sugerties spektrus nustatyti spektriniai požymiai, kurie leidžia identifikuoti mikroorganizmo rūšį. Pagrindiniai spektriniai skirtumai stebimi 1183-930  $\text{cm}^{-1}$  spektriniame intervale (2 pav.). Siekiant įvertinti kaip tiksliai galima identifikuoti bakterijas ir grybelius, spektrams atlikta hierarchinė klasterių analizė naudojant programą „OPUS“ (3 pav.). Atlikus hierarchinę klasterių analizę nustatyta, kad bakterijos ir grybeliai gali būti išskirti į atskiras grupes 100 % tikslumu.

**2 pav.**  
Skirtingų patogeninių grybelių ir bakterijų rūšių IR sugerties spektrai

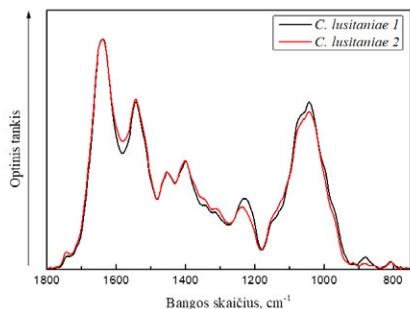


**3 pav.**  
Patogeninių grybelių ir bakterijų IR sugerties spektrų hierarchinė klasterių analizė (grybeliai pažymėti raudona, bakterijos – mėlyna spalvomis)

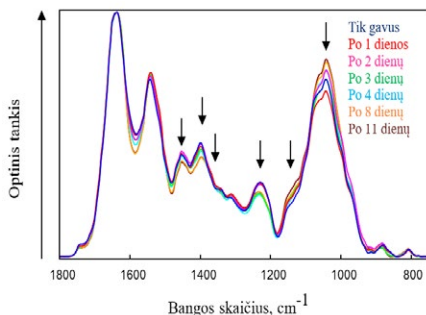


Projekto metu iš mikrobiologų gauti identiškai užauginti patogeniniai grybeliai. Palyginus IR sugerties spektrus pastebėta, kad grybelių spektrai, nepriklausomai nuo to kada gauti bandiniai, atsikartoja. 4 pav. yra pateikiami *C. lusitaniae* grybelių, gautų skirtingu metu, IR sugerties spektrai.

**4 pav.**  
*C. lusitaniae* grybelių, gautų skirtingu metu, IR sugerties spektrai.

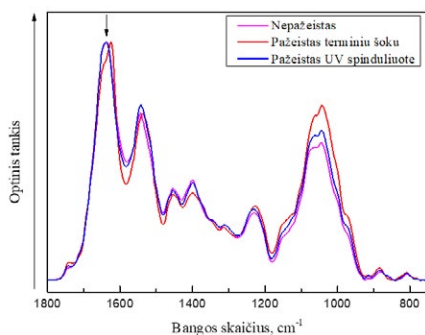


Keli pasirinkti patogeniniai grybeliai registruoti skirtingais laiko tarpais nuo jų užauginimo pradžios. Pastabėta, kad IR sugerties spektruose, kurie registruoti vėlesnėmis dienomis, yra stebimas spektrinių juostų, esančių ties 1045  $\text{cm}^{-1}$  (glikogenas), 1151  $\text{cm}^{-1}$  (angliavandeniai) intensyvumo padidėjimas, spektrinių juostų, esančių ties 1238  $\text{cm}^{-1}$  (fosfatas), 1400  $\text{cm}^{-1}$  (riebiosios ir amino rūgštys), 1454  $\text{cm}^{-1}$  (baltymai) intensyvumo sumažėjimas ir spektrinės juostos, esančios 1370  $\text{cm}^{-1}$  (guaninas arba citozinas) atsiradimas (5 pav.).



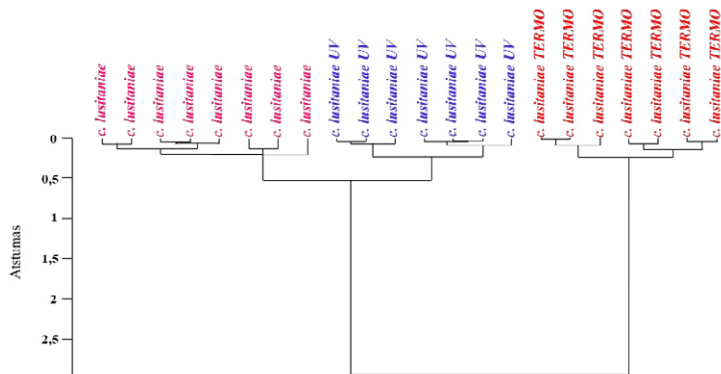
**5 pav.**  
Skirtingomis dienomis registruoto patogeninio *C. lusitaniae* grybelio IR sugerties spektrai

Siekiant nustatyti ar galima IR sugerties spektroskopiniu metodu nustatyti patogeninio grybelio žūties mechanizmą, projekto metu registruoti nepažeistų, termišškai ir UV spinduliuote pažeistų *C. lusitaniae* grybelių IR sugerties spektrai (6 pav.). Atlikus analizę pastebėta, kad termišškai pažeistų *C. lusitaniae* grybelių spektruose, spektrinė juosta, esanti ties 1638  $\text{cm}^{-1}$ , yra pasislinkusi į mažesnių bangos skaičių sritį. Plika akimi nebuvo stebimi spektriniai skirtumai tarp nepažeistų ir termišškai pažeistų *C. lusitaniae* grybelių IR sugerties spektrų, todėl siekiant išsiaiškinti, kaip tiksliai gali būti identifikuoti pažeistų grybelių IR sugerties spektrai, atlikta hierarchinė klasterių analizė (7 pav.). Atlikus hierarchinę klasterių analizę nustatyta, kad nepažeistų ir pažeistų UV spinduliuote ir terminiu šoku patogeninių grybelių IR sugerties spektrai gali būti išskirti į atskiras grupes 100 % tikslumu.



**6 pav.**  
Nepažeisto ir pažeistų skirtingais mechanizmais *C. lusitaniae* patogeninių grybelių IR sugerties spektrai

**7 pav.**  
 Nepažeistų ir pa-  
 žėistų skirtingais  
 mechanizmais *C.*  
*lusitaniae* pato-  
 geninių grybelių  
 IR sugerties  
 spektrų hierar-  
 chinė klasterių  
 analizė



### Literatūra

- [1] Harz, M., Rösch, P., Popp, J. *Vibrational Spectroscopy – A Powerful Tool for the Rapid Identification of Microbial Cells at the Single Cell Level*, 2009, 75A, 104-113
- [2] Spampinato, C., Leonardi, D. *Candida infections, causes, targets, and resistance mechanisms: traditional and alternative antifungal agents*, BioMed Research International, 2013, 2013, 1-13
- [3] Almand, E. A., Moore, M. D., Jaykus, L. A. *Virus-Bacteria Interactions: An Emerging Topic in Human Infection*, Viruses, 2013, 9, 1-10

P. Račkauskas,  
G. Juzeliūnas

*Vilniaus universitetas*

## OPTINĖS GARDELĖS PANAUDOJANT ŠUOLIUS TARP ŠALTŲJŲ ATOMŲ VIDINIŲ BŪSENŲ

Bozės ir Einšteino kondensatai bei išsigimusios Fermi dujos, yra ypatingos medžiagos fazės gaunamos atšaldžius iki nanokelvino eilės temperatūrų atomų dujas. Šiose mezoskopiniuose dariniuose stebimi kvantiniai reiškiniai būdingi subatomiinių dydžių dalelėms, tad pastaruoju metu šaltieji atomai sulaukė didelio mokslinės bendruomenės susidomėjimo. Itin šaltų atomų dujos yra unikali sistema, įgalinanti emuliuoti daugiadalelinius [1,2] ir topologinius [3–6] efektus kondensuotose medžiagose bei elementariųjų dalelių fizikoje. Pavyzdžiui, interferuojant keliems šviesos pluoštams, šaltiesiems atomams yra sukūriamos optinės gardelės, kurios yra plačiai taikomos simuliuojant įvairius kondensuotų medžiagų daugiadalelinius efektus, pavyzdžiui bosonų perėjimą iš supertakios į Moto izoliatoriaus fazę [1,2]. Todėl, labai svarbi šaltų atomų fizikos dalis yra naujų metodų kvantinių sistemų koherentinei kontrolei paieška ir tyrimas. Šiame darbe buvo išplėstas išplėstas šaltų atomų fizikos teoretinių įrankių rinkinys tiriant tiriant naujoviškų optinių gardelių, kurios pasižymi itin smulkia struktūra, formavimą itin šaltų atomų dujose.

Paprastai optiniai potencialai yra suformuojami naudojant dipolines gaudykles ir pasitelkiant šviesos pluoštų Furje skleidinį. Taip kuriamų potencialų erdvinė skyra yra apribota šviesos difrakcinės ribos, todėl ilgą laiką galimybės, sukurti itin smulkiomis struktūromis pasižyminčius potencialus, buvo ribotos. Neseniai buvo pasiūlytas būdas sukurti optinius barjerus, kurie yra siauresni už formuojančios šviesos bangos ilgį naudojant  $\Lambda$ -schemą (lambda schemą), kai dvi žemiausios energijos atomo būsenos optiškai sukabinamos su viena sužadinta būsena [7–9]. Naudojant šį metodą, siauri optiniai barjerai yra atomo stipraus netiesinio atsako į šviesos pluošto veikimą rezultatas.  $\Lambda$ -schemoje formuojama ypatinga būsena vadinama tamsia, iš jos yra draudžiami šuoliai į sužadintą lygmenį.

Atomui esant sužadintoje būsenoje, vyksta savaiminis spinduliavimas, kuris šildo sistemą ir yra nepageidaujamas. Todėl atomus stengiamasi išlaikyti tamsiose būsenoje.  $\Lambda$ -schema pasižymi tik viena tamsia būsena. Tad, formuojamų potencialų veikimo galimybės yra ribotos. Tripodo schema, kai trys žemiausi atomo lygmenys yra optiškai sukabinti su vienu sužadintu lygmeniu, pasižymi dvejomis tamsiomis būsenomis [10]. Papildomas laisvės laipsnis leidžia formuoti potencialus, kurie gali būti neabeliniai (t.y. turintys komponentes, kurios tarpusavyje nekomutuoja). Todėl gali pasireikšti sukiniio ir orbitos sąveika, o optinių gardelių kontekste yra galimos sudėtingos subgardelinės struktūros [3,10,11]. Galimybė formuoti itin siaurus barjerus bei kontroliuoti jų aukštį

ir plotį leidžia pasiekti šuolių amplitudžių tarp gardelės mazgų vertes, kurios prieš tai buvo nepasiekiamos. Galimybė formuoti neabelinius potencialus leidžia tirti ir geriau suprasti įvairius kvantinius efektus, susijusius su sukiniiais, pavyzdžiui, sukcinį Holo efektą. Taigi, šio darbo rezultatai gali turėti svarbią reikšmę įvairiose fizikos mokslo srityse.

Šiame darbe atlikta tripodo schemos analizė ir išnagrinėta galimybė sukurti optines gardeles su itin siauriais barjeriais. Pasitelkiant analizinius bei skaitmeninius metodus, ištirta šių gardelių juostinė sandara. Atliktas darbas yra svarbus Lietuvos bei pasaulio fizikos kontekste, nes jis padeda geriau suprasti panašius reiškinius kondensuotose medžiagose bei šaltųjų atomų valdymą šviesos pluoštais. Atsižvelgiant į tai, jog panašūs eksperimentai naudojant  $\Lambda$ -schemą buvo neseniai įgyvendinti ir susilaukė didelio mokslinės bendruomenės dėmesio [7–9,12] yra tikimasi, jog šis darbas stimuluos ateities eksperimentus.

Mokslinis tyrimas bendrai finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0238) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

---

### Literatūra

- [1] Lewenstein M., Sanpera A., Ahufinger V. *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-Body Systems*. Oxford University Press, Oxford. 2012.
- [2] Bloch I., Dalibard J., Zwerger W. *Rev. Mod. Phys.*, 2008, 80, 885-964.
- [3] Dalibard J., Gerbier F., Juzeliūnas G., Ohberg P. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83, 1523-1543.
- [4] Galitski V., Spielman I. *Nature*, 2013, 494, 49-54.
- [5] Goldman N., Budich J., Zoller P. *Nature Physics*, 2016, 12, 639-645.
- [6] Galitski V., Juzeliūnas G., Spielman I. *Physics Today*, 2019, 72, 38-44.
- [7] Jendrzejewski F., Eckel S., Tiecke T., Juzeliūnas G., Campbell G., Jiang L. Gorshkov A. *Phys. Rev. A*, 2016, 94, 063422.
- [8] Laski M., Baranov M., Pichler H., Zoller P. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117, 233001.
- [9] Wang Y., Subhankar S., Bienias P., Laski M., Tsui T-C., Baranov M., Gorshkov A., Zoller P., Porto J., Rolston S. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 120, 083601.
- [10] Ruseckas J., Juzeliūnas G., Ohberg P., Fleischhauer M. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95, 010404.
- [11] Tagliacozzo L., Celi A., Orland P., Mitchell M., Lewenstein M. *Nature Communications*, 2013, 4, 2615.
- [12] Tsui T-C., Wang Y., Subhankar S., Porto J., Rolston S., *Phys. Rev. A*, 2020, 101, 041603.

**R. Šalaševičius<sup>1</sup>, S. Balčiūnas<sup>1</sup>,  
J. Banaš<sup>1</sup>, S. Wada<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas,  
Saulėtekio 9, Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup> Interdisciplinary Graduate School of Medicine  
and Engineering, Yamanashi universitetas,  
Kofu, Yamanashi 400-8510, Japonija

## **NANOKOMPOZITINIŲ BT KERAMIKŲ PLAČIAJUOSTĖ DIELEKTRINĖ SPEKTROSKOPIJA**

[1] Šiais laikais dėl susirūpinimo aplinkosauga vis aktualesnė tampa ekologiškų ir praktiškai panaudojamų medžiagų paieška. Viena iš stipriai besivystančių mokslo sričių – geromis savybėmis pasižyminčių ekologiškų pjezoelektrikų gamyba. Dauguma pramonėje naudojamų ir prieinamų pjezoelektrikų savyje turi švino. Šio tyrimo tikslas – tobulinti bešvinių nanokompozitinių keramikų savybes plačiame temperatūrų ir dažnių veikimo diapazone.

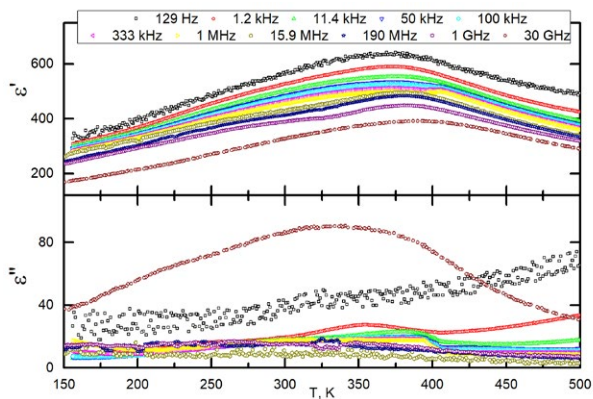
Nanokompozitiniai kietieji tirpalai tampa vis populiariesne alternatyva klasikiniam pjezoelektrikam. Šiuo atveju tiriama 0,9BT – 0,1BMT/BT „core-shell“ tipo perovskitas. Tai yra dviejų sudedamųjų dalių medžiaga, turinti centre nanometrinių BT-BMT kristalų, kurie yra padengti bario titanatu.

Centre esantis kietas tirpalas (BMT ir BT) buvo maišomas su titano oksidu ir didelio slėgio kompresoriumi spaudžiamos į cilindro formos granules [2], [3]. Tuomet disko formos granulės buvo maišomos su bario hidroksido tirpalu 175 °C temperatūroje „solvothermal solidification“ metodu [4], [5]. Galų gale gaunama „core-shell“ struktūra, viduje turinti BMT kristalų, kurie yra padengti bario titanatu (BT) apvalkalu „solvothermal“ reakcijos dėka.

Šiame tyrime bus pristatyta 0,9BT – 0,1BMT/BT „core-shell“ kieto tirpalo dielektrinės savybės. Pirmame paveiksle yra matoma dielektrinės skvarbos realios dalies kilimas tarp 150K ir 370K. Pasiekus 370K dielektrinės skvarbos reali dalis pasiekia maksimalią vertę, o toliau kylant temperatūrai dielektrinės skvarbos reali dalis mažėja. Šis pokytis gali būti siejamas su faziniu virsmu.



**1 pav.**  
 Temperatūros  
 priklausomybė  
 nuo realios  
 (pažymėta  $\epsilon'$ )  
 ir menamos  
 (pažymėta  $\epsilon''$ )  
 dielektrinės  
 skvarbos dalių  
 0,9BT-0,1BMT  
 "core-shell" tipo  
 perovskitui.



### Literatūra

- [1] E. U. Council, "Directive 2002/95/EC of the European parliament and of the council." eur-lex.europa.eu, 2003.
- [2] C. Chen, J. Cheng, S. Yu, L. Che, and Z. Meng, "Hydrothermal synthesis of perovskite bismuth ferrite crystallites," J. Cryst. Growth, vol. 291, no. 1, pp. 135–139, 2006.
- [3] Y. Wang et al., "Mineralizer-Assisted Hydrothermal Synthesis and Characterization of BiFeO<sub>3</sub> Nanoparticles," J. Am. Ceram. Soc., vol. 90, no. 8, pp. 2615–2617, 2007. [4] Y. Hirose, S. Ueno, K. Nakashima, and S. Wada, "Fabrication of BaTiO<sub>3</sub>/BiFeO<sub>3</sub>
- [4] Nano-complex Ceramics by Hydrothermal Method," Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., vol. 39, no. 2, pp. 105–108, 2014.
- [5] Y. Hirose, S. Ueno, K. Nakashima, and S. Wada, "Preparation of BaTiO<sub>3</sub> Nanostructured Ceramics by Solvothermal Solidification Method," Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., vol. 40, no. 3, pp. 239–242, 2015.

**M. Tartėnas<sup>1,2</sup>,  
K. Zubovas<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Vilniaus universitetas,  
Fizikos fakultetas*

<sup>2</sup>*Fizinių ir technologijos mokslų centras,  
Fundamentinių tyrimų skyrius*

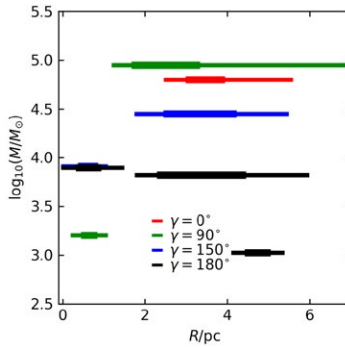
## PAUKŠČIŲ TAKO GALAKTIKOS AKTYVUMO EPIZODO IR JO POVEIKIO MODELIAVIMAS

Paukščių Tako centre esanti juodoji skylė (SMBH) šiuo metu nėra aktyvi, tačiau praеityje greičiausiai būta aktyvumo epizodų [1]. Vienas jų galbūt vyko prieš maždaug 6 milijonus metų ir galėtų būti vienas iš pagrindinių procesų padėjusių formuoti *Fermi* burbulus – milžiniškas struktūras, išskylančias iš Galaktikos centro (GC), statmenai jos diskui, apie 10 kpc [2, 3]. GC taip pat stebimos apie 6 milijonų metų amžiaus žvaigždės, galbūt susiformavusios šio aktyvumo epizodo metu [4].

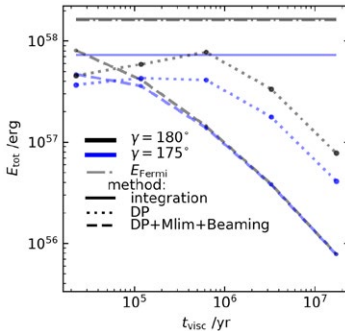
Tam, kad būtų palaikomas aktyvumo epizodas, SMBH turi būti maitinama dideliu kiekiu dujų. Maitinimą galėtų palaikyti susidūrimas tarp SMBH supančio dujų žiedo (CNR) ir įkrentančio molekulinio debesies (MC). CNR šiuo metu stebimas GC nutolęs apie 2 pc nuo juodosios skylės [5]. Priešingai žiedo sukimuisi įkrintęs debesis galėtų panaikinti CNR dujų judesio kiekio momentą, taip perkeldamas dujas arti SMBH, kur būtų formuojamas akrecinis diskas. Taip pat, po susidūrimo, sistemos centrinėje dalyje galėtų formotis žiedinės/diskinės struktūros, kuriose galėtų vykti žvaigždėdara.

Šiame darbe atkuriamas Galaktikos aktyvumo epizodas, sekantis CNR ir MC susidūrimą. Naudojamas Gadget-3 3D hidrodinaminis kodas [6]. Tiriama susidūrimo padariniai priklausomai nuo debesies kritimo kampo ( $\gamma$ ): susidariusios sistemos morfologija; centrinės BH maitinimo sparta; žvaigždžių formavimasis; aktyvumo periodo metu išlaisvinta energija.

Atlikus tyrimą nustatyta, kad MC susidūrimas su CNR galėjo sukelti aktyvumo epizodą ir rezultatai reikšmingai priklauso nuo pradinio kritimo kampo. Didesni pradiniai kritimo kampai lemia labiau kompaktiškas sistemas, kuriose reikšminga sistemos masės dalis sutelkta centrinėse struktūrose. Taip pat, didžiausi pradiniai kritimo kampai pamaitina SMBH iki pusės pradinės sistemos dujų masės; tiek medžiagos pakanka *Fermi* burbulams išpūsti, tačiau per staigiai maitinama SMBH nespėja praryti visos sukritusios medžiagos; akrecinio disko į sistemą gražinamos dujos galbūt galėtų prailginti aktyvumo epizodo trukmę. Maži kampai lemia žvaigždžių formavimąsi išoriniuose žieduose, dideli kampai - spartesnę žvaigždėdarą centriniuose diskuose; sparčiausia fragmentacija vyksta po susidūrimų su  $150^\circ \leq \gamma < 170^\circ$ ; vidutinė fragmentacijos sparta šiuose modeliuose  $\sim 0.28 M_\odot \text{ yr}^{-1}$ .



**1 pav.**  
*Keliose modelio realizacijose atrinktų struktūrų parametrai - masė ir radialinis išplitimas. Pastorinta linija žymi vidutinį atstumą nuo centro  $\pm \sigma$ .*



**2 pav.**  
*Modelio realizacijose su 175° ir 180° pradiniais kritimo kampais gautos viso aktyvumo epizodo metu išlaisvintos energijos įvertis. Vertinimas atliktas naudojant kelis metodus: ištisinė linija žymi paprasčiausią įvertį pagal prisijungtos medžiagos kiekį; punktyrinė - akrecinio disko dalelės modelio rezultatus; brūkšninė - akrecinio disko dalelės įvertinūs akrecinio disko stabilumą ir spinduliuotės kolimaciją.*

## Literatūra

- [1] Ponti, G. et al. Proceedings of the Second Session of the Sant Cugat Forum on Astrophysics, 2013, 34, 331-369
- [2] Su, M. et al. The Astrophysical Journal, 2010, 724, 1044-1082
- [3] Zubovas, K., Nayakshin, S. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 2012, 424, 666-683
- [4] Genzel, R. et al. Reviews of Modern Physics, 2010, 82, 3121-3195
- [5] Ferriere, K. Astronomy and Astrophysics, 2012, 540, A50
- [6] Springel, V. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 2005, 364, 1105-1134

K. Viršilaitė,  
D. Pupienis

Vilniaus universitetas,  
Geomokslų institutas

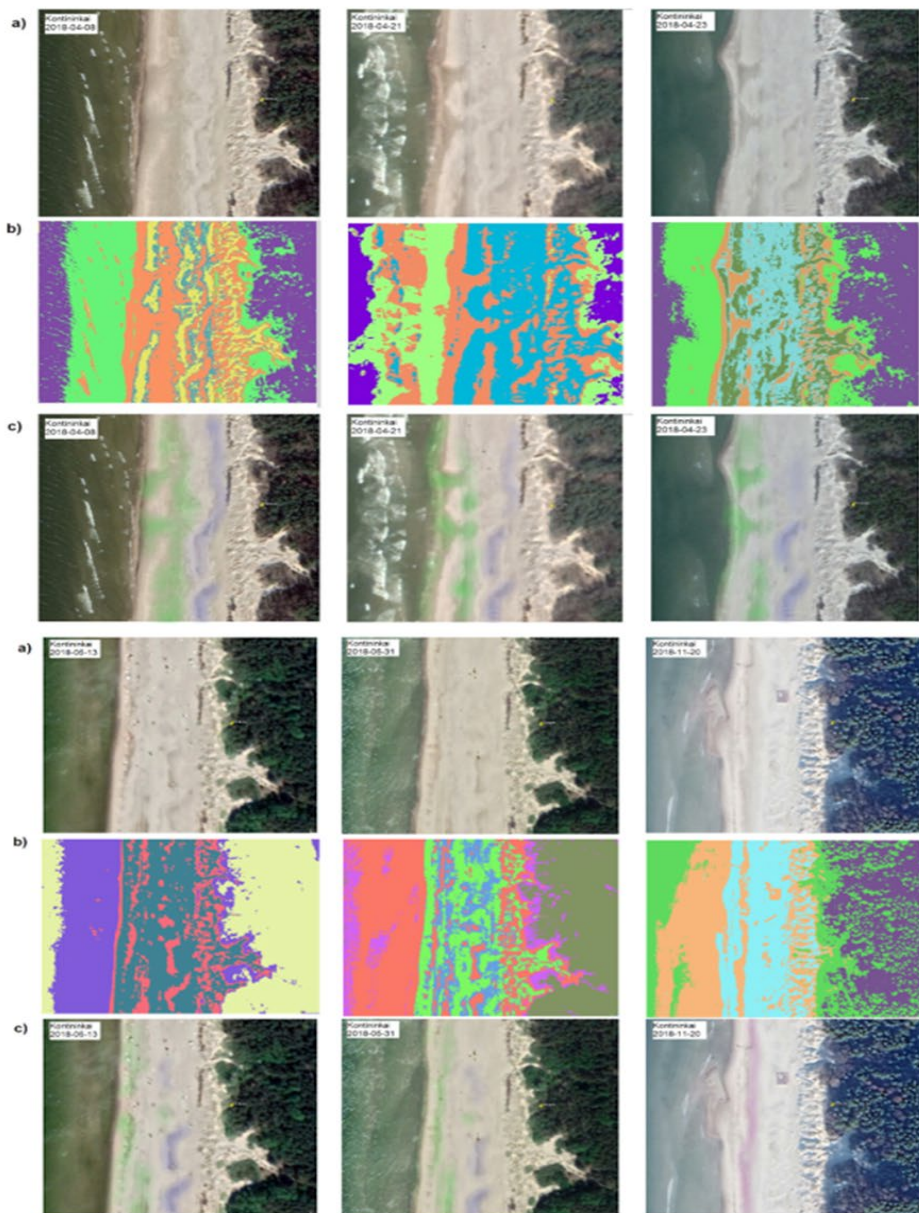
## PLŪSMO SRAUTO RIBŲ NUSTATYMAS JŪROS KRANTE REMIANTIS *IN SITU* IR NUOTOLINIAIS MATAVIMO METODAIS

Jūros smėlėtuose krantuose vyksta įvairūs hidro-litodinaminiai procesai, kurie keičia krantą. Vienas iš svarbiausių hidrodinaminių procesų yra plūsmo srautas, kuris sugožus bangai ties kranto linija periodiškai užplūsta paplūdimį ir atslūgsta. Paprastai krantotyriminkai analizuoja plūsmo srauto fizinius rodiklius (periodą, pasikartojimą, stiprumą ir t.t.), tačiau iki šiol mažai dėmesio yra skiriama plūsmo srauto pirmine ribų (siūlės) tyrimams. Paplūdimyje pirmine srauto išplitimo kontūro ribą žymi plūsmo siūlė, kuri gali išsiskirti pagal sunkiųjų mineralų, fitodetrito samplava ar drėgno smėlio išplitimo riba [1, 2, 3]. Tyrimo tikslas – nustatyti plūsmo srauto ribas jūros krante remiantis *in situ* ir nuotoliniais matavimo metodais.

Siekiant nustatyti plūsmo srauto ribas tyrimų metu Baltijos jūros kranto skersiniuose profiliuose buvo matuojamas magnetinis imlumas naudojant Bartington MS3 sistemą su MS2K skenavimo jutikliu, taikant GIS buvo analizuojami nuotoliniais metodais gauti „Google earth“, bepiločių orlaivių (dronų), išmaniojo telefono fotoaparatu padaryti vaizdai. Parengti verifikuoti nauji plūsmo srauto ribos nustatymo metodai bei įvertinta plūsmo srauto ribos kaita laike ir erdvėje.

Dėl reikalingos aukštos skiriamosios gebos nuotolinių metodų išteklių gana riboti – rastrinei analizei reikalingi palydoviniai duomenys turi būti itin aukštos spektrinės gebos – mažesnės negu 1 metro. Tokias sąlygas tenkina tik privatūs komerciniai palydovai. Tyrimui naudoti aukštos rezoliucijos rastrinių palydovinių vaizdų pavyzdžiai surinkti iš „Google Earth“ programinės įrangos, visi vaizdai padaryti Maxar Technologies kompanijos palydovais. Tyrime taikyti bepiločių orlaivių (dronų) vaizdai atlikti 2019 m. kovo 29 dieną Kuršių nerijoje. Telefono vaizdo kameros apjungta fotografijų seka atspindintį paplūdimio profilį atlikta 2020 m. kovo 5 d. Būtingėje.

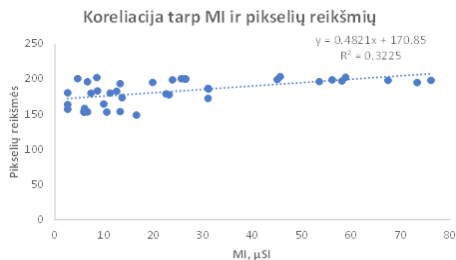
Rastrinė analizė taikant ArcMap Reclassify įrankį padėjo išryškinti plūsmo srauto zoną, kuri dažnai gali būti stebima ir vizualiai. Plūsmo srauto ribos kaitos laike ir erdvėje analizė parodė, jog žiemos audrų suformuotos struktūros gali išlikti iki pat vasaros sezono, o mažesnių patvankų metu plūsmo srautas užlieja tas pačias teritorijas dėl reljefo įtakos. Plūsmo srauto ribos išlieka matomos iki kitų vėjo ir bangų sąlygotų patvankų (ramybės laikotarpis gali trukti kelis mėnesius) arba užpustomos vėjo (1 pav.).



**1 pav.**

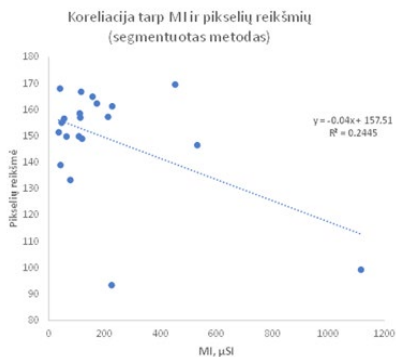
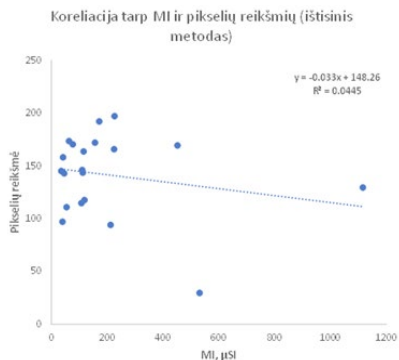
*Paplūdimio struktūrų (plūsmo srauto ribų bei sąnašynų) kaita 7 mėnesių laikotarpiu. a) – palydovinis paplūdimio vaizdas, b) rastrinė analizė taikant Reclassify įrankį, c) taikant rastrinės analizės rezultatus, paplūdimio zonos suskirstomos: mėlyna - žiemos audrų metu sukeltų patvankų ribas, žalia - cikliškai kelių mėnesių bėgyje užliejamų paplūdimio dalių ribas, rožinė - bei dėl sezono kaitos pasikeitusių hidrodinaminųjų sąlygų suformuotas naujas patvankos ribas žyminčias struktūras*

*In situ* matavimų bei bepiločio orlaivio pikselių reikšmių verifikacijai Smiltynės profilyje taikyta rastrinė analizė pasitelkiant ImageJ programinę įrangą. Nei MI, nei pikselių reikšmės nesutapo su fotografijoje matoma plūsmo srauto siūle, kuri fiksuojama maždaug 20 m. atstumu nuo kranto, tačiau apskaičiuoti silpni koreliaciniai ryšiai tarp pikselių reikšmių ir MI matavimo duomenų ( $r=0,57$ ) (2 pav.). To priežastis – galimai didelis laiko tarpas tarp *in situ* matavimų ir palydovinės fotografijos atlikimo.



**2 pav.**

Silpni koreliaciniai ryšiai tarp ryšių tarp pikselių reikšmių ir MI matavimo duomenų apjungus šlapio ir sauso duomenų eilutes ( $r=0,57$ )



**3 pav.**

Koreliacinių ryšių analizė tarp *in situ* matavimų metu gautų MI reikšmių bei dvejais būdais matavimo vietose apskaičiuotų pikselių reikšmių – išstinio (kairėje,  $r=0,21$ ) ir segmentuoto (dešinėje,  $r=0,49$ ).

Magnetinio imlumo bei telefono fotoaparatu fiksuoto Būtingės profilio verifikacija pasiteisino sąlyginai. Iš naudotų dviejų pikselių reikšmių apskaičiavimo metodų, pastebėta, jog segmentuotu metodu apskaičiuotos reikšmės geriau koreliuoja su MI reikšmėmis ( $r=0,49$ ) negu išstinio metodu ( $r=0,21$ ) (3 pav.).

### Literatūra

- [1] Linčius A. *Geografijos metraštis*, 1991, 27, 122-127.
- [2] Jagodziński, R., Sternal, B., Szczuciński, W., & Lorenc, S. *Polish Journal of Environmental Studies*, 2009, 18(1), 103–110.
- [3] Pupienis D., Buynevich I. V., Bitinas A. *Journal of Coastal Research*, 2011, 64, 1984–1988.

**I. Gaidė<sup>1</sup>,  
V. Makarevičienė<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Kauno technologijos universitetas  
<sup>2</sup> Vytauto Didžiojo universitetas  
Žemės ūkio akademija

## **DOLOMITO PANAUDOJIMAS BIODYZELINO SINTEZĖJE**

### **Ivadas**

Biologinės kilmės alternatyvus kuras, pvz. etanolis, biodyzelinas, yra intensyviai tyrinėjami pastaruosius dešimtmečius. Didelis iškastinio kuro vartojimas, jo poveikis globaliniam atšilimui ir susirūpinimas dėl energijos išteklių mažėjimo, yra pagrindiniai aspektai, kurie skatina susidomėjimą biodegalais. Aliejaus peresterinimas yra vienas iš biodyzelino gamybos būdų. Aliejaus peresterinimo procesas gali būti heterogeninis, kai katalizatorius lieka kitoje fazėje nei reakcijos produktas, homogeninis, kai katalizatorius lieka toje pačioje fazėje, ir fermentinis (fermentai gali būti naudojami tiek skysti, tiek ir kieti) [1].

Heterogeninė katalizė lyginant su homogenine yra laikoma draugiškesne aplinkai, nes kietas katalizatorius yra nesunkiai atskiriamas nuo reakcijos mišinio filtruojant ir gali būti naudojamas pakartotinai [2]. Heterogeninės katalizės metu, reagentai yra adsorbuojami ant katalizatoriaus paviršiaus, ten įvyksta peresterinimo reakcija ir produktas yra desorbuojamas [3].

Daugiausiai dolomitas sudarytas iš kalcio ir magnio karbonatų, taip pat jame yra nedideli kiekiai geležies, aliuminio, silicio ir kt. Pagal Sasaki [4], didžiausią dolomito kiekį sudaro Ca (267 mg/g) ir Mg (103 mg/g). Dėl savo sudėtyje esančių  $Ca^{2+}$  ir  $Mg^{2+}$ , dolomitas gali būti naudojamas biodyzelino sintezėje. Dolomito dekompozicija vyksta dviem stadijom: pirmoje skyla  $MgCO_3$  ir susidaro MgO (350–545 °C temperatūroje), antroje stadijoje skyla  $CaCO_3$  ir susidaro CaO (825 °C temperatūroje). Yra nustatyta, jog MgO peresterinimo reakcijoje esant 60 °C temperatūrai, nepasireiškė aktyvumu, tačiau buvo aktyvus katalizatorius peresterinant sojos pupelių aliejų 180 °C temperatūroje. Nustatyta, jog vykdančią biodyzelino sintezę 100 °C temperatūroje, MgO pasireiškė labai mažu aktyvumu. Tuo tarpu CaO yra efektyvus ir daug žadantis katalizatorius biodyzelino gamyboje [3].

Šio mokslinio tyrimo tikslas - ištirti dolomito taikymo biodyzelino sintezėje naudojant butanolį galimybes.

### **Tyrimų metodika**

#### *Katalizatorių paruošimas*

Dolomitas smulkintas grūstuvėje, gaunant skirtingo dydžio frakcijas, kurios atskirtos, naudojant skirtingų dydžių sietus. Gautos trys (0,63–0,315, 0,315–0,1 ir 0,1–0,063 mm) dolomito frakcijos, buvo kaitintos muflėje 2 valandas 700, 800, 850, 900 °C temperatūrose.

### *Raliejaus peresterinimas*

Rapsų aliejus (RA) įsigytas vietiniame parduotuvių tinkle, jis atitiko maistiniam aliejui keliamus kokybės reikalavimus.

RA peresterinimas vykdytas Erlenmejerio kolbose su šlifų, kurios buvo patalpintos į reaktorius su kaitinimu ir maišymu (250 min<sup>-1</sup>) bei grįžtamuju šaldytuvu.

Pasibaigus procesui, gautas mišinys nufiltruotas per celiuliozinį popierių, plautas vieną kartą 10 % nuo mišinio tūrio H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (5 %) tirpalu ir du kartus su distiliuotu vandeniu. Plovimai atlikti dalomajame piltuve, po kiekvieno plovimo nupilant atsiskyrusią vandeningą dalį. Po plovimo, vanduo iš riebalų rūgščių esterių buvo išgarintas, naudojant rotacinį garintuvą (80 °C, 40 mbar).

### *Rapsų aliejaus peresterinimas, naudojant paviršiaus atsako metodologiją*

Eksperimentai buvo planuojami ir rezultatai analizuojami atsako paviršiaus metodologijos (APM) įrankį turinčia Design Expert 8.01 (Stat-Ease, 91 Minneapolis) programa. Šis planas naudotas RA peresterinimo reakcijoms, naudojant butanolį. Eksperimento plane buvo naudojami keturi kintamieji – alkoholio:RA santykis (mol:mol) (nuo 5 iki 15), reakcijos temperatūra (nuo 60 iki 110 °C), katalizatoriaus (dolomito) kiekis (nuo 3 iki 9 %) ir reakcijos trukmė (nuo 2 iki 8 val.). Eksperimento planą sudarė 30 eksperimentinių bandymų. Atlikus eksperimento plane numatytus eksperimentus, rezultatai buvo analizuojami, buvo taikomas geriausiai rezultatus atitinkantis modelis. Parinkus eksperimentines vertes atitinkantį modelį, buvo nustatytos nepriklausomų kintamųjų vertės, kurios lemia pageidaujamą atsako vertę, t.y. maksimalų peresterinimo laipsnį.

### *Peresterinimo laipsnio vertinimas*

Peresterinimo laipsnis buvo vertintas plonasluoksnės chromatografijos metodu, naudojant boru impregnuotas silikagelio G-25 plokšteles, taip pat peresterinimo laipsnis buvo nustatomas pagal gliceridų kiekį mėginiuose. Glicerolis, monogliceridai, digliceridai, trigliceridai buvo analizuoti dujiniu chromatografu Perkin Elmer Clarus 500 (detektorius – FID, kolonėlė – Restek MXT-Biodiesel TG (0, 15 m, – 0,32 mm – 0,10 μm) pagal standartą LST EN 14105.

## **Rezultatai**

### *Katalizatoriaus – dolomito, optimalių apdorojimo sąlygų parinkimas*

#### *Frakcijos parinkimas*

Išskyrus tris katalizatoriaus (dolomito) frakcijas - 0,63–0,315, 0,315–0,1 ir 0,1–0,063 mm, jas iškaitinus 800 °C temperatūroje 2 val., buvo atliktos RA peresterinimo reakcijos, naudojant 8 % dolomito, metanolio:RA santykis 8, reakcija vykdyta 5 val, esant 64 °C temperatūrai. Gauti mišiniai analizuoti plonasluoksnės chromatografijos būdu

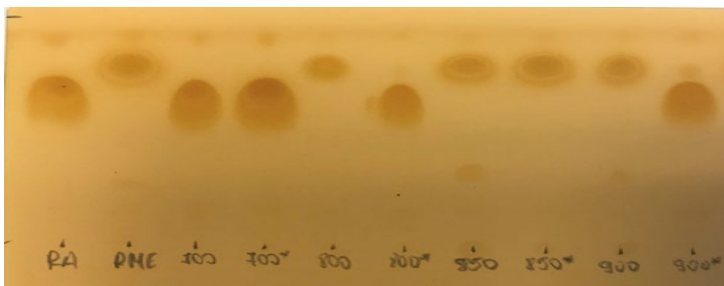
Dolomito frakcija 0,315-0,1 mm pasižymėjo didžiausiu veiksmingumu, todėl vėlesniuose tyrimuose naudoti katalizatoriai buvo ruošiami tokio dydžio frakcijos.

### *Kaitinimo temperatūros parinkimas*

Pasirinkta dolomito frakcija buvo kaitinta skirtingose temperatūrose (700, 800, 850, 900 °C), atliktos RA peresterinimo reakcijos, naudojant 8 % dolomito, metanolio:RA santykis 8, reakcija vykdyta 5 val, esant 64 °C temperatūrai. Gauti mišiniai analizuoti plonasluoksnės chromatografijos būdu (1 pav.).



**1 pav.**  
RA peresterinimo  
metanolio reakcijos  
produktai naudojant  
dolomitą, kaitintą  
skirtingose temperatū-  
rose: skaičiai atitinka  
temperatūrą, kurioje  
buvo kaitintas dolomi-  
tas, RA – rapsų aliejus,  
RME – rapsų aliejaus  
metilesteriai

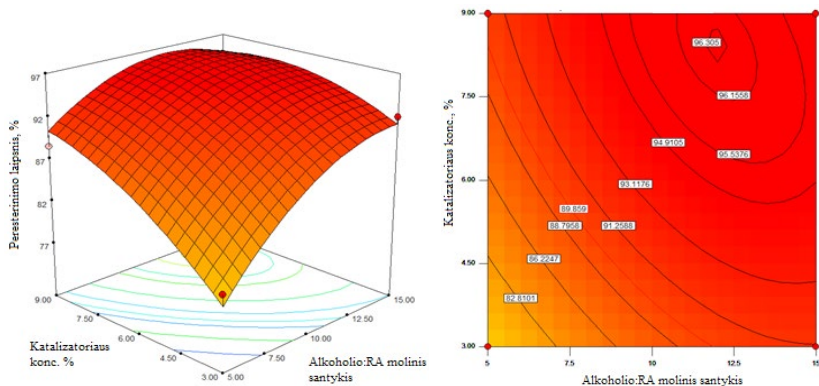


Mokslininkas Ilgen [3] taip pat tyrė dolomito panaudojimo galimybes rapsų aliejaus peresterinimo procese ir nustatė, jog dolomitas efektyviausias jį iškaitinus 850 °C temperatūroje. Esant žemesnėms temperatūroms (500–600 °C), dolomitas buvo beveik neveiksmingas (<3 % RRME), taip yra todėl, jog peresterinimo reakcijas katalizuoja metalų oksidai, kurie, veikiant temperatūrai, susidaro iš dolomite esančių metalų karbonatų, o šis procesas vyksta esant aukštesnei nei 700 °C temperatūrai. Šie rezultatai patvirtina ir mūsų tyrime gautus rezultatus, dolomito frakcija, kaitinta 850 °C temperatūroje, pasižymėjo didžiausiu veiksmingumu, todėl vėlesniuose tyrimuose naudotas dolomitas, buvo ruošiamas tokioje temperatūroje.

*Modelio sudarymas ir optimalių reakcijos sąlygų nustatymas, naudojant atsako paviršiaus metodologiją*

Didžiausias programos prognozuotas peresterinimo laipsnis buvo 94,78 %, kai butanolio ir RA santykis 15:1, reakcijos temperatūra – 110 °C, katalizatoriaus kiekis 9 %, reakcijos trukmė – 8 val, eksperimentiškai gautas didžiausias peresterinimo laipsnis – 94,55 %, reakciją vykdant tomis pačiomis minėtomis sąlygomis. Buvo atliktas proceso optimizavimas, norint rasti sąlygas, kurioms esant būtų galima gauti didžiausią RA peresterinimo laipsnį. RA peresterinimo laipsnis didėja, didėjant alkoholio kiekiui iki tam tikros ribos, didžiausios peresterinimo vertės gaunamos esant ~12,5 alkoholio:RA moliniam santykiui, didinant alkoholio kiekį iki molinio santykio 15:1, peresterinimo laipsnis gaunamas mažesnis (2 pav.). RA peresterinimo laipsniui daug didesnę įtaką turi temperatūra nei katalizatoriaus koncentracija, todėl labai svarbu tinkamai parinkti reakcijos temperatūrą, kuri mūsų atveju turi būti kuo didesnė. Reakcijos trukmė taip pat turi didelę įtaką, kuo ilgiau vykdoma reakcija, tuo didesnis peresterinimo laipsnis gaunamas.

Naudojant programą ir atlikus optimizavimą, buvo nustatytos vertės, kurioms esant peresterinimo laipsnis gaunamas didžiausias (1 lentelė). Abiem atvejais reakcijos temperatūra turi būti 110 °C, trukmė 8 val., tačiau galima keisti butanolio:RA molinį santykį, naudojant 13,72, katalizatoriaus pakanka 5,24 %, tačiau, jeigu naudotume butanolio:RA molinį santykį 10,02, siekiant gauti tokį patį peresterinimo laipsnį, katalizatoriaus reikėtų daugiau – 6,59 %.



2 pav.

Peresterinimo laipsnio (%) modelis, katalizatoriaus kiekio ir alkoholio kiekio įtaka, kai reakcijos temperatūra 110 °C, trukmė 8 val.

### 1 lentelė. RA peresterinimo butanoliu reakcijos optimizavimo algoritmo sprendiniai

Alkoholio (butanolio):RA molinis santykis	Reakcijos temperatūra, °C	Katalizatoriaus koncentracija nuo RA, %	Reakcijos trukmė, val.	Peresterinimo laipsnis, %
13,72	110	5,24	8	94,5501
10,02	110	6,59	8	94,5501

### Literatūra

- [1] Lourinho, G., Brito, P. Advanced biodiesel production technologies: novel developments. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 2015, 14, 287-316.
- [2] Ismail, S., Ahmed, A. S., Reddy, A., Hamdan, S. Biodiesel production from castor oil by using calcium oxide derived from mud clam shell. *Journal of Renewable Energy*. 2016.
- [3] Ilgen, O. Dolomite as a heterogeneous catalyst for transesterification of canola oil. *Fuel Processing Technology*, 2011, 92, 452-455.
- [4] Sasaki, K., Yoshida, M., Ahmmad, B., Fukumoto, N., Hirajima, T. Sorption of fluoride on partially calcined dolomite. *Colloids and surfaces A: physicochemical and engineering aspects*, 2013, 435, 56-62.

V. Adaškevičiūtė,  
V. Kaškonienė

Vytauto Didžiojo universitetas

## FERMENTINĖS HIDROLIZĖS ĮTAKOS BIČIŲ SURINKTŲ ŽIEDADULKIŲ BIOLOGINIAM AKTYVUMUI ĮVERTINIMAS

Bičių surinktos žiedadulkės – tai granuliu pavidalo natūrali žiedų sudedamoji dalis, pasižyminti vertinga chemine sudėtimi, kurioje gausu maistinių medžiagų, įvairių vitaminų, riebalų, baltymų, mineralų, ir biologiškai aktyvių medžiagų, nulemiančių svarbias antioksidacines ir antibakterines savybes. Šio produkto sienelei būdinga viena sudėtingiausių kompleksinių struktūrų visoje augalų karalystėje, o tai ženkliai apsunkina produkto biologinį prieinamumą [1, 2]. Industrinėje pramonėje dėl šios priežasties dažniau renkamosi bičių duonelės produktus, kurių sudėtis ir savybės yra itin panašios į žiedadulkes, o ląstelių sienelė – suardyta pieno rūgšties bakterijų fermentacijos metu, todėl biologiškai aktyvios ir maistinės medžiagos lengviau pasisavinamos žmogaus organizmo. Kartu su didėjančiu mokslinių tyrimų kiekiu, šiuo metu pasaulinėje rinkoje vis daugiau dėmesio skiriama ir naujų technologijų, susijusių su natūralių produktų panaudojimu bei savybių gerinimu, kūrimui. Siekiant iš bičių surinktų žiedadulkių gauti ne tik didesnius, bet ir lengviau pritaikomus, aktyvesnius, įvairesnius ir sveikatai naudingesnius medžiagų kiekius, pagerinti panaudojimą ir biologinį prieinamumą, siūloma žaliavą papildomai apdoroti. Žiedadulkių sienelių skaidymą ir žaliavos apdorojimą galima atlikti naudojant fermentaciją pieno rūgšties bakterijomis arba apdorojant atrinktais selektyviais fermentais.

Šio tyrimo tikslas – atlikti skirtingos geografinės kilmės žiedadulkių fermentinę hidrolizę bei įvertinti hidrolizės įtaką žiedadulkių antioksidaciniam ir antibakteriniam aktyvumui bei antibiotikų veiksmingumui. Mūsų žiniomis, tai pirmasis tyrimas, analizuojantis fermentinės hidrolizės įtaką skirtingos geografinės kilmės bičių surinktų žiedadulkių antioksidacinėms savybėms bei sąveikai su antibiotikais. Įvertinus optimaliausią hidrolizės metu naudojamo fermento kiekį ir proceso trukmę, devyni žiedadulkių mėginiai iš Lietuvos, Lenkijos, Švedijos, Danijos, Olandijos, Slovakijos, Italijos, Ispanijos ir Maltos buvo fermentuoti nustatytais sąlygomis, naudojant *Viscozyme L*, *Clara-diastrase*, lipazės, proteazės, amiloglukozidazės ir celulazės fermentus [3]. Bendras fenolinių junginių, bendras flavonoidų kiekis ir antiradikalinis aktyvumas buvo vertinamas spektrofotometriniais analizės metodais [4, 5, 6]. Bendras fenolinių junginių kiekis nustatytas naudojant Folin–Ciocalteu reagentą. Bendras flavonoidų kiekis nustatytas vykdant spalvinę reakciją su aliuminio chloridu. Antiradikalinis aktyvumas vertintas naudojant 2,2-difenil-1-pikrilhidrazil (DPPH) laisvąjį radikalą. Taip pat, oksidacijos-redukcijos potencialas nustatytas, naudojant standartinį multimetrą kartu su platininiu elektrodu [7]. Antibakterinis aktyvumas bei sąveika antibiotikų

veiksmingumui vertinti difuzijos į agarą metodu prieš *S. aureus*, *L. monocytogenes*, *S. enteritidis*, *S. typhimurium* bakterijų kultūras [8]. Gauti duomenys įvertinti statistiškai ir palyginti chemometrinės analizės metodais.

Tyrimo metu nustatyta, kad fermentinė hidrolizė padidina bendrą fenolinių junginių (1,3-2,5 karto), bendrą flavonoidų kiekį (1,2-1,9 karto) bei antiradikalinį aktyvumą (1,2-2,1 karto) visuose bičių surinktų žiedadulkių mėginiuose. Taip pat, nustatyta teigiama įtaka tiek antibakteriniam aktyvumui, tiek antibiotikų ir ekstraktų sąveikai priklausomai nuo mišinio su atitinkamu antibiotiku bei patogeninių bakterijų rūšies. Didžiausiu bendru fenolinių junginių, bendru flavonoidų, antiradikalinio ir antibakteriniu aktyvumais pasižymėjo bandiniai po hidrolizės su celulaze, o mažiausiu – su amiloglukosidaze. Po fermentinės hidrolizės didžiausias bendras fenolinių junginių, bendras flavonoidų kiekio, antiradikalinio bei antibakterinių aktyvumų pokyčiai nustatyti švediškos žiedadulkės, o mažiausi – žiedadulkės iš Maltos. Oksidacijos-redukcijos potencialas ženkliai išaugo žiedadulkių bandiniuose iš šiaurinės Europos dalies po fermentinės hidrolizės su celulaze (1,3-1,7 karto), o pietinių kraštų žaliavoje nustatyti minimalūs potencialo pokyčiai (1,1-1,3 karto). Didžiausia žiedadulkių ekstraktų sąveika su antibiotikais po fermentinės hidrolizės nustatyta naudojant žaliavą iš Švedijos, o mažiausia – iš Maltos.

## Padėka

Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0030 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

---

## Literatūra

- [1] Denisow, B., Denisow-Pietrzyk, M. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 2016, 96(13), 4303-4309.
- [2] Blackmore, S., Wortley, A. H., Skvarla, J. J., Rowley, J. R. *New Phytologist Trust*, 2007, 174(3), 483-498.
- [3] Zuluaga-Dominguez, C., Castro-Mercado, L., Quicazan, M. C. *Journal of Food Processing and Preservation*, 2019, 43(7).
- [4] Kaškonienė, V., Katilevičiūtė, A., Kaškonas, P., Maruška, A. *Chemical Papers*, 2018, 72(8), 2115–2120.
- [5] Kaškonienė, V., Ruočkuvienė, G., Kaškonas, P., Akuneca, I., Maruška, A. *Food Analytical Methods*, 2015, 8(5), 1150-1163.
- [6] Stankevičius, M., Akuneca, I., Jakobsone, I., Maruška, A. *Journal of Separation Science*, 2011, 34(11), 1261-1267.
- [7] Mello, L. D., Quadros, G. P. *Acta Scientiarum*, 2014, 36, 97-103.
- [8] Kaškonienė, V., Adaškevičiūtė, V., Kaškonas, P., Mickienė, R., Maruška, A. *Food Bioscience*, 2020, 34, 100532.

**D. Armonavičius,  
A. Maruška,  
T. Drevinskas**

Vytauto Didžiojo universitetas,  
Instrumentinės analizės  
atviros priemonės centras

## MIELIŲ PRODUKUOJAMŲ KILERINIŲ TOKSINŲ BEI MAISTO FERMENTACIJOS TYRIMAI

**Ivadas.** Pieno pramonė Lietuvoje yra viena svarbiausių žemės ūkio šakų. Nuolat siekiama atrasti ne tik naujus skonius produktams, bet ir atnaujinti gamybos technologijas, pavyzdžiui, įvedant naujas mikroorganizmų rūšis. Pramonėje, naudojant įvairius cheminius maisto priedus, prailginamas maisto produktų galiojimo laikas. Didėjant visuomenės norui vartoti kuo natūralesnius maisto produktus ir atsirandant vis naujoms patogeninių mikroorganizmų kultūroms, mokslininkai ieško alternatyvių, saugesnių žmogaus sveikatai maisto konservavimo būdų. Vienas iš jų – galimybė naudoti mielių išskiriamus kilerinius toksinus. Priklausomai nuo aplinkos sąlygų, mielės prisitaiko, dėl ko atsiranda skirtingų kultūrų, galinčių išskirti skirtingomis savybėmis pasižyminčius kilerinius toksinus. Būtent dėl to yra labai svarbu kuo nuodugniau ištirti šių antibakterinių medžiagų aktyvumo priklausomybę nuo įvairių aplinkos veiksnių, įtaką pieno produktų skoninėms savybėms, poveikį patogeniniams mikroorganizmams bei žmogaus sveikatai.

**Šio projekto tikslas** – atlikti mielių išskiriamų kilerinių toksinų citotoksiškumo, atsparumo įvairiems aplinkos veiksniams, išgyvenamumo tyrimus bei atlikti maisto produktų (pieno) fermentaciją ir išskiriamų lakiųjų junginių analizę.

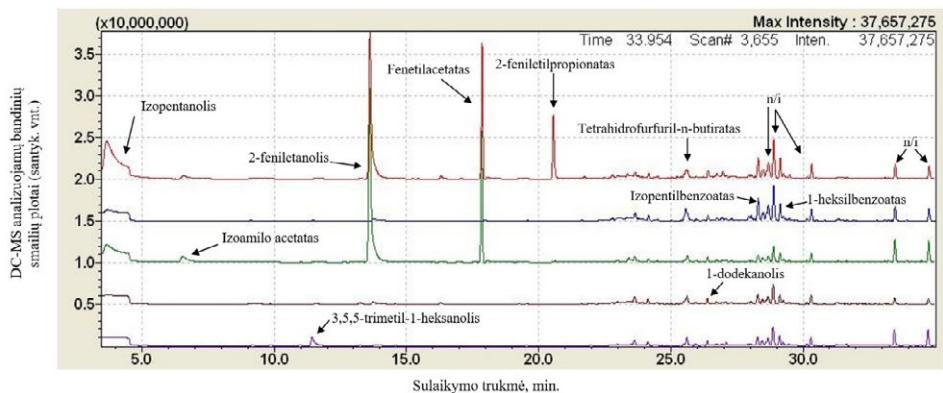
**Metodika.** Projekto metu naudojami šeši varškės sūrių bandiniai, kurie surinkti penkiuose skirtinguose Lietuvos rajonuose. Naudojant YGC mitybinę terpę, iš bandinių išskirtos skirtingos mielių kultūros. Naudojant difuzijos į agarą šulinėlių metodą nustatyta temperatūros, pH ir NaCl koncentracijos įtaka išskiriamų kilerinių toksinų aktyvumui [1–3]. Naudojant dujų chromatografijos – masių spektrometrijos sistemą identifiukuoti mikroorganizmų išskiriami lakieji junginiai [4]. Atliekant degustaciją, sudarytą iš penkių vertintojų, nustatyta mikroorganizmų įtaka 2,5 ir 3,5 proc. riebumo pieno, fermentuoto 24 ir 48 val., skoninėms savybėms. Įvertinus išvaizdos, konsistencijos, skonio ir kvapo intensyvumą sudaryti jusliniai profiliai ir įvertintas bendras produktų priimtumas [5]. Dėl pasaulinės COVID-19 pandemijos mikroorganizmų citotoksiškumo ir išgyvenamumo tyrimai bus atlikti vėliau.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** Iš šešių skirtingų varškės sūrių bandinių išskirtos penkios mielių kolonijos: *D.hansenii*, *C.inconspicua*, *K.marxianus* ir dvi *C.zeylanoides* mielių kultūros. Mielių išskiriamų kilerinių toksinų optimali veikimo temperatūra svyravo nuo 40°C iki 60°C temperatūros, tačiau kylant jai, antibakterinis aktyvumas mažėjo. Kilerinių toksinų aktyvumas nebuvo pastebėtas juos paveikus 100 – 121°C temperatūra. Mielių išskiriami kileriniai toksinai aktyvūs juos paveikus 30 min. pH nuo 2 iki

8, o nuo 10 iki 12 antibakterinis aktyvumas nepastebėtas. Mielių išskiriamų kilerinių toksinų antibakteriniam aktyvumui 5 – 8 proc. NaCl koncentracija įtakos neturėjo, tačiau didinat koncentraciją iki 10 proc. daugumos toksinų aktyvumas nepastebėtas.

Mikroorganizmai išskiria dešimt identifikuotų lakiųjų junginių – keturis alkoholius: izopentanolį, 3,5,5-trimetil-1-heksanolį, 1-dodekanolį ir 2-feniletanolį; penkis esterius: izoamilo acetatą, fenetilacetatą, 1-heksilbenzoatą, 2-feniletilpropionatą ir izopentilbenzoatą; vieną riebalų rūgštij: tetrahidrofurfuril-n-butiratą bei penkis neidentifikuotus lakiuosius junginius.

Mielių išskiriamų lakiųjų junginių analizės rezultatai pateikiami 1 paveiksle.



Paaīškinimai: n/i – neidentifikuoti junginiai

### 1 pav.

Mikroorganizmų išskiriamų lakiųjų junginių DC-MS chromatograma. Chromatogramos nuo viršaus į apačią: *K.marxianus*, *C.zeylanoides\_L*, *C.inconspicua*, *D.hansenii* ir *C.zeylanoides\_G*. SSN neviršija 5 proc. (n = 3)

1 paveiksle matoma, kad izopentanolį, 1-dodekanolį, izopentilbenzoatą, 1-heksilbenzoatą ir tetrahidrofurfuril-n-butiratą išskyrė visos mielės. 2-feniletanolį, izoamilo acetatą ir fenetilacetatą išskyrė tik *K.marxianus* ir *C.inconspicua* mielių kultūros. 2-feniletilpropionatą išskyrė tik *K.marxianus* mielių kultūros. 3,3,5-trimetil-1-heksanolį išskyrė tik *C.zeylanoides* mielių kultūros.

Po 24 val. trukusios fermentacijos geriausiomis skoninėmis savybėmis įvertintas 2,5 proc. riebumo pienas, suraugintas *C.inconspicua* ir *C.zeylanoides* mielių kultūromis, o po 48 val. – 3,5 proc. riebumo pienas, fermentuotas *C.inconspicua* mielių kultūromis. Bendram priimtinumui didelę įtaką turėjo išskiriamas 2-feniletanolis (turintis gėlių kvapą) ir fenetilacetatas (turintis rožių ir medaus kvapą), kurie lėmė produktų vidutinio stiprumo šviežių kvapą ir rūgščių skonį. Nepriimtini rezultatai gauti pienu fermentuojant *D.hansenii* ir *K.marxianus* mielių kultūromis, kadangi šios mielių kultūros išskyrė didelį kiekį izopentanolio (turintis švelniai aštrų kvapą), kuris sumažino bendro priimtimumo įvertinimą.

**Išvados.** Kileriniai toksinai savo antibakterinių savybių neparado juos paveikus 30 min. 40 – 80 °C temperatūra, 30 min. pH nuo 2 iki 8 ir mikroorganizmus auginant mitybinėje terpėje esant 5 – 8 proc. NaCl koncentracijai. Atlikus dujų chromatografiją – masių spektrometriją nustatyta, kad mikroorganizmai daugiausiai išskiria keturių rūšių alkoholius, penkių rūšių esterius, vieną riebalų rūgštij bei penkis neidentifikuotus lakiuosius junginius. Degustacijos metu geriausiomis juslinėmis savybėmis

įvertintas 2,5 ir 3,5 proc. riebumo pienas, suraugintas *C.inconspicua* ir *C.zeylanoides* mielių kultūromis. Nepriimtini rezultatai gauti pieną fermentuojant *D.hansenii* ir *K.marxianus* mielių kultūromis.

**Padėka:** šį projektą finansavo Lietuvos mokslo taryba (LMT), projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0067

---

### Literatūra

- [1] Kormin, S., Rusul, G., Radu, S. ir Ling, F. H. Bacteriocin-producing lactic acid bacteria isolated from traditional fermented food. *The Malaysian Journal of Medical Sciences: MJMS*, 2001, 8, 63-68.
- [2] Saad, M., Abdelsamei, H., Ibrahim, E., Abdou, A. M. ir El-Sohaimy, S. A. Effect of pH, heat treatments and proteinase K enzyme on activity of *Lactobacillus acidophilus* bacteriocin. *Benha Veterinary Medical Journal*, 2015, 2, 210-215.
- [3] Hernández, A., Martín, A., Córdoba, M. G., Benito, M. J., Aranda, E., ir Pérez-Nevaldo, F. Determination of killer activity in yeasts isolated from the elaboration of seasoned green table olives. *International Journal of Food Microbiology*, 2008, 121, 178-188.
- [4] Choi, Y. J., Yong, S., Lee, M. J., Park, S. J., Yun, Y. R., Park, S. H. ir Lee, M. A. Changes in volatile and non-volatile compounds of model kimchi through fermentation by lactic acid bacteria. *Food Science and Technology*, 2019, 105, 118-126.
- [5] Bašinskienė, L. *Sensorika ir maisto psichologija*. Technologija, Kaunas, 2001. Puslapių skaičius knygoje: 49.

**M. Baliukynas,  
I. Matijošytė**

*Vilniaus universiteto  
Gyvybės mokslų centro,  
Biotechnologijos institutas*

## **MIELIŲ KLUYVEROMYCES LACTIS HETEROLOGINIŲ BALTYMŲ SISTEMOS TAIKYMO BAKTERINĖS B-KARBOANHIDRAZĖS RAIŠKOS TYRIMAS**

Natūraliai gamtoje egzistuoja fermentai, kurie katalizuoja grįžtamąją CO<sub>2</sub> molekulės hidratacijos/dehidratacijos reakciją. Tai fermentai karboanhidrazės, kurios yra skirstomos į aštuonias klases: α-KA, β-KA, γ-KA, δ-KA, ζ-KA, η-KA, θ-KA ir ι-KA. Šios šeimos pasižymi tik joms būdinga pirminių aminorūgščių seka bei tretine struktūra, tačiau katalizuoja tą pačią CO<sub>2</sub> hidratacijos reakciją. Pramonėje karboanhidrazės gali būti pritaikytos atmosferinio CO<sub>2</sub> fiksacijai, kurį toliau galima konvertuoti į įvairius naudingus produktus: akrilatus, polikarbonatus, poliuretaną ir kt. Pagal savo savybes tam labiausiai tiktų β šeimos KA, kurios yra aptinkamos bakterijose ir katalizuoja reakcijas dideliu greičiu [1-3]. Palyginti su plačiai tyrinėjamomis žinduolinės kilmės α-KA, β-KA buvo surastos ir pradėtos tyrinėti neseniai, todėl mokslinėje literatūroje pateikiami tyrimai, susiję su rekombinantinio β-KA baltymo gamyba, yra dar menkai išvystyti ir pateikti. Net ir tyrimams nėra galimybės šio fermento įsigyti komerciškai.

**Šio tyrimo tikslas buvo įvertinti β-KA geno raišką ir sekreciją mielių *Kluyveromyces lactis* heterologinių baltymų sistemoje.**

Tyrimo metu, pirmiausia, buvo sukonstruota raiškos kasetė homologinės rekombinacijos principu bakterijose *E.coli*: paruoštas vektorius bei tikslinio geno mišinys transfekuotas į bakterijas *E.coli* DH5α. Išskirtas tiriamasis vektorius (sukonstruota raiškos kasetė) buvo analizuotas su restrikcijos endonukleazėmis. Tada atlikti raiškos kasetės įterpimo į raiškos vektorių darbai: paruoštas raiškos vektorius (karpytas su specifinėmis restrikcijos endonukleazėmis) bei raiškos kasetė (amplifikuota su specifiniais pradmenimis) buvo transfekuoti į bakterijas *E.coli* DH5α. Gautas ir išskirtas konstruktas analizuotas su restrikcijos endonukleazėmis. Vėliau nusekvenuotas raiškos vektorius transfekuotas į mieles *K.lactis* bei įvertinta tikslinio geno raiškos priklausomybė nuo skirtingų kultivavimo sąlygų.

Atlikus mielių *K.lactis* β-karboanhidrazės geno raiškai tinkamumo ir efektyvumo tyrimus, rezultatai parodė, jog rekombinantinis baltymas į ląstelės išorę, kaip buvo tikėtasi, nebuvo sekretuojamas. Tačiau nustatyta, jog nedidelė rekombinantinės karboanhidrazės dalis buvo produkuojama tirpios būsenos t.y., aptinkamas tirpioje viduląstelinėse baltymų frakcijoje.

### **Literatūra**

- [1] Jensen E.L., Clement R., Kosta A., Maberly S.C., Gontero B.A. *ISME Journal*, 2019, 13, 2094–106.
- [2] Supuran C.T, Capasso C. *Metabolites*, 2017, 7, 56.
- [3] Supuran C.T. Structure and function of carbonic anhydrases. *Biochemical Journal*, 2016, 473, 2023-2032.



**D. Blaževičius,  
S. Grigalevičius**

*Kauno technologijos universitetas*

## **NAUJOS KARTOS EMITERIAI ORGANINIAMS ŠVIESTUKAMS**

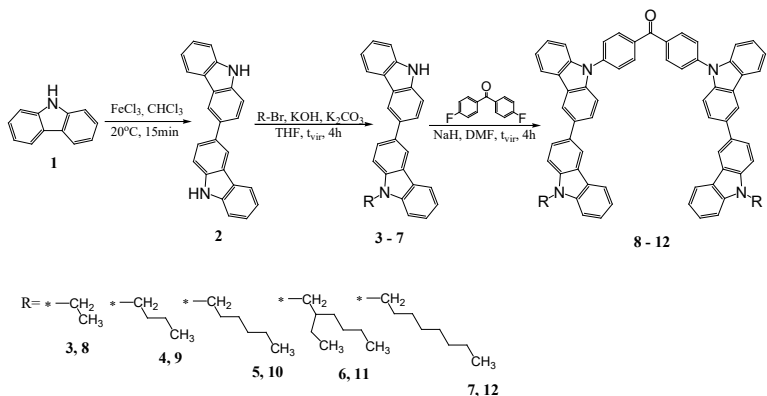
### **Ivadas**

Antroji organinių šviesos diodų (OLED) karta sukėlė didelį proveržį išorinio kvantinio efektyvumo didinime, panaudojant sunkių metalų organinius kompleksus kaip emiterius. Nepaisant to, pereinamųjų metalų kompleksai [1] iridžio [2], platinos [3,4], osmio [5], europio [6] ar rutenio [7] pagrindu yra ypač brangūs, o resursas žemėje yra nedidelis. Dėl šių priežasčių tokių prietaisų masinė gamyba pažeistų darnaus vystymosi principus, o tokių prietaisų utilizacija gali būti gana tarši ir sudėtinga [8]. Viena iš fosforescuojančių organinių šviestukų silpnų vietų – ilgai egzistuojančios tripletinės sužadintosios elektronų būsenos. Termiškai aktyvuojama uždelstoji fluorescencija (TADF) leidžia išnaudoti tripletines sužadintąsias būsenas, jas perkeliant į energetiškai artimas singletines sužadintąsias būsenas [9]. Šis procesas, užtikrinantis uždelstosios fluorescencijos dominavimą emisijoje, vadinamas atvirkštiniu tarp sisteminiu perėjimu (RISC), kurio sėkmingam vyksmui būtinas mažas energetinis skirtumas tarp singletinių ir tripletinių sužadintųjų būsenų energijų ( $\Delta E_{ST}$ ). Toks fotonų generavimo mechanizmas, kaip ir antros kartos prietaisuose, įgalina iki 100% siekiantį teorinį vidinį kvantinį efektyvumą. Be to, cheminis ir terminis sudedamųjų emiterio fragmentų stabilumas yra labai svarbūs parametrai ilgam TADF prietaisų tarnavimo laikui. Šiuo metu yra išbandyta daug elektronakceptorinių fragmentų, kaip benzonitrilas, difenilsulfonas, benzofenonas, ar triazinas. Elektrondonorinių fragmentų pasirinkime dominuoja karbazolas bei jo dariniai. Šios technologijos tolimesniam tobulėjimui yra būtina kurti naujos struktūros TADF emiterius, kurie pasižymėtų mažu energiniu skirtumu tarp sužadintųjų tripletinių ir singletinių lygmenų, geru terminiu ir morfologiniu stabilumu, būtų sudaryti iš elektronų akceptorinių ir donorinių fragmentų, taip pat pasižymėtų geru tirpumu organiniuose tirpikliuose, siekiant panaudoti pigias priemaisų sluoksnių formavimo iš tirpalų technologijas.

### **Sintezės metodika**

Daugiapakopė medžiagų trečiosios kartos OLED emiteriams sintezė pavaizduota 1 pav. Pirmiausia buvo susintetintas 9H,9'H-[3,3']-bikarbazolas (**2**) iš komercinio junginio- 9H-karbazolo. Reakcija vyko metanolyje, esant geležies (III) chlorido oksidatoriui. Iš pagaminto junginio **2** buvo sintetinami įvairūs 9'-alkil,9H-[3,3']bikarbazolai (**3-7**). Šios reakcijos vyko šarminėje terpėje tetrahidrofurane, bikarbazolui **2** reaguojant su bromo atomų turinčiu alkanu moliniu santykiu 1:1. Reakcijos metu

susidariusios priemaišos ir likęs nesureagavęs 9H,9'H-[3,3']bikarbazolas nuo tikslinio junginio atskirtas kolonėlinės chromatografijos metodu. Tiksliniai dariniai 4,4'-di(9H-9'-alkil-[3,3']-bikarbazol-9-il)benzofenonai (**8-12**) gauti bikarbazolo junginiams **3 - 7** reaguojant su 4,4'-difluorbenzofenonu dimetilformamide, dalyvaujant natrio hidridui. Gautos medžiagos grynintos kolonėlinės chromatografijos metodu.



## Darbo rezultatai ir jų aptarimas

Terminės susintetintų elektroaktyvių medžiagų **8 – 12** savybės buvo tiriamos diferencinės skenuojamosios kalorimetrijos (DSK) ir termogravimetrinės analizės (TGA) metodais, kaitinant minėtų medžiagų bandinius azoto aplinkoje. Buvo nustatytas aukštas darinių terminis atsparumas. DSK eksperimentų metu kiti šios grupės dariniai **9 – 12** elgėsi labai panašiai. Tai amorfinės medžiagos, kurių stiklėjimo temperatūra mažėjo didėjant alkilpakeitui. Šiai tendencijai nepriklausė tik 2-etilheksilfragmentą turintis junginys **10**.

### 1 lentelė. Junginių **8 – 12** terminės savybės.

Junginys	Junginio alkil- pakaitas	T <sub>D</sub> , °C	T <sub>S</sub> , °C
8	Etil-	492	178
9	Butil-	464	145
10	Heksil-	340	78
11	2-Etilheksil-	366	105
12	Oktil-	380	95

Siekiant nustatyti junginių efektyvumą juos pritaikant TADF emiteriais, buvo suformuoti pirminiai OLED prietaisų prototipai. Visi susintetintieji dariniai geba sudaryti stabilius amorfinius sluoksnius, todėl jie visi buvo išbandyti prietaisuose. Iš visų prototipų galima išskirti prietaisą, kurio matricoje buvo disperguota 15% masės oktil- pakeistos medžiagos **12** emiterio. Įrenginys pasiekė maksimalų 2631cd/m<sup>2</sup> skaitį, pademonstravo 7,9lm/W energinį, 9,1cd/A srovės ir 4,0% siekiantį išorinį kvantinį efektyvumą. Šių prietaisų sklaidžiamos šviesos spalvai įtaką darė disperguoto matricoje emiterio kiekis. Mažėjant junginio **12** koncentracijai emisiniame sluoksnyje, sklaidžiamos šviesos spalva slinkosi trumpesnių elektromagnetinių bangų pusėn – šviesos spalva tapo mėlynesnė, lyginant su pradine mėlsvai žalia prietaiso su gryno emiterio emisiniu sluoksniu sklaidžiamos šviesos spalva.

## 2 lentelė. Organinių šviesos diodų su emiteriu 12 charakteristikos.

Emiteris	m%	PE (lm/W) / CE (cd/A) / EQE (%)		CIE1931 koordinatės		Maksimalus skaistis, cd/m <sup>2</sup>
		Maksimalūs	@ 1000cd/m <sup>2</sup>	@ 100cd/m <sup>2</sup>	@ 1000cd/m <sup>2</sup>	
12	5	2,1 / 3,9 / 2,3	0,6 / 2,0 / 1,4	(0,19; 0,22)	(0,22; 0,22)	1578
	10	4,4 / 6,5 / 3,1	1,0 / 2,8 / 1,7	(0,20; 0,27)	(0,23; 0,25)	2251
	15	7,9 / 9,1 / 4,0	0,3 / 1,0 / 0,5	(0,21; 0,31)	(0,22; 0,27)	2631
	100	1,4 / 1,8 / 0,7	-	(0,26; 0,44)	-	884

### Išvados

Apibendrinant, galima pasakyti, kad buvo susintetintos naujos bipolinės elektroaktyvios medžiagos, naudojant dibenzofenoną kaip elektronakceptorinį fragmentą, prie kurio buvo prijungti du elektronų donoro vaidmenį atliekantys, įvairaus ilgio alkilgrandinės turintys bikarbazolo fragmentai. Naujai susintetinti junginiai, atlikus diferencinės skenuojamosios kalorimetrijos matavimus, pasižymėjo aukštomis stiklėjimo temperatūromis, kurių vertės svyravo 78 – 178 °C ribose, o tai leidžia suformuoti stabilias homogenines amorfines plėveles. Visi dariniai buvo išbandyti kaip emiteriai organiniuose šviesos dioduose, iš tirpalo formuojamame emisiniame sluoksnyje keičiant emiterio koncentraciją. Prietaisas, kurio matricoje buvo disperguota 15% naujai susintetinto emiterio 4,4'-di(9H,9'-oktil-[3,3']bikarbazol-9-il)benzofenono, pasižymėjo geriausiomis savybėmis. Šviesiai mėlyną šviesą skleidžiantis organinis diodas viršijo maksimalų 2630cd/m<sup>2</sup> skaistį, pademonstravo 7,9lm/W energinį, 9,1cd/A srovės ir 4,0% siekiantį išorinį kvantinį efektyvumą.

### Literatūra

- [1] Z. R. Li, *Organic Light-Emitting Materials and Devices*, CRC Press 2nd edition (2015).
- [2] M. A. Baldo, S. Lamansky, P. E. Burrows, M. E. Thompson, S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999) 4.
- [3] Y.-L. Rao, D. Schoenmakers, Y.-L. Chang, J.-S. Lu, Z.-H. Lu, Y. Kang, S. Wang, *Chem. Eur. J.* 18 (2012) 11306.
- [4] H. Fukagawa, T. Shimizu, H. Hanashima, Y. Osada, M. Suzuki, H. Fujikake, *Adv. Mater.* 24 (2012) 5099.
- [5] J.L. Liao, Y. Chi, Y.-D. Su, H.-X. Huang, C.-H. Chang, S.-H. Liu, G.-H. Lee, P.-T. Chou, *J. Mater. Chem. C.* 2 (2014) 6269.
- [6] H. Xu, Q. Sun, Z. An, Y. Wei, X. Liu, *Coord. Chem. Rev.* (2015) 293, 228.
- [7] I. Oner, C. Sahin, C. Varlikli, *Dyes Pigm.* 95 (2012) 23.
- [8] W. Li, J. Li, D. Liu, F. Wang, S. Zhang, *J. Mater. Chem. C.* 3 (2015) 12529.
- [9] B. Valeur, M. N. Berberan-Santos, *Molecular Fluorescence: Principles and Applications*, ed. B. Valeur and M. N. Berberan-Santos, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA 4 (2012) 75.

**T. Budginas,  
I. Jonuškienė**

*Kauno technologijos universitetas*

# CITRINŲ RŪGŠTIES GAMYBOS OPTIMIZAVIMAS IŠ ATSINAUJINANČIŲ ŠALTINIŲ MIKROBIOLOGINĖS FERMENTACIJOS BŪDU

## **Įvadas**

Citrinų rūgštis yra plačiai naudojama medžiaga, kurios poreikis kiekvienais metais auga. Daugiausiai ji yra gaminama fermentacijos būdu panaudojant įvairias *Aspergillus niger* grybo rūšis. Fermentacijai kaip mitybinės terpės yra naudojamos pramonės atliekos, kuriose yra sacharidų, todėl sumažinami ir atliekų kiekiai. Citrinų rūgštis priklauso nuo to kokia terpės sudėtis, koks sacharidas ir kokie kiti terpės parametrai [1]. Į tai ir gilinamasi šiame tyrime siekiant išgauti didžiausią citrinų rūgštis kiekį iš skirtingų mitybinių terpių.

Citrinų rūgštis panaudojimo sritys gana plačios, pradedant maisto pramone, baigiant medicina. Citratas natūraliai susidaro kiekviename organizme, todėl laikomas kaip nekenksmingas maisto priedas organizmui. Maisto ir gėrimų pramonėje, citrinų rūgštis panaudojama kaip rūgštingumą reguliuojanti medžiaga ir žymima E330. Šioje pramonės srityje sunaudojama didžioji dalis citrinų rūgštis. Citrinų rūgštis taip pat naudojama kaip paviršių dezinfekcinės priemonės sudedamoji dalis. Didelis citrinų rūgštis kiekis sunaudojamas ir medicinoje. Citrinų rūgštis įeina į kai kurių vaistų sudėtį, kaip pH reguliuojanti medžiaga, ir taip pat plačiai naudojama donorų kraujo apsaugojimui sandėliavimo metu nuo koaguliacijos. Pastaraisiais metais citrinų rūgštis plačiai pradėta naudoti ir kaip ploviklių sudedamoji dalis.

Atrandama vis daugiau citrinų rūgštis panaudojimo sričių. Jos poreikis stipriai didėja ir vis daugiau šalių kuria gamyklas, kuriose citrinų rūgštis gaminama fermentacijos būdu. Fermentacijai panaudojamas vis platesnis pigių antrinių žaliavų diapazonas ir įmonėms pravartu savo pramonines atliekas paversti plačiai naudojama ir pridėtinę vertę turinčia medžiaga [2].

## **Tyrimo objektas ir metodika**

Citrinų rūgštis fermentacijai atlikti reikalinga didelė procesų kontrolė ir naudojamų žaliavų ištyrimas. Modeliniais mikroorganizmais citrinų rūgštis gamybai naudoti *A. niger* grybo DSM 2143 ir DSM 821 kultūros [3]. Iki fermentacijos

pradžios grybų kultūra auginta ant standžios agarų terpės 7 dienas. Siekiant paruošti inokuliuotą sporų suspensiją į *Petri* lėkšteles įpilamas 0,01 % Tween-80 vandinis tirpalas. Tirpalas praskiedžiamas iki sporų koncentracijos  $10^6$  sporų/ml. Vienas mililitras sporų suspensijos pasėjamas į 50 ml mitybinę fermentacijos terpę.

Fermentacija vykdoma termostatuojamame kratytuve "BIOSAN ES-20" 28-30°C laipsnių temperatūroje ir vykstant maišymui 190 apsisukimų per minutę greičiu. Fermentacijai naudojama skysta sintetinė terpė, kurios rūgštingumas pradžioje fermentacijos nustatomas 5,6 naudojant sieros rūgštį. Siekiant nustatyti tinkamiausią anglies šaltinį naudoti substratai: gliukozė, sacharozė, maltozė, fruktozė. Eksperimento metu palaikoma tokia pati terpės elementinė sudėtis, elementų kiekis keičiamas tik tuomet, kuomet nustatomos kitos optimalios sąlygos fermentacijai [4].

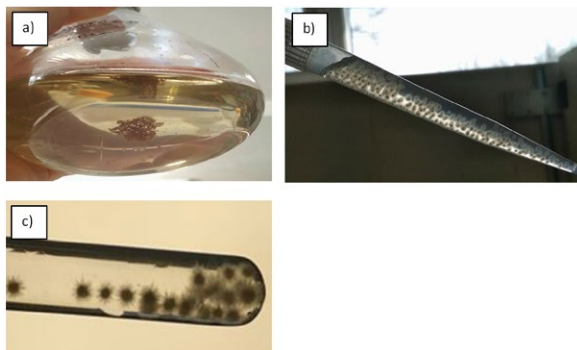
Eksperimento metu periodiškai nustatinėjami fermentacijos metabolitai ir jų kiekis. Citrinų rūgšties kiekiui nustatyti naudotas 1 ml filtruotos skystos terpės, kuri sumaišoma su 1 ml piridino ir 5ml acto anhidrido ir viskas sumaišoma mėgintuvėlyje [5]. Mėgintuvėliai su mėginiais kaitinami vandens vonioje 32 °C temperatūroje pusę valandos. Atvėsinus mėgintuvėlius tiriamieji mėginiai išmatuojami spektrofotometru. Terpėje esant citrinų rūgšties mėginyje susidaro rusvos spalvos kompleksiniai junginiai. Spalvos intensyvumas priklauso nuo citrinų rūgšties kiekio, kuris nustatomas spektrofotometriniu metodu 420 nm bangos ilgyje. Siekiant įvertinti sacharidų suvartojimą mitybinėje terpėje periodiškai buvo nustatinėjamas jų kiekis. Cukraus kiekis buvo nustatomas taip pat spektrofotometriniais metodais.

Gauti eksperimentų rodmenys patikrinti išgaunant ir išgryninant citrinų rūgštį, bei palyginant gautą kiekį su analitiniu metodu užfiksuotu citrinų rūgšties kiekiu [6].

### Rezultatai ir jų aptarimas

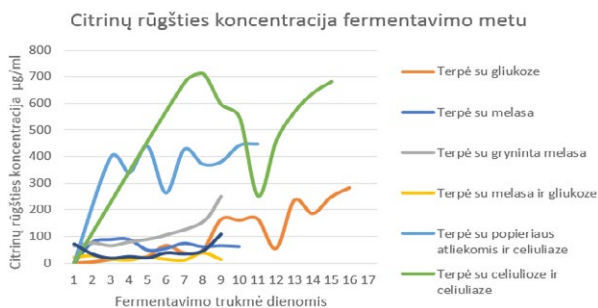
Siekiant nustatyti tinkamiausią terpę buvo išbandytos keletą ankstesniuose tyrimuose naudotų optimalių terpių sudėtys. Literatūroje [5] pateiktoje skystos fermentacijos terpėje *A.niger* augimas mažai intensyvus. Po 4 dienų grybas nesudarė micelių ir pagaminamas citrinų rūgšties kiekis buvo labai mažas. Buvo pastebėta, kad tinkama micelių granuliu struktūra yra būtina citrinų rūgšties gamybai.

Literatūroje [5] pateiktoje sintetinėje skystoje terpėje *A.niger* augo produktyviai. Sintetinėje terpėje jau po paros matėsi susiformavusios tinkamos struktūros micelės. Jos buvo sferinės formos ir maždaug 0,1-0,3 mm dydžio (žr. 1 pav.). Pagamintas produkto kiekis po 4 dienų beveik 170 kartų viršijo citrinų rūgšties kiekį pirmojoje skystoje terpėje. Tiriant alternatyvius žaliavų šaltinius buvo gautas pakankamai didelis kiekis citrinų rūgšties kuomet naudojamos pramoninės atliekos savo sudėtyje turinčios celiuliozės. Taip pat terpėje su celiuliozės turinčiomis atliekomis susidarė tinkamos formos micelių granulės.



**1 pav.**  
 Susidariusių micelių skirtingose fermentacinėse terpėse fermentacijos vaizdas po 4 dienų, b) sintetinės terpės fermentacijos vaizdas po 1 dienos, c) terpėje su celiuliozės turinčiomis pramoninėmis atliekomis susidariusios micelių granulės

Nustatinėjant tinkamiausią anglies šaltinį fermentacijai buvo naudoti skirtingi gryni anglies šaltiniai (žr. 2 pav.). Didžiausią citrinų rūgšties kiekį grybas pagamino iš terpės, kuri buvo su gliukoze (sintetinėje terpėje). Todėl, buvo nuspręsta ieškoti alternatyvių žaliavų citrinų rūgšties fermentacijai, kurios savo sudėtyje turėtų gliukozės. Alternatyviais cukraus šaltiniais buvo tirti melasa, kokoso palmių žiedų cukrus, celiuliozės turinčios popieriaus pramonės atliekos. Tyrimo metu buvo taikyti žaliavų gryninimo ir apdorojimo etapai prieš fermentaciją. Geriausi rezultatai buvo gauti terpėse, kurių sudėtyje buvo fermentais paveiktų popieriaus perdirbimo pramonės atliekų.



**2 pav.**  
 Citrinų rūgšties koncentracijos pokytis terpėse per fermentavimo laikotarpį

## Išvados

Tyrimų metu buvo nustatyta, kad *Aspergillus niger* geriausiai metabolizuoja gryną gliukozę ir polisacharidų hidrolizatus savo sudėtyje turinčius gliukozės. Potencialiais, ekonomiškai patraukliais fermentacijos žaliavos šaltiniais buvo identifikuotos atliekos savo sudėtyje turinčios celiuliozės. Taip pat pastebėta, kad kiti alternatyvūs anglies šaltiniai gali būti netinkami, jeigu savo sudėtyje turi didelius kiekius metalų divalenčių jonų. Esant šių jonų pertekliui fermentavimo terpėje nesudaro tinkamos struktūros micelių granulės ir citrinų rūgšties gamyba nevyksta. Šių micelių granulių susiformavimui reikalinga ir tinkama pH, kuri fermentacijos pradžioje turi būti

palaikoma ties 5-6. Fermentacijos metu pastebėta, kad *Aspergillus niger* geba vykdyti citrinų rūgšties sintezę esant net labai žemoms pH reikšmėms, todėl terpėje gali susikaupti dideli kiekiai produkto, kol reakcija pradeda pastebimai lėtėti.

---

### Literatūra

- [1] Max, B., José Salgado, M., Rodriguez, N., Cortes, S., Coverti, A., Dominguez, J. M. *Brazilian Journal of Microbiology*, 2010, 41 (4), 862–875.
- [2] Lingappa, K., Pramond, T., Ali, S. I. *Journal of scientific and industrial research*, 2007, 66 (8), 618–620.
- [3] Vanderberghe, L. P. S., Socol C. R., Pandey, A., Lebeault, J. M. *Brazilian archives of biology and technology*, 1999, 42, 263–276.
- [4] Shu, P., Johnson, M. J. *Journal of Bacteriology*, 1984, 56 (5), 577–585.
- [5] Chelapandi, P. *Laboratory Manual in Industrial Biotechnology*. Sheetal Printers, Jaipur. 2007. 220.
- [6] Berovic, M., Legisa, M. *Biotechnology annual review*, 2007, 13, 303–343.

G. Čižauskaitė,  
J. Bendoraitienė

*Kauno technologijos universitetas*

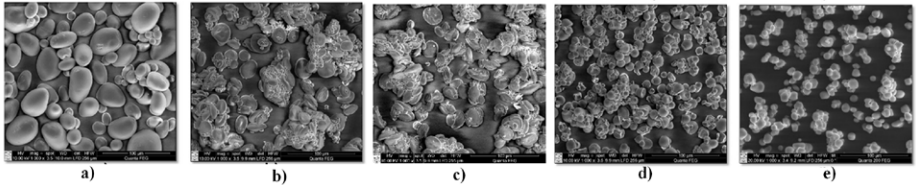
## ĮVAIRIOS BOTANINĖS KILMĖS KRAKMOLO TINKLINIMAS EPICHLORHIDRINU IR TINKLINIMO LAIPSNIO NUSTATYMO METODIKA

**Įvadas.** Polimerinės medžiagos šiuo metu yra vienos iš plačiausiai naudojamų pasaulyje, tačiau naujų sintetinių medžiagų kūrimas ir besaikis vartojimas kelia grėsmę atliekų perdirbėjams ir aplinkosaugai. Pastaruoju metu ieškoma alternatyvų – bioskaidžių medžiagų, kurios būtų pagaminamos iš atsinaujinačių žaliavų, tam puikiai tinkamas krakmolos. Tačiau norint jį vartoti tiek technikoje tiek dažnai maisto pramonėje jis modifikuojamas fizikiniais ar cheminiais metodais. Tokiu atveju galima sumažinti ar padidinti hidrofiliškumą, reguliuoti tirpumą vandenyje, padidinti kleisterių stabilumą. Krakmolą galima tinklinti naudojant plačiai paplitusį tinklinimo agentą - epichlorhidriną, tai labiausiai paplitusi reakcija, naudojama polisacharidų chemijoje. Tinklintų krakmolo darinių pritaikymo sritys labai plačios. Po krakmolo tinklinimo galima gauti visiškai netirpius, gerų mechaninių savybių, įvairios formos konstrukcijos gaminius [1-2]. Yra susiduriama su tinklinimo laipsnio nustatymo problema. Literatūroje tikslų duomenų apie tai nėra, tinklinimo laipsniui naudojamas netiesioginis tyrimo metodas – matuojant modifikuoto krakmolo ir gamtinio krakmolo kleisterių santykinę maksimalią klampą. Tačiau ji gali priklausyti nuo daugelio faktorių: krakmolo granulių dydžio, krakmolo kiekio suspensijoje ir aišku tinklinimo ar šakotumo laipsnio.

**Darbo tikslas** – įvertinti krakmolo tinklinimo epichlorhidrinu metodiką, atsižvelgiant į naudojamo krakmolo botaninę kilmę, granulių dydį ir suspensijos koncentraciją bei optimizuoti ir gebėti prognozuoti tinklinimo procesą.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** *Skirtingos botaninės kilmės krakmolo dalelių tyrimai.* Tiriamajame darbe yra naudojamas skirtingos botaninės kilmės krakmolos: bulvių, kviečių, vaškinių kviečių, tapijokos ir kukurūzų, jie tarpusavyje skiriasi savo struktūrinėmis savybėmis. Skirtingos botaninės kilmės gamtinio krakmolo tirpumo, brinkimo ir reologinėms savybėms didelę reikšmę turi dalelių dydis. Laboratorijoje buvo atliekami skirtingos botaninės kilmės dalelių dydžio tyrimai, kurie parodė, tirtu krakmolo dalelių dydį (1 pav.). Yra matyti, kad bulvių gamtinio krakmolo granulėje yra didžiausias kiekis dalelių turinčių 45,75 μm dydį. Mažiausią dalelių dydį turi kukurūzų krakmolos 15,40 μm, o kviečių, vaškinių kviečių ir tapijokos krakmolos turi atitinkamai po 23,81 μm, 21,69 μm ir 16,40 μm.

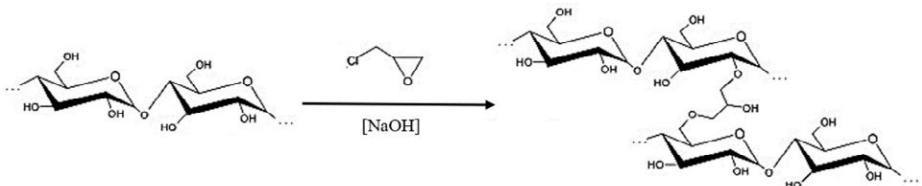




**1 pav.**

Skirtingos botaninės kilmės krakmolo: bulvių a), kviečių b), vaškinių kviečių c), tapijokos d) ir kukurūzų e) granulių skenuojančios elektroninės mikroskopijos (SEM) nuotraukos (x1000)

**Tinklinio krakmolo sintezė.** Skirtingos botaninės kilmės tinklinis krakmolas buvo gautas vykdant eterinimo reakciją su tinklinimo agentu – epichlorhidrinu (EPI), naudojant reakcijos katalizatorių – natrio hidroksidą (NaOH) (2 pav.). Krakmolo tinklinimo reakcija vyksta vandeninėje krakmolo suspensijoje. Modifikavimo reakcijos metu yra išlaikoma krakmolo granuliu struktūra, nes reakcija yra vykdoma 45 °C.



**2 pav.**

Krakmolo tinklinimo reakcija su epichlorhidrinu

Skirtingos botaninės kilmės krakmolas: bulvių, kviečių, vaškinių kviečių, tapijokos ir kukurūzų buvo tinklinamas esant skirtingiems moliniams reagentų santykiams Kr:EPI:NaOH:H<sub>2</sub>O – [1:0,0005:0,0025:10]; [1:0,00167:0,003:10]; [1:0,0055:0,007:10]; [1:0,0096:0,012:10]

**Tinklinio krakmolo tirpumas 1M KOH tirpale.** Dėl stiprių tarpmolekulinės sąveikos jėgų (vandenilinių ryšių) polisacharidai netirpsta vandenyje, ant krakmolo užpylus 1M KOH tirpalo polisacharidas lėtai brinksta ir galiausiai ištirpsta [3]. Nustačius tirpių medžiagų kiekį tirpaluose, galima įvertinti sutinkinto polisacharido dalį. Gamtinis – krakmolas pilnai 100% ištirpsta KOH tirpale, tačiau didėjant EPI koncentracijai modifikavimo mišinyje tirpumas mažėja, dėl susidariusių skersinių kovalentinių ryšių kiekio ir suformuoto tinklo tarp granuliu makromolekulių.

**Tinklinio krakmolo reologinių savybių tyrimai ir tinklinimo laipsnio nustatymas.** Naudojamo reagento EPI koncentracijos įtaka bulvių, kviečių, vaškinių kviečių, tapijokos ir kukurūzų krakmolo tinklinimui yra nustatoma iš reologinių savybių tyrimų rezultatų. Iš bandinių klampos tyrimų buvo apskaičiuojamas tinklinimo laipsnis (TL). Tinklinimo laipsnis buvo apskaičiuotas pagal formulę (1) [4].

$$\text{Tinklinimo laipsnis} = \frac{A-B}{A} \cdot 100 \%$$

čia:

A – maksimali kontrolinio krakmolo kleisterio klampa iki aušinimo, BU;

B – maksimali tinklinio krakmolo vandens suspensijos klampa iki aušinimo, BU.

Tinklinio krakmolo tinklinimo laipsnio vertės yra pateiktos (1 lent.). Didesnis tinklinimo laipsnis paprastai lemia mažesnę granuliu brinkimą, tirpumą. Rezultatuose galima pastebėti, kad krakmolo tinklinimo laipsnis padidėjo didėjant skersinius ryšius sudarančiam reagento kiekiui (EPI). Taigi tinklinimo laipsnis yra tiesiogiai proporcingas kovalentinių ryšių skaičiui, formuojant skersinį ryšį krakmolo makromolekulėse, kurie susidaro reakcijos metu su tinklinimo agentu.

**1 lentelė.** Tinklinio krakmolo 8 % koncentracijos suspensijos tinklinimo laipsnis

Krakmolas	Reagentų molinis santykis [Kr:EPI:NaOH:H <sub>2</sub> O] (mol)			
	1:0,0005:0,0025:10	1:0,00167:0,003:10	1:0,0055:0,007:10	1:0,0096:0,012:10
Tinklinimo laipsnis (%)				
Bulvių	31,4±3,4	11,9±2,2	99,8±0,2	99,8±0,2
Kviečių	10,1±2,1	10,4±3,6	69,5±1,5	97,8±1,2
Vaškinių kviečių	-*	7,1±3,8	81,2±1,3	95,66±1,7
Tapijokos	15,1±2,1	37,9±3,1	27,5±3,8	36,5±3,2
Kukurūzų	24,5±1,9	-*	88,4±1,6	98,7±1,1

-\* - vertės yra gaunamos naudojant tinklinimo laipsnio nustatymo metodą, kuris netinkamas apskaičiuoti mažam tinklinimo laipsniui.

## Padėka

Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0074 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

## Literatūra

- [1] Ali S. Ayoub and Syed S. H. Rizvi *An Overview on the Technology of Cross-linking of Starch for nonfood applications*. (2009). Journal of Plastic Film and Sheeting. Department of Food Science, Stocking Hall, Ithaca, New York 14 853, USA, p 26-27.
- [2] Alcazar Alay S.C., Meireles M.A. *Physicochemical properties, modifications and applications of starches from different botanical sources*. Food Sci. Technol, Campinas (2015).
- [3] Hyun-Seok Kim and Kerry C. Huber. Alkaline Dissolution of Starch Facilitated by Microwave Heating for Analysis by Size - Exclusion Chromatography (2006). Journal of Agricultural and Food Chemistry, . 9664-9669p.
- [4] Bendoraitienė J., Lekniute – Kyzike E, Rutkaite R *Biodegradation of cross-linked and cationic starches* (2018), International Journal of Biological Macromolecules 119, 345-351.

Ž. Gaižauskaitė,  
D. Žadeikė

Kauno technologijos universitetas

## PIENO RŪGŠTIES BAKTERIJŲ FUNKCIONALIZAVIMAS RYŽIŲ MALIMO ATLIEKŲ IR UOGŲ IŠSPAUDŲ MODELINĖSE SISTEMOSE

Bioaktyvios imobilizavimo sistemos yra nauja technologijos koncepcija, padedanti funkcinį maisto produktų gamyboje, kuriuose bioaktyvūs komponentai yra imobilizavimo medžiagoje arba yra imobilizuojami, norint sukurti saugų ir pasižymintį konkrečiomis savybėmis maisto produktą. Turtingos vertingais biologiškai veikliaisiais junginiais [1, 2] vaisių/uogų (V/U) išspaudos, galėtų būti panaudotos funkcionaliųjų produktų gamybai, tai ne tik sumažintų tokių atliekų srautus, bet ir prisidėtų prie taršos pramoninėmis atliekomis mažinimo problemos sprendimo. Sukurtos imobilizavimo sistemos užtikrintų mikroorganizmų funkcionalumą ir stabilumą, išlaikant antimikrobines savybes produkte. Tačiau produktų, turtingų augalų polisacharidais, gamybą riboja nepakankama sudėtinių komponentų (baltymų, polisacharidų) dispersija dėl mažo tirpumo. Ultragarso (UG) taikymas baltymų ir polisacharidų dispersijos apdorojimui galėtų būti inovatyvi strategija, pagerinanti tokių sistemų struktūrą. V/U veikliųjų junginių bei antimikrobinėmis savybėmis pasižymintį mikroorganizmų simbiotinių ryšių derinimas, kuriant naujas maisto technologijas, būtų pažangi priemonė, kuri padėtų užtikrinti maisto saugą, ir būtų pritaikoma su tuo susijusių rizikų valdymui.

Projekto tikslas – ištirti antimikrobinį pieno rūgšties bakterijų (PRB) funkcionalumą ir stabilumą ryžių malimo atliekų ir uogų išspaudų modelinėse sistemose.

**Objektai.** Eksperimentui atlikti naudota ryžių sėlenų (RS) frakcija (200 μm), pasižyminti didžiausiu virškinimui atsparaus krakmolo (VAK) kiekiu (baltymai 12,2 %, 8,56 %VAK, 13,13 % drėgnis). Bruknių uogų išspaudų (BR) milteliai (drėgmė 3,88 %, pektinas 1,4 %), gauti iš LAMMC Sodininkystės ir daržininkystės instituto. Ryžių sėlenų fermentacijai naudotos pieno rūgšties bakterijos (PRB): *Pediococcus pentosaceus* LUHS100, *Lactobacillus brevis* LUHS173, *Pediococcus acidilactici* LUHS236, *Lactobacillus paracasei* LUHS244, atrinktos pagal gyvybingumą ryžių sėlenų terpėje. Indikatoriai mikroorganizmai *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli*, *Bacillus cereus*, *Salmonella typhimurium*, *Staphylococcus aureus* naudoti PRB antimikrobiniam aktyvumui įvertinti.

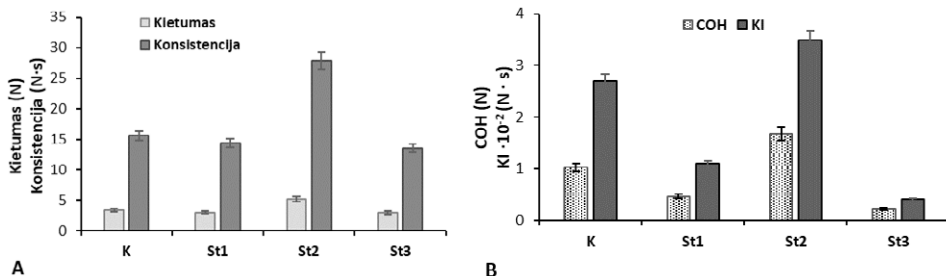
**Metodai.** RS-BR gelių tekstūra vertinta akustiniu prietaisu ir tekstūros analizatoriumi TA.XT plus. Bendras mikroorganizmų skaičius mėginiuose nustatytas pagal LST EN ISO 6887-1:2017. Pieno rūgšties bakterijų (PRB) metabolizmo produktų antimikrobinis aktyvumas prieš patogeninius mikroorganizmus vertintas difuzijos į agarą metodu. Vertinant bruknių priedo įtaką PRB gyvybingumui, į ryžių sėlenas (RS)

pridėta skirtingi bruknių išspaudų (BR) kiekiai (10–50 %) nuo bendros SM masės). Eksperimentui atlikti naudotos didžiausiu antimikrobinu aktyvumu pasižyminčios PRB padermės: *P. pentosaceus* LUHS100 ir *L. brevis* LUHS173. Visais atvejais fermentacija vykdyta 60 val., laikant mėginius 35°C anaerobinėmis sąlygomis. Prieš fermentaciją ir po 6, 12, 24, 36, 48 ir 60 val. imti mėginiai PRB skaičiui nustatyti. Kiekvienas mėginys analizuotas du kartus.

**PRB ląstelių imobilizavimas.** Imobilizavimui RS ir BR masė (10 g) sumaišyta su steriliu vandeniu (santykis 1:4), ir apdorota UG (850 kHz; 2 W/cm<sup>2</sup>; 40 °C; 30 min), po to išlaikyta 24 h 4°C. Po išlaikymo, į 30°C masę įmaišyta PRB ląstelių suspensija, kad masėje ląstelių kiekis sudarytų 10<sup>8</sup> KSV/g. Imobilizavimui, mėginiai laikyti 6 h 35 °C vandens vonioje purtant, po to 30 h 35 °C stacionariai. Masė stabilizuota, įmaišant skirtingus stingdiklius: agarą (10 %), Na alginatą (10 %), ksantano gumą (5 %), alginato ir ksantano mišinį (1:1). Mėginiai struktūrizuoti, išlaikant 24 h 4°C temperatūroje.

### Rezultatai ir jų aptarimas

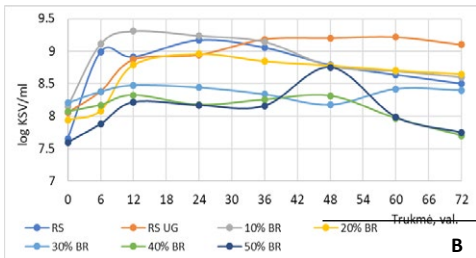
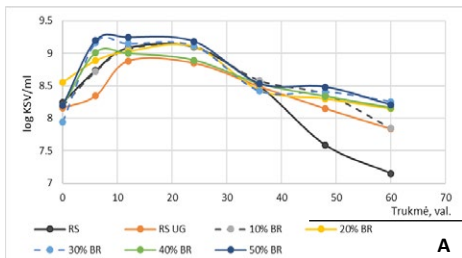
Tyrimas parodė, kad stabiliausia tekstūra gauta (1 pav.), naudojant natrio alginatą: šios sistemos kietumo ir konsistencijos vertės nustatytos didžiausios (atitinkamai 5.2 N ir 27,8 N×s), o mažiausiomis vertėmis pasižymėjo agaras ir ksantano mėginiai (atitinkamai vidutiniškai 3 N ir 13,9 N×s) (1 pav. A). Su alginatu ruošta masė pasižymėjo didžiausiomis KI ir kohezijos vertėmis (atitinkamai 1,68×10<sup>-2</sup> N×s ir 3.5 N), lyginant su kitais stingdikliais (vidutiniškai 0,75×10<sup>-2</sup> N ir 0.34 N) (1 pav. B). Pagal gautus rezultatus nustatyta, kad geriausi šios masės stingimo rezultatai gauti, naudojant natrio alginatą kaip stabilizatorių.



#### 1 pav.

RS-BR modelinės sistemos su skirtingais stingdikliais kietumas ir konsistencija (A) bei kohezijos (COH) ir klampos indekso (KI) (B) vertės. St1 – agaras, St2 – alginatas ir St3 – ksantanas.

Vertinant BR įtaka antimikrobinų PRB gyvybingumui, nustatyta, kad RS terpėje *L. brevis* intensyviai dauginosi pirmąsias 6 val. (eksponentinė fazė), o nuo 6 iki 24 h laikotarpiu pasiektas didžiausias ląstelių skaičius (stacionari augimo fazė) (2 pav. A). Tiek neapdorotų, tiek apdorotų UG RS terpėje 24 h periodu *L. brevis* ląstelių (KSV) skaičius padidėjo iki 9,1 log KVS/ml, lyginant su pradiniu kiekiu (8,21 log KVS/ml). Naudojant *P. pentosaceus* padermę, nustatytas KVS padidėjimas pirmąsias 6 h, kuris išliko stabilus RS UG terpėje, o didžiausios KVS vertės (9,1–9,2 log KVS/ml) pasiektos 12–36 h periodu (2 pav. B).

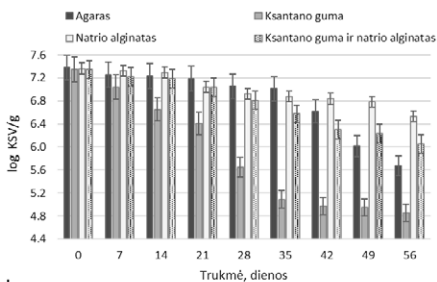
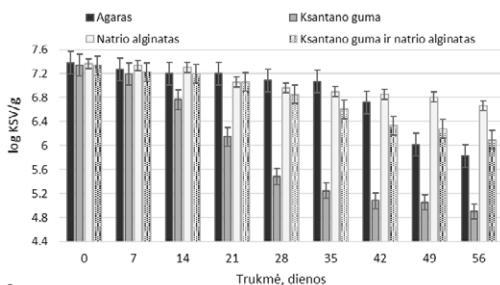


**2 pav.**

*L. brevis* (A) ir *P. pentosaceus* (B) augimo kreivės RS terpėje su BR priedu.

Rezultatai rodo, kad apdorotų UG RS terpė padidino PRB stabilumą, sulėtinant ląstelių žuvimą, lyginant su neapdorotų UG RS terpe. Analizuojant BR įtaką PRB gyvybingumui, nustatyta, kad didžiausias ląstelių skaičius (9,25 log KSV/ml) pasiektas po 12 h inkubacijos RS terpėje su 50 % BR priedu, tuo tarpu RS terpėje šių bakterijų KVS nustatytas 0,37 log mažesnis (2 pav. A). Naudojant *P. pentosaceus*, 10 % BR priedas reikšmingai padidino KVS, fermentuojant UG apdorotą RS terpę (iki 9,25 log KVS/ml po 12 h), lyginant su pradiniu kiekiu (7,95 log KVS/ml), o naudojant 20 % BR priedą, po 36 h fermentacijos LUHS100 ląstelių skaičius padidėjo 0,907 log. Nustatyta, kad >30 % BR priedas slopino LUHS100 dauginimąsi (KVS vidutiniškai 0,917 log mažesnis) (2 pav. B).

Vertinant LUHS173 gyvybingumą laikymo metu, nustatyta, kad KVS sumažėjo geliuose su agaru ir alginatu, atitinkamai 0,11–1,56 log ir 0,03–0,69 log, laikant 4°C, ir 0,12–1,71 log, bei 0,04–0,83 log, laikant 18°C. Tokie būdu, visu tyrimo periodu aukštesnė laikymo temperatūra 30,1 % sumažino mikroorganizmų gyvybingų ląstelių skaičių. 42–56 parų laikymo periodu reikšmingų skirtumų ( $p>0,05$ ) tarp KVS reikšmių, laikant gelius skirtingose temperatūrose, nenustatyta visais atvejais (5 pav.). Didžiausias vidutinis KVS sumažėjimas nustatytas po 14-28 laikymo parų gelio su ksantano atveju (0,64–1,77 log); po 28 parų gelio su ksantano ir alginato mišiniu (0,51 log), ir po 42 dienų gelių su agaru ir alginatu atveju (0,71 ir 0,52 log).



**5 pav.**

Imobilizuotų *L. brevis* LUHS173 gyvybingų ląstelių skaičiaus pokyčiai RS-BR geliuose su skirtingais stabilizatoriais, laikant 4°C (A) ir 18°C (B) temperatūrose.

Apibendrinant gautus rezultatus, galima teigti, kad didžiausias PRB stabilumas buvo išlaikytas 35 dienų laikotarpiu imobilizavimo sistemose, stabilizuotose agaru ir alginatu, gyvybingų ląstelių skaičius šiose sistemose sumažėjo vidutiniškai 6,2 % (5 pav.).

RS-BR modelinė sistema, struktūrizuota aukšto intensyvumo UG yra tinkama antimikrobinų *L. brevis* ląstelių imobilizavimui, jų antimikrobinio aktyvumo padidimui ir stabilumo išlaikymui: stabilizuotuose natrio alginatu RS-BR geliuose po 8 savaičių išlaikymo 4°C temperatūroje, antimikrobinio poveikiu pasižyminčių *L. brevis* ląstelių skaičius nustatytas 6,67 KVS/g, kuris atitinka Pasaulio sveikatos organizacijos rekomendacijas probiotiniams produktams [3].

---

### Literatūra

- [1] Lohani, U.C., Muthukumarappan, K. *Innovative Food Science and Emerging Technologies*, 2016, 35, 29-35.
- [2] Aadil, R. M., et al. *International Journal of Food Science & Technology*, 2015, 5, 1144-1150.
- [3] Ouwehand, A.C., Salminen, S., Isolauri, E. Springer, Dordrecht, 2002, 279-289.

R. Glušinskaitė,  
K. Baltakys

Kauno technologijos universitetas

## KALIO IR ALIUMINIO JONŲ ĮTAKA DVIBAZIŲ KALCIO HIDROSILIKATŲ KRISTALIZACIJAI

**Įvadas.** Šiuo metu, dėl gamybos specifikos ir augančių produkcijos kiekių, rišamųjų medžiagų pramonė susiduria su aplinkosauginėmis problemomis. Viena iš jų – didelis suvartojamos energijos kiekis: cemento pramonė sunaudoja net 12-15 % visos pramonės sunaudojamos energijos [1, 2]. Be to, šio sektoriaus veikla susijusi su milžiniška atmosferos tarša CO<sub>2</sub> dujomis (1 t PC/ 0,9 t CO<sub>2</sub>). Vienas iš efektyviausių šių problemų sprendimo būdų yra alternatyvių cementų, tokių kaip belitinis cementas, kūrimas. Šioje rišamojoje medžiagoje, priešingai nei tradiciniame portlandcemytyje (PC), pagrindinis klinkerio mineralas yra ne alitas (C<sub>3</sub>S), o mažesnio baziškumo kalcio silikatas – belitas (C<sub>2</sub>S), kurio gamyba pasižymi mažesnėmis energijos sąnaudomis ir CO<sub>2</sub> emisija [1, 3, 4]. Šiuo metu vis didesnę praktinę reikšmę rišamųjų medžiagų chemijoje įgauna dvibaziai kalcio hidrosilikatai (hilebranditas,  $\gamma$ -C<sub>2</sub>S ir  $\alpha$ -C<sub>2</sub>S hidratas), kurie gali būti panaudoti belitinių cementų sintezėje [5]. Didžiausias mokslinis dėmesys skiriamas  $\alpha$ -C<sub>2</sub>S hidratui, nes jo pagrindu yra sukurta aplinkai draugiška rišamoji medžiaga – „Celitement“ [6]. Šis junginys nėra surastas kaip gamtinis mineralas ir susidaro tik betono gaminiuose arba hidroterminėmis sąlygomis apdorojant kalcio ir silicio turinčius mišinius. Šio junginio susidarymą tiek stochiometrinės, tiek nestochiometrinės sudėties mišiniuose tyrė daug mokslininkų, tačiau yra mažai duomenų apie šarminės prigimties priedų įtaką jo kristalizacijai. **Tiriamąojo darbo tikslas** – ištirti K<sup>+</sup> jonų ir kompleksinio (K<sup>+</sup> + Al<sup>3+</sup>) priedo įtaką dvibazių kalcio hidrosilikatų kristalizacijai CaO-SiO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O sistemoje.

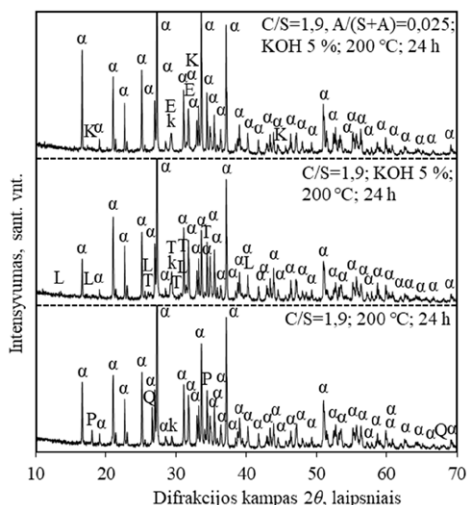
**Metodinė dalis.** Darbe naudotos medžiagos: kalcio hidroksidas (Ca(OH)<sub>2</sub>) („Honeywell“, Vokietija); kvarcinis smėlis (SiO<sub>2</sub>) („Anykščių kvarcas“, Lietuva); aliuminio hidroksidas (Al(OH)<sub>3</sub>) („Honeywell“, Vokietija); kalio hidroksidas (KOH) („Eurochemicals“, Lietuva).

Iš papildomai apdorotų žaliavų paruošti pradiniai mišiniai, kurių moliniai santykiai atitiko CaO/SiO<sub>2</sub> = 1,9 arba CaO/(SiO<sub>2</sub>+Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) = 1,9 ir Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/(SiO<sub>2</sub>+Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) = 0,025. Kartu paruošti skirtingų koncentracijų (3, 5 ir 7 %) KOH tirpalai. Hidroterminė sintezė vykdyta specialiuose 25 ml talpos PTFE induose, kuriuose 2 g homogenizuoto mišinio užpilti 20 ml distiliuoto vandens arba KOH tirpalo (skystos ir kietos terpių santykis suspensijoje (V/K) lygus 10). Suspensijos apdorotos hidrotermiškai „Parr instruments“ autoklave jų nemaišant, esant 4, 8, 16, 24, 48 ir 72 valandų izoterminio išlaikymo trukmei, 200 °C temperatūrai bei 10 atmosferų argono dujų viršslėgiui. Gauti sintezės produktai praplauti acetonu bei išdžiovinti. Optimaliausiomis sąlygomis gauti produktai termiškai apdoroti aukštatemperatūroje krosnyje MTC-hightemp 100-1000 °C temperatūrų intervale.

**Rezultatai ir jų aptarimas.** Remiantis rentgeno spindulių difrakcine analize nustatyta, kad hidroterminės sintezės metu, CaO-SiO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O sistemoje (C/S=1,9) jau po 4 valandų susidarė dvibazis kalcio hidrosilikatas – α-C<sub>2</sub>S hidratas (1 pav.), kuris išliko stabilus visomis tirtomis eksperimentinėmis sąlygomis (iki 72 h), o jo kiekis lygus ~60 %. Nepriklausomai nuo hidroterminio apdorojimo trukmės nesureagavo pradiniai junginiai – portlanditas (~7,4-9,4 %) ir kvarcas (~5-14 %).

Sekančiame tyrimų etape ištirta, kad K<sup>+</sup> jonai teigiamai veikė hidroterminių reakcijų eigą, nes jau pirmosiomis apdorojimo valandomis sparčiai reagavo pradiniai junginiai – portlandito neaptikta po 4h, kvarco – po 8 h. Be to, šarminis priedas spartino tikslinio produkto α-C<sub>2</sub>S hidrato kristalizaciją – susidarė ~60 % pastarojo junginio. Tuo tarpu, CaO-SiO<sub>2</sub>-K<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O sistemoje sureagavus kvarcui bei pradinių mišinių apdorojimo trukmę prailginus iki 24-72 h, šalia α-C<sub>2</sub>S hidrato susidarė grynoje sistemoje neaptikti įvairaus baziškumo junginiai – trabzonitas (Ca<sub>6</sub>Si<sub>3</sub>O<sub>10</sub>·2H<sub>2</sub>O), kilalaitas (Ca<sub>6,3</sub>(H<sub>0,7</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>) (1 pav.). Ištirta, kad priedo koncentracijos didinimas nuo 3 iki 5 % neturėjo ženklios įtakos sintezės produktų mineralinei sudėčiai: sureagavus žaliavoms vyraujančiu junginiu išliko α-C<sub>2</sub>S hidratas, o sintezės eigoje formavosi trabzonitas ir kilalaitas, kurių kiekiai visomis tirtomis sąlygomis išliko nedideli.

Tuo tarpu CaO-SiO<sub>2</sub>-K<sub>2</sub>O-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O sistemoje pakito pradinį žaliavų reaktumas sintezės pradžioje. Šiuo atveju, veikiant K<sup>+</sup> ir Al<sup>3+</sup> jonams, kvarcas sureagavo per 4 h, tačiau portlanditas – tik per 16 h. Kaip ir tikėtasi, sintezės produktuose vyravo dvibazis α-C<sub>2</sub>S hidratas, tačiau, esant skirtingomis izoterminio išlaikymo trukmėmis, jo kiekis siekė tik 40 %, o kartu susidarė skirtingo baziškumo junginiai: kalcio silikatai – C<sub>8</sub>S<sub>5</sub> (Ca<sub>8</sub>Si<sub>5</sub>O<sub>18</sub>) ir kilchoanitas (Ca<sub>6</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>14</sub>) bei anksčiau identifikuotas trabzonitas. Pažymėtina, kad kompleksinis priedas (KOH+Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) skatino aliuminio komponentą turinčio kalcio hidroaluminato – katoito (Ca<sub>3</sub>Al<sub>2,8</sub>O<sub>2,55</sub>(OH)<sub>9,45</sub>) kristalizaciją (1 pav.). Šis junginys išliko stabilus visomis eksperimentinėmis sintezės sąlygomis. Gauti rezultatai buvo patvirtinti vienalaikės terminės ir infraraudonojo spektro molekulinės absorbcinės spektrinės analizės metodais.

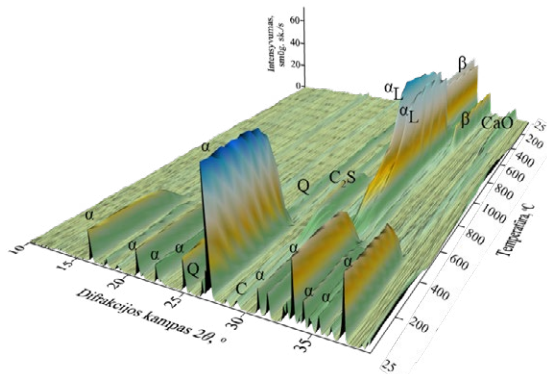


**1 pav.**  
Hidroterminės sintezės produktų RSDA kreivės. Čia: α – α-C<sub>2</sub>S hidratas, Q – kvarcas, k – kalcio karboatas, P – portlanditas, L – kilalaitas; T – trabzonitas, E – C<sub>8</sub>S<sub>5</sub>; K – katoitas



Optimaliausiomis sintezės sąlygomis gautus bandinius apdorojus termiškai nustatyta, kad naudoti priedai neturėjo ženklios įtakos  $\alpha$ - $C_2S$  hidrato skilimui bei kalcio silikatų susidarymui 100-1000 °C temperatūros intervale. Iširta, kad hidrauliškai aktyvių  $C_2S$  atmainų gavimui palankiausias degimo sąlygos yra: norint gauti  $x$ - $C_2S$  ir kt. – 600-800 Regular,  $\alpha'_1$ - $C_2S$  – 750-1000 Regular,  $\beta$ - $C_2S$  gaunamas degimo produktus (750-1000 Regular) vėsinant ~600-500 Regular temperatūroje (2 pav.).

**2 pav.**  
 $CaO-SiO_2-H_2O$  sistemos produktų RSDA kreivės 25-1000 °C temperatūros intervale. Čia:  $\alpha$  –  $\alpha$ - $C_2SH$ ; Q – kvarcas;  $C_2S$  – dikalcio silikatų mišinys;  $\alpha_1$  –  $\alpha'_1$ - $C_2S$ ;  $\beta$  –  $\beta$ - $C_2S$ ; CaO – kalcio oksidas



## Literatūra

- [1] Gendvilas, R.,  *$\alpha$ - $C_2SH$  sintezė, savybės ir panaudojimas hidraulinei rišamajai medžiagai gauti: Daktaro disertacija*. Kauno technologijos universitetas. 2015.
- [2] Ali, M. B., Saidur, R., Hossain, M. S. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2011, 15, p. 2252–2261.
- [3] Termkhajornkit, P., Morin, V., Casabonne, J., Walenta, G., Gartner, E. *13th International Congress on the Chemistry of Cement*, 2011.
- [4] Amato, I. *Nature*, 2013, 494, p. 300–301.
- [5] Iljina, A., Baltakys, K., Eišinas, A. *Medžiagotyra*, 2015, 21, p. 123–128.
- [6] Stemmermann, P., Beuchle, G., Garbev, K., Schweike, U. *Celitement®-A new sustainable hydraulic binder based on calcium hydrosilicates*.

**D. Jurevičiūtė<sup>1</sup>,  
P. Kaškonas<sup>2</sup>,  
A. Maruška<sup>1</sup>, V. Tilvikienė<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Vytauto Didžiojo universitetas,  
Instrumentinės analizės  
atviros priemonės centras

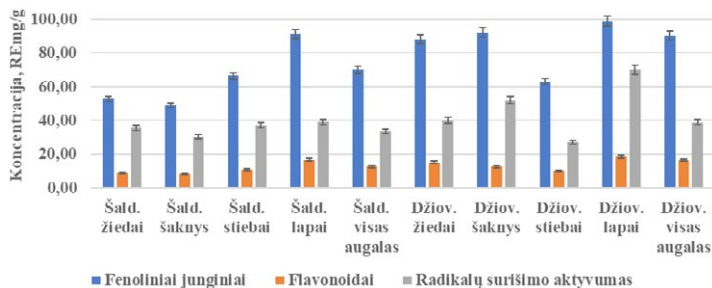
<sup>2</sup> Kauno Technologijos universitetas

<sup>3</sup> Lietuvos agrarinių ir miškų mokslų centras

## KORELIACIJOS TARP PAVĖSINIO KIEČIO (ARTEMISIA DUBIA WALL.) BIOLOGIŠKAI VEIKLIŲ JUNGINIŲ IR JŲ AKTYVUMO ĮVERTINIMAS

Didėjantis susidomėjimas atsinaujinančiais energijos šaltiniais skatina mokslininkus atlikti vis daugiau tyrimų su energetiniais augalais, gebančiais kaupti biomasę. Atliekami tyrimai atitinka darnaus vystymosi ir tikslingo žaliavų panaudojimo strategijas ir yra tiesiogiai susiję su biotechnologijų vystymu [1, 2]. Energetiniai augalai yra naudojami biokuro gamybai arba tiesioginiam energijos išgavimui, pavyzdžiui, šildymui, todėl energetinių augalų kaupiamos naudingos biologiškai aktyvios medžiagos lieka nepanaudojamos. Dėl galimybės visapusiškai panaudoti tokius augalus tyrimams buvo pasirinktas pavėsinis kietis (*Artemisia dubia* Wall.) – retai Lietuvoje sutinkama augalų rūšis iš *Artemisia* genties, kuri visame pasaulyje žinoma dėl didelės gausos fitocheminių junginių ir jų farmakologinių savybių [3].

Naudojant spektrofotometrinius tyrimo metodus buvo įvertintas bendras fenolinių junginių kiekis (naudojant Folin-Ciocalteu reagentą), bendras flavonoidų kiekis (naudojant  $AlCl_3$  reagentą) bei nustatytas radikalų surišimo aktyvumas (naudojant DPPH reagentą). Spektrofotometriniai tyrimai atlikti su šaldytos ir džiovintos žaliavos ekstraktais. Ekstraktams buvo naudojamos skirtingos augalo dalys – šaknys, stiebai, žiedai, lapai. Nustatyta, kad didžiausiu fenolinių junginių kiekiu pasižymėjo džiovintos žaliavos lapų ekstraktas 98,76 mg RE/g sausos žaliavos, kai 0,1 proc. < SSN < 3,3 proc. (n = 3), didžiausias bendras flavonoidų kiekis nustatytas džiovintos žaliavos lapų ekstraktuose 18,62 mg RE/g sausos žaliavos, kai 0,4 proc. < SSN < 4,9 proc. (n = 3), o didžiausias radikalų aktyvumas nustatytas džiovintos žaliavos lapų ekstraktuose 87,44 mg RE/g sausos žaliavos, kai 0,2 proc. < SSN < 2,5 proc. (n = 3). Gauti rezultatai pateikti 1 paveiksle.



**1 pav.**  
Pavėsinio kiečio *A. dubia*  
bendras fenolinių jungi-  
nių, flavonoidų kiekis ir  
radikalų surišimo aktyvu-  
mas mg RE/g.

Tiek šaldytos, tiek džiovintos žaliavos lapų ekstraktai išsiskyrė dideliu bendru fenolinių junginių kiekiu. Mažiausiu bendru fenolinių junginių kiekiu pasižymėjo stiebų ekstraktai, tačiau šiuo atveju šaldytos žaliavos stiebų ekstraktas buvo stipresnis nei džiovintos. Džiovintos žaliavos viso augalo dalių ir atskirų dalių, lapų, žiedų ir šaknų, ekstraktai kaupia didesnius kiekius fenolinių junginių bei pasižymi didesniu radikalų surišimo aktyvumu nei šaldytos žaliavos.

Dujų chromatografijai buvo naudota šaldyta ir džiovinta augalinė žaliava (žiedai, šaknys, stiebai, lapai bei visas augalas). Naudota kietafazė mikroekstrakcija. Atlikus dujų chromatografijos – masių spektrometrijos analizę su pavėsinio kiečio bandiniais, iš viso buvo rasta daugiau kaip 50 lakiųjų junginių. Didžiausią dalį rastų junginių sudarė trans-sabineno hidratas,  $\alpha$ -pinenas, eukaliptolis, borneolis, verbenonas,  $\alpha$ -terpineolis, germakrenas D (tik šaldytoje žaliavoje, išskyrus stiebuose – čia jis neaptiktas), verbenonas, p-cimenas, 4-terpeneolis ir  $\beta$ -kariofilenas, kamparas, kampeinas, umbelulonas, chrizantenonas. Gautas SSN neviršija 12 proc. (n = 3). Šaldytos augalinės žaliavos bandiniuose daugiausia identifiukuota trans-sabineno hidrato (iki 24,98 proc.),  $\alpha$ -pineno (iki 7,94 proc.), eukaliptolio (iki 10,18 proc.), p-cimeno (iki 4,70 proc.), kamparo (23,91 proc.), verbenono (iki 18,42 proc.),  $\alpha$ -terpineolio (iki 4,38 proc.),  $\beta$ -kariofileno (iki 2,59 proc.), borneolio (iki 7,34 proc.), germakrenas D (iki 3,09 proc. nustatytas tik šaldytoje žaliavoje, tačiau stiebuose neaptiktas), 4-terpeneolis (iki 3,80 proc.), kampenas (16,95 proc. – tik šaknyse), umbelulono (iki 1,49 proc.), cis-sabineno hidrato (iki 4,14 proc.), chrizantenonas (iki 3,02 proc.) bei  $\beta$ -9-cedrenonas (15,55 proc – tik šaknyse, septynioliktą minutę). Džiovintos augalinės žaliavos bandiniuose daugiausia identifiukuota trans-sabineno hidrato (iki 25,50 proc.),  $\alpha$ -pineno (iki 2,35 proc.), eukaliptolio (iki 9,97 proc.), p-cimeno (iki 8,06 proc.), kamparo (23,88 proc.), verbenono (iki 19,48 proc.),  $\alpha$ -terpineolio (iki 4,69 proc.), borneolio (iki 5,21 proc), 4-terpeneolis (iki 4,01 proc.), kampenas (11,18 proc. – tik šaknyse), cis-sabineno hidrato (iki 3,75 proc.), chrizantenonas (iki 3,27 proc.) bei  $\beta$ -9-cedrenonas (14,75 proc – tik šaknyse, septynioliktą minutę).

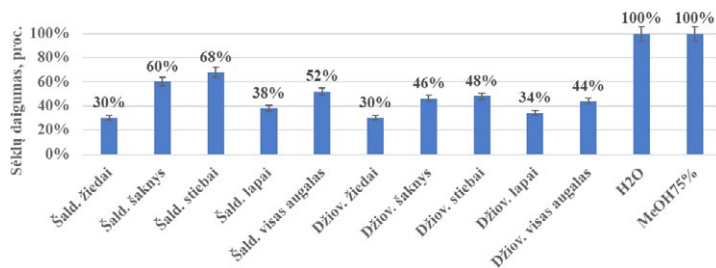
Insekticidinių savybių tyrimams buvo naudotos baltagalvės didžiagraižės (*Leucanthemum maximum*), užsikrėtusios amarais (*Aphidoidea*). Eksperimentas buvo atliekamas trijuose eksperimentiniuose loveliuose ir buvo naudojama po 5 augalus kiekviename lovelyje. Lapai buvo užkrėsti amarais. Pirmame lovelyje lapai buvo purškiami vandeniu, antrame – pavėsinio kiečio ekstraktu, trečiame – komerciniu insekticidu. Praėjus 3 ir 7 dienoms po nupurškimo skaičiuojami gyvi ir mirę amarai (žiūrėti 1 lentelėje).

**1 lentelė.** 7 dienų vabzdžių stebėjimas ant *Leucanthemum maximum* po purškimo paruoštais insekticidais.

Baltagalvės didžiagraižės ( <i>Leucanthemum maximum</i> )	Dienos po purškimo			Žuvę vabzdžiai (%)
	0	3	7	
	Vabzdžių skaičius (vidurkis)			
H <sub>2</sub> O	116	104	91	21
<i>A. dubia</i>	115	67	23	80
Komercinis insekticidas	110	50	8	92

Nustatyta, kad purškiant tiek pavėsinio kiečio ekstraktu, tiek komerciniu insekticidu po savaitės gaunamas žymus vabzdžių sumažėjimas. Pavėsinio kiečio ekstraktas paveikė 80 proc. vabzdžių.

Alelopatinis tyrimas buvo atliktas norint nustatyti, kurios augalo dalies metanoliniai ekstraktai pasižymi stipriausiu alelopatiniu poveikiu. Tyrimui buvo naudojamos šaldytos ir džiovintos augalinės žaliavos 75 proc. metanoliniai ekstraktai iš atskirų augalo dalių (žiedų, stiebų, lapų, šaknų) ir viso augalo ekstraktai. Tyrimui buvo pasirinktos sėjamiųjų salotų *Lactuca sativa* L. sėklos. Kontroliniuose bandiniuose sėklų daigumas buvo 100 proc. Santykinis standartinis nuokrypis mažiau 6 proc. Eksperimentas kartotas 2 kartus. Tyrimo rezultatai pateikti 2 paveiksle.



**2 pav.**  
*Lactuca sativa* L. sėklų daigumas (STD < 6 proc., n = 2) veikiant 75 proc. metanoliniais ekstraktais. Kaip kontrolė naudotas 75 proc. metanolis bei bidistiliuotas vanduo.

Nustatyta, kad stipriausiu alelopatiniu poveikiu pasižymėjo pavėsinio kiekio žiedų ekstraktai. Tiek šaldytos, tiek džiovintos žaliavos žiedų ekstraktai pasižymėjo 30 proc. sėklų daigumu. Silpniausiai veikė stiebų ekstraktai: šaldytos žaliavos – 68 proc. daigumu, džiovintos – 48 proc.

## Padėka

Dėkoju Lietuvos Mokslų tarybai už mokslinio studentų projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0066 finansavimą.

## Literatūra

- [1] Spychalski, G., Mańkowski, J., ir Kołodziej, J. The Role of the Institute of Natural Fibres and Medicinal Plants in Shaping the Bioeconomy Sector in Poland, 2015, *Economic and Regional Studies*, 8(1), 19–34.
- [2] Taylor, G., Allwright, M. R., Smith, H. K., Polle, A., Wildhagen, H., Hertzberg, M., ... Morgante, M. *Perennial Biomass Crops for a Resource Constrained World Preliminary announcement*, 2015, <https://doi.org/10.1007/978-3-319-44530-4>
- [3] Zeb, S., Ali, A., Zaman, W., Zeb, S., Ali, S., Ullah, F. ir Shakoore, A. Pharmacology, taxonomy and phytochemistry of the genus *Artemisia* specifically from Pakistan: a comprehensive review. *Pharmaceutical and Biomedical Research*, 2018 4(18), 1–12. <https://doi.org/10.18502/pbr.v4i4.543>

**I. Knabikaitė,  
A. Eisinas**

*Kauno technologijos universitetas*

# CR<sup>3+</sup> JONŲ ĮTAKA KALCIO HIDROSILIKATŲ KRISTALIZACIJOS PROCESAMS BEI GAUTŲ PRODUKTŲ ADSORBCINĖMS SAVYBĖMS

## **Įvadas**

Kalcio hidrosilikatai (KHS), tai – silicio rūgšties druskos, kurios yra vienos pagrindinių rišančiųjų junginių, susidarančių kietėjant cementiniam akmeniui, gaminant silikatines plytas ar dujų silikatą ir nulemiančių jų eksploatacines savybes [1-3]. Tačiau, dėl itin didelio paviršiaus ploto, gebos sorbuoti įvairių metalų jonus bei kitų struktūros ypatybių, plataus pritaikomumo ir ekonomiško, pastarieji junginiai vis dažniau naudojami adsorbentų ar katalizatorių gamyboje.

Dažniausiai KHS susidaro gamtoje, tačiau juos įmanoma susintetinti ir laboratorijoje: hidratuojant kalcio silikatų turinčius gaminius arba hidrotermiškai apdorojant CaO ir SiO<sub>2</sub> komponentų turinčias žaliavas [4]. Keičiant hidroterminio apdorojimo trukmę ir temperatūrą, mišinio sudėtį, žaliavų savitąjį paviršiaus plotą ir prigimtį, maišymo intensyvumą, įvairius sintezėje naudojamus priedus ir t. t., galima keisti-KHS susidarymo seką, junginių kristališkumą, dalelių dydį, savitąjį paviršiaus plotą ir kt. savybes.

Tai itin svarbu sintetinant KHS, kurie gali būti naudojami svarbiems technologiniams procesams: adsorbicijai vandenvalyje (sorbuojant sunkiųjų metalų jonus) [5, 6] bei kaip katalizatoriai įvairiose cheminėse reakcijose (pavyzdžiui, acetaldehido gamyboje, glicerolio reforminge, metileno mėlynojo skaidyme) [7-9]. Galimybė keisti hidroterminės sintezės sąlygas bei naudoti įvairius priedus, sudaro prielaidą hidroterminį apdorojimą pritaikyti specialios paskirties adsorbentų ar katalizatorių sintezei. Be to, hidroterminės sintezės metu: sočiųjų vandens garų aplinkoje (aukšta temperatūra ir slėgis) gali reaguoti įprastomis sąlygomis termodinamiškai stabilūs komponentai.

Todėl tikėtina, kad Cr<sup>3+</sup> jonai bus įterpiami hidroterminės sintezės metu ir dar labiau padidins kalcio hidrosilikatų adsorbicijos gebą tos pačios rūšies metalų adsorbicijai iš vandeninių tirpalų, kas leistų juos panaudoti kaip adsorbentus.

## **Tyrimo objektas ir metodika**

Naudotos medžiagos:

- kalcio oksidas gautas išdegus regentinį Ca(OH)<sub>2</sub> („Honeywell“, Vokietija) 1 h 550 °C temperatūroje ir sumalus jį 30 s 600 aps./min greičiu vibraciniame diskiniame malūne „Pulserisette 9“ bei persijotas per sietą, kurio akučių dydis 80 μm. CaO savitasis paviršiaus plotas S<sub>pav</sub> = 1890 m<sup>2</sup>/kg; CaO<sub>laisvas</sub> = 93 %;
- amorfinis SiO<sub>2</sub>·nH<sub>2</sub>O („Einecs“ Rusija) maltas 3 min 900 aps./min greičiu vibraciniame diskiniame malūne „Pulserisette 9“ ir persijotas per sietą, kurio akučių dydis 80 μm. SiO<sub>2</sub> savitasis paviršiaus plotas S<sub>pav</sub> = 2073 m<sup>2</sup>/kg; kaitmenys – 6,39 %;

- chromo nitrato tirpalas ( $c = 1, 5, 10, 15 \text{ g Cr}^{3+}/\text{dm}^3$ ) pagamintas ištirpinus distiliuotame vandenyje  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  granules („Eurochemiclas“, grynumas 99 %). Susintetinti junginiai, priklausomai nuo  $\text{Cr}^{3+}$  koncentracijos žymimi: SIN0, SIN1, SIN5, SIN10, SIN15.

Tyrimų metodika:

- pradinių mišinių paruošimas. Ruošiant žaliavų mišinį sintezei reikiami  $\text{CaO}$  ir  $\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  kiekiai ( $\text{CaO}/\text{SiO}_2 = 1,5$ ) bendrame inde homogenizuoti įrenginiu „TURBULA TYPE 2 F“. Mišinys homogenizuotas 45 min 49 aps./min greičiu;
- hidroterminė sintezė. Homogenizuotas pradinis mišinys užpiltas distiliuotu vandeniu arba chromo nitrato druskos tirpalu, kad suspensijose skystos terpės ir kietųjų medžiagų santykis V/K būtų lygus 10. Sintezė vykdyta 25 mL talpos PTFE induose, sudėtuose į autoklavą „Parr instruments“ (Vokietija), kai sočiųjų vandens garų temperatūra  $200 \text{ }^\circ\text{C}$ , viršslėgis 10 barų (argono dujų), o izoterminio išlaikymo trukmė – 1 h. Sintezės metu sočiųjų vandens garų temperatūra buvo pasiekta per 2 h. Gauti produktai nufiltruoti, praplauti acetonu, kad mažiau karbonizuotųsi, džiovinti maždaug  $80 \text{ }^\circ\text{C}$  temperatūroje 24 h. Tuomet sutrinti grūstuvėje ir persijoti per sietą, kurio akučių dydis  $80 \mu\text{m}$ ;
- rentgeno spindulių difrakcinė analizė atlikta difraktometru „Bruker AXS“ (Vokietija). Naudota spinduliuotė –  $\text{CuK}\alpha$ , filtras – Ni; detektoriaus judėjimo žingsnis –  $6^\circ/\text{min}$ , anodinė įtampa –  $U_a = 40 \text{ kV}$ , srovės stipris  $I = 40 \text{ mA}$ , skenavimo tipas – 2 teta/teta. Rentgeno difrakcinės spinduliuotės analizės skenavimo intervalas –  $2\theta = 3\text{--}70^\circ$ ;
- viena laikė terminė analizė atlikta „LINSEIS STA PT1000“ (Vokietija) terminiu analizatoriumi. DSK – TGA parametrai: naudota S tipo termopora, temperatūros kėlimo greitis –  $15 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$ , temperatūros intervalas –  $30\text{--}950 \text{ }^\circ\text{C}$ , etalonas – tuščias Pt tiglio, atmosfera krosnyje – oras;
- $\text{Cr}^{3+}$  katijonų koncentracija tiriamuose tirpaluose nustatyta absorbcinės spektrinės analizės būdu „Perkin Elmen“ (Vokietija) firmos prietaisu „AASIN“;
- medžiagų terminiam patvarumui ištirti, susintetinti junginiai išdegti aukšta-temperatūrinėse krosnyse „Nobetherm Model L5/11“, temperatūros intervalas  $25\text{--}1200 \text{ }^\circ\text{C}$ , temperatūros didinimo greitis –  $8,3 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$ ;
- bandinių savitojo paviršiaus plotas nustatytas Brunauerio, Emmeto ir Tellerio (BET) metodu. Matavimai atlikti „Kelvin 1042 Sorptometer (Costech Instruments)“ prietaisu, naudojant azoto adsorbcijos izoterme  $77 \text{ K}$  temperatūros aplinkoje;
- adsorbcija vykdyta termostatuojamame adsorberyje „Grant SUB 14“  $25 \text{ }^\circ\text{C}$  temperatūroje, nuolat nemišant  $1 \text{ g Cr}^{3+}/\text{l}$  koncentracijos 50 ml tirpalus. Adsorbcijos trukmė – 1, 5, 45, 60 min. Į kiekvieną tirpalą įberta 0,5 g adsorbento.

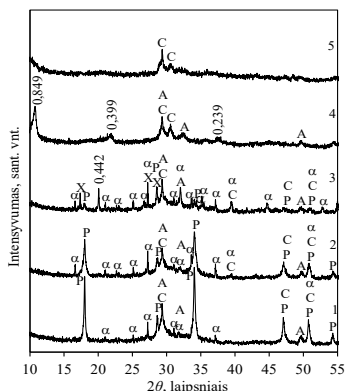
## Rezultatai ir jų aptarimas



Norint nustatyti  $\text{Cr}^{3+}$  jonų įtaką  $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$  sistemoje susidarančių junginių struktūrai, naudoti skirtingos koncentracijos  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  tirpalai (1, 5, 10, 15 g  $\text{Cr}^{3+}/\text{l}$ ). RSDA ištirta, kad po 1 h hidroterminio apdorojimo gana aktyviai reaguoja pradinės žaliavos,

nes  $\text{Cr}^{3+}$  koncentracijai didėjant iki 5 g/l, susidaro didelio kristališkumo ir įvairovės KHS (C-S-H (I) ir / arba C-S-H (II),  $\alpha\text{-C}_2\text{SH}$ , ksonotlitas) (žr. 1 pav.). Tuo tarpu, didesnėse koncentracijų srityse (10-15 g/l) vyrauja amorfinės struktūros junginiai ir kalцитas.

**1 pav.**  
Sintezės produktų RSDA kreivės, kurie susidarė  $\text{CaO-SiO}_2\text{-Cr}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$  sistemoje, kai izoterminio išlaikymo trukmė 1h, 200 °C temperatūroje, o  $\text{Cr}^{3+}$  koncentracija, g/l: 1 – SIN0; 2 – SIN1; 3 – SIN5; 4 – SIN10; 5 – SIN15.  
Čia: A – CSH (I) ir/ar CSH (II);  $\alpha$  –  $\alpha\text{-C}_2\text{SH}$ ; C – kalцитas; P – portlanditas; X – ksonotlitas



Sistemoje neidentifikuoti chromo turintys junginiai. Tačiau AAS analizės dėka nustatyta, kad skystoje terpėje po sintezės  $\text{Cr}^{3+}$  jonų koncentracija neviršija 0,1 %. Tad galima teigti, jog visi chromo jonai geba terptis į sintezės metu susidarančių junginių struktūrą.

Savitojo paviršiaus ploto tyrimai parodė, kad didėjant  $\text{Cr}^{3+}$  koncentracijai, didėjo susintintų bandinių savitojo paviršiaus ploto bei porų tūrio vertės (SIN5 à SIN15). Visgi, bandinius termiškai apdorojus 500 °C temperatūroje, SIN15-500 bandinio savitasis paviršiaus plotas sumažėjo net 1,6 karto. Manoma, kad degimo metu susidarė naujos kristalinės fazės, kurios mažino bandinių porų mikrostruktūrą.

Sekančiame etape tirtos bandinių adsorbcinės savybės. Dėl didžiausio savitojo paviršiaus ploto, didžiausia adsorbcine geba pasižymėjo SIN15 bandinys. Nustatyta, kad jau po pirmosios minutės adsorbcijos daugiau nei puse – 78 % (77,91 mg  $\text{Cr}^{3+}$ /g) tirpale esančių jonų buvo adsorbuoti SIN15 struktūros. Ilginant adsorbcijos proceso trukmę, pastebėta, kad  $\text{Cr}^{3+}$  jonų koncentracija tirpaluose ženkliai mažėjo ir adsorbcijos talpa po 60 min proceso SIN15 adsorbentui išaugo iki 86 %.

## Literatūra

- [1] Martusevičius, M., Kaminskas, R., Mituzas, A. J. *Rišamųjų medžiagų cheminė technologija*. Technologija, Kaunas. 2002. 208.
- [2] Zhao, Y., Zhang, Y., Chen, T., Bao S. *Construction and Buiding Materials*. 2012, 28, 450-455.
- [3] Narayanan, K., Ramamurthy K. *Cement and Concrete Research*. 2000, 10, 457-464.
- [4] Gendvilas, R.  *$\alpha\text{-C}_2\text{SH}$  sintezė, savybės ir naudojimas hidraulinei rišamajai medžiagai gauti*. Technologija, Kaunas. 2015. 114.
- [5] Guangxia, Q., Xuefei, L., Lei, L., Chao, Y., Yinglong, S., Jianbo C., Jian, C *Chemical Engineering Journal*. 2015, 279, 777-787.
- [6] Coleman, N. J., Brassington, D. S., Raza, A., Lee, W. E. *Environmental Technology*. 2006, 27, 1089-1099.
- [7] Segawa A., Nakashima, A., Nojima, R., Ypshida, N., Okamoto, M. *Industrial and Engineerting Chemistry Research*. 2018, 57, 11852-11857.
- [8] Lee, H. C., Siew, K. W., Gimibun, J., Cheng C. K. *Chemical Engineering Journal*. 2014, 255, 245-256.
- [9] Shao, N., Tang, S., Liu, Z., Li, L. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. 2018, 6, 14926-14935

**E. Ragauskaitė,  
D. Čižeikienė,  
R. Maždžierienė**

*Kauno technologijos universitetas*

## **BIOTECHNOLOGINIŲ PRIEMONIŲ TAIKYMAS IŠRŪGŲ BALTYMŲ PRODUKTŲ SAVYBIŲ MODIFIKAVIMUI**

Didėjantis vartotojų poreikis sveikesniems maisto produktams, pastaruoju metu skatina mokslininkus skirti vis didesnę dėmesį antioksidaciniu aktyvumu ir antimikrobinu poveikiu pasižyminčių natūralių medžiagų paieškai, jų savybių tyrimams bei panaudojimo galimybės maisto pramonėje, ypač kuriant naujus maisto produktus. Šio mokslinio tyrimo tikslas buvo ištirti išrūgų baltymų hidrolizės ir fermentacijos produktų savybes bei baltymų modifikavimo galimybes.

Išrūgų baltymų produktai buvo hidrolizuoti skirtingais fermentais (pepsinu P7000, proteaze iš *Bacillus amyloliquefaciens* P1236 ir pankreatinu P1750) ir nustatyta temperatūros (30, 40 ir 50 °C), terpės pH vertės (veikiant pepsinu pH buvo 2, 3 ir 4, o veikiant proteaze iš *B. amyloliquefaciens* ir pankreatinu pH buvo 6,5, 7,5 ir 8,5) ir hidrolizės trukmės (po 0, 20, 40 ir 60 min.) įtaka baltymų hidrolizės efektyvumui bei susidariusių baltymų produktų antioksidaciniam (DPPH [1], ABTS [2], metodais) ir antimikrobiniam aktyvumui (difuzijos į agarą metodu). Atlikta išrūgų baltymų produktų fermentacija skirtingomis pieno rūgšties bakterijomis (PRB): *Lactobacillus acidophilus* DSM 20079, *Lactobacillus plantarum* DSM 20174, *Bifidobacterium bifidum* DSM 20082 ir nustatyta jų įtaka išrūgų baltymų kiekiui terpėje, antioksidaciniam išrūgų baltymų produktų aktyvumui. Nustatytas PRB skaičius [3] po išrūgų baltymų fermentacijos ir proteazinis [4] jų aktyvumas 32 val. laikotarpyje. Įvertinta fermentacijos ir hidrolizės įtaka išrūgų baltymų pokyčiams vertikaliaja vienkrypte natrio dodecilsulfato elektroforeze [5] (Clever Scientific Ltd, Didžioji Britanija). Tiriamųjų mėginių baltymams identifikuoti buvo naudojamas standartinis baltymų tirpalas SigmaMarker S8445 (Merck, Vokietija). Ištirtos išrūgų baltymų modifikavimo galimybės, pagal Ali [6], junginiais (galo rūgštimi, m-cymenu ir karvakoliu) bei ištirtos modifikuotų baltymų-fenolinių junginių antioksidacinės savybės DPPH ir ABTS laisvųjų radikalų surišimo gebos metodu bei nustatytas jų antimikrobinis aktyvumas.

Didžiausias išrūgų baltymų hidrolizės efektyvumas, antioksidacinis ir antimikrobinis aktyvumas buvo esant 40 °C temperatūrai, hidrolizei vykstant 40 min., esant terpės pH vertei 7,5 pankreatinui bei proteazei ir pH 3 – pepsinui. DPPH laisvųjų radikalų surišimo metodu nustatyta, kad žemesnė hidrolizės temperatūra slopina išrūgų baltymų hidrolizės produktų, gautų paveikus pepsinu, proteaze iš *B. amyloliquefaciens* ir pankreatinu, antioksidacinį aktyvumą, atitinkamai 70, 50 ir 64 %, hidrolizės trukmė – atitinkamai 11 %, 78 %, 56 %, o pH vertė – atitinkamai 84, 72 ir 66 %. Panašios tendencijos gautos ir ABTS laisvųjų radikalų surišimo metodu. Optimaliomis (40 min., 40 °C,

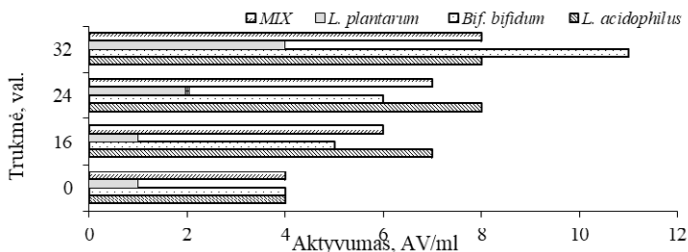


pH 7,5 (pankreatinui bei proteazei) ir pH 3 (pepsinui) sąlygomis hidrolizės produktai, gauti veikiant pepsinu ir pankreatinu geriausiai slopino *Salmonella typhimurium* bei *Staphylococcus aureus* patogeninių bakterijų augimą, slopinimo zona atitinkamai buvo  $17\pm 0,7$ ,  $16\pm 0,7$  mm (veikiant pepsinu) ir  $18\pm 0$ ,  $18\pm 0,7$  mm (veikiant pankreatinu). Išrūgų baltymų hidrolizės produktai veikiant proteazei pasižymėjo stipriu antimikrobinu poveikiu slopinant *Escherichia coli* (didžiausia slopinimo zona buvo  $18\pm 0,7$  mm).

Išrūgų baltymų produktų fermentacijos metu PRB skaičius didėjo ir po fermentacijos, po 32 val., su *L. acidophilus* DSM 20079, *L. plantarum* DSM 20174, *Bif. bifidum* DSM 20082 buvo ribose 7,4-7,9  $\log_{10}$  KSV/ml.

Proteazių aktyvumas išrūgų baltymų produktų terpėje 32 val. fermentacijos metu didėjo (žr. 1 pav.). Po 32 val. fermentacijos didžiausias proteazių aktyvumas buvo nustatytas išrūgų baltymų produktuose su *Bif. bifidum* DSM 20082. Mažiausias proteazių aktyvumas buvo mėginyje su *L. plantarum* DSM 20174, nors proteazių aktyvumas terpėje su šiomis pienarūgštėmis po 32 val. fermentacijos padidėjo 4 kartus lyginant su pradiniu aktyvumu.

**1 pav.**  
Trukmės įtaka proteazių aktyvumui išrūgų fermentacijos terpėje, naudojant įvairias PRB ir jų mišinį

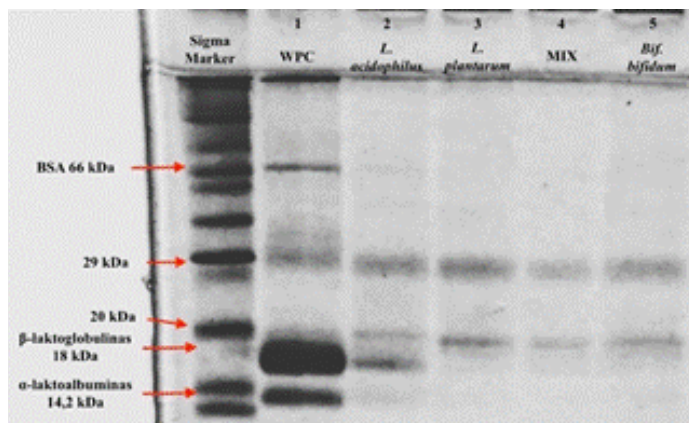


Po fermentacijos (32 val.) išrūgų baltymų mėginių antioksidacinis aktyvumas padidėjo lyginant su aktyvumu prieš fermentaciją. Fermentuotų išrūgų su *L. acidophilus* DSM 20079, *L. plantarum* DSM 20174, *Bif. bifidum* DSM 20082 ir PRB mišiniu antioksidacinis aktyvumas, nustatytas DPPH laisvųjų radikalų surišimo metodu, padidėjo, atitinkamai 92, 81, 70 ir 79 % lyginant su pradiniu aktyvumu (prieš fermentaciją). Fermentuotų išrūgų su *L. acidophilus* DSM 20079, *L. plantarum* DSM 20174, *Bif. bifidum* DSM 20082 ir PRB mišiniu antioksidacinis aktyvumas, nustatytas ABTS laisvųjų radikalų surišimo metodu, taip pat padidėjo 32 val. laikotarpyje, atitinkamai 89, 97, 93 ir 85 % lyginant su pradiniu aktyvumu (prieš fermentaciją).

Fermentuotų išrūgų baltymų antimikrobinis aktyvumas slopinant patogenines bakterijas didėjo ilgiau fermentuojant. Didžiausias išrūgų baltymų fermentacijos su *Bif. bifidum* DSM 20082 produktų antimikrobinis aktyvumas pasireiškė slopinant *St. aureus* bakterijas (slopinimo zonų skersmuo agarų terpėje buvo iki  $26\pm 1,4$  mm) ir išrūgų baltymų, fermentuotų su *L. acidophilus* DSM 20079 bakterijomis, *E. coli* bakterijų augimo slopinimas (slopinimo zonų skersmuo agarų terpėje buvo iki  $23\pm 0,7$  mm). Silpniausiai išrūgų baltymų produktai, susidarę po fermentacijos slopino *S. typhimurium* (slopinimo zonų skersmuo agarų terpėje kito nuo  $12\pm 0,7$  iki  $18\pm 1,4$  mm).

Fermentacijos įvairiomis PRB įtaka išrūgų baltymų pokyčiams buvo įvertinta atliekant vertikaliąją vienkryptę natrio dodecilsulfato elektroforezę (žr. 2 pav.). Nustatyta, kad visos tirtos PRB padermės suardė jaučio serumo albumino (BSA, 66 kDa) ir  $\alpha$ -laktoalbuminą (14,2 kDa). Fermentacijos metu PRB nepilnai suhidrolizavo baltymus, kurių molekulinė masė yra 29 kDa ir 20 kDa – gelyje matomi neryškūs baltymų pėdsakai. *L.*

*acidophilus* DSM 20079 (2 takelis) nevisiškai suskaidė  $\beta$ -laktoglobuliną (~18 kDa), nors Pescuma ir kt. [7] tyrimo rezultatai rodo, kad *L. acidophilus* visiškai suskaidė  $\alpha$ -laktalbuminą. Rezultatų skirtumus galėjo nulemti PRB padermė ar fermentacijos sąlygos.



**2 pav.**  
Išrūgų baltymų (po 32 val. fermentacijos), apdorotų *L. acidophilus* DSM 20079, *L. plantarum* DSM 20174, *Bif. bifidum* DSM 20082 bei PRB mišiniu (santykis 1:1:1), vienkryptė natrio dodecilsulfato elektroforezė

Išrūgų baltymų modifikavimas galo rūgštimi, karvakroliu ir m-cymenu, padidino antioksidacinį vidutiniškai iki 12 kartų. Fenoliniais junginiais modifikuoti išrūgų baltymai buvo antimikrobiškai aktyvesni prieš patogenines bakterijas nei nmodifikuoti išrūgų baltymai.

## Literatūra

- [1] Brand-Williams, W., Cuvelier, M.E., Berset, C. Use of a free radical method to evaluate antioxidant activity. *Lwt - Food Science and Technology*, 1995, 28(1), 25-30.
- [2] Rajurkar, N.S., Hande, S. M. Estimation of phytochemical content and antioxidant activity of some selected traditional indian medicinal plants. *Indian Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2011. 73 (2), 146-151.
- [3] Šarkinas, A. *Bendrosios mikrobiologijos laboratoriniai darbai*. Technologija, Kaunas, 2013. 72.
- [4] Cupp-Enyard, C. Sigma's non-specific protease activity assay-casein as a substrate. *Journal of Visualized Experiments*, 2008, 17(19), 1-3.
- [5] Bagdonienė, L., Bendikienė, V., kadziauskas, J. ir kt. *Biochemijos laboratoriniai darbai*. Vilniaus universiteto leidykla, Vilnius. 2006. 154.
- [6] Ali, M., Elsharkawy, M.M. Characterization of whey protein isolate covalently modified with phenolic compounds 1: antioxidant and antiviral activities. *Journal of Food and Dairy Science*, 2018, 9(12), 385-393.
- [7] Pescuma, M., Hebert, E.M., Rabesona, H. et al. Proteolytic action of *Lactobacillus delbrueckii* subsp. *bulgaricus* CRL 656 reduces antigenic response to bovine  $\beta$ -lactoglobulin. *Food Chemistry*, 2011, 127(2), 487-492.

Projektas bendrai finansuotas iš Europos socialinio fondo lėšų (projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0035) pagal dotacijos sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).



Kuriame  
Lietuvos ateitį  
2014-2020 metų  
Europos Sąjungos  
fondų investicijų  
veikslių programa

**A. Rastenienė,  
J. Sereikaitė**

*Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas*

## **PEDIOCINO NANO/ MIKROKAPSULIAVIMO TYRIMAS**

Bakteriocinai – antimikrobiniai peptidai, produkuojami mikroorganizmų, turinčių GRAS statusą – sulaukia vis daugiau dėmesio maisto saugumo užtikrinimo srityje. Vienas iš tokių bakteriocinų yra pediocinas, išskiriamas Gram-teigiamų *Pediococcus* genties bakterijų [2, 3]. Pediocinas yra jautrus aplinkos poveikiui ir gali prarasti savo antimikrobinį aktyvumą sąveikaudamas su maisto komponentais ar dėl proteolitinių fermentų poveikio. Nano/mikrokapsuliuojimas galėtų padėti išlaikyti šio peptidinės kilmės junginio gyvavimo laiką.

Šiame darbe atlikti antimikrobinio peptido iš *Pediococcus acidilactici* JEM-1 nano/mikrokapsuliuojimo tyrimai. Pirmiausia pediocinas buvo gryninamas iš bakterijų kultivavimo terpės sorbcijos-desorbcijos ir SP-sefarozės jonų mainų chromatografijos metodais. Pediocinu užkrautos nano/mikrodalelės sintetintos jį kompleksuojant su chitooligosacharidais. Šie junginiai pasirinkti siekiant gauti sinergistinį efektą, nes chitooligosacharidai pasižymi ne tik antimikrobiniumi, bet ir priešvėžiniu, priešuždegiminiu bei antioksidaciniu aktyvumu [1]. Visgi kapiliarinės zonų elektroforezės metodu įvertinus įkapsuliuojimo efektyvumą nustatyta, kad jis yra žemas (iki 33,5 %) net esant 10 kartų didesnei chitooligosacharidų koncentracijai. Išmatavus zeta-potencialą skirtingose pH reikšmėse matyti, kad jis kinta nedaug lyginant su chitooligosacharidų zeta potencialu. Gautų nano/mikrodalelių užkrautų pediocinu polidispersiškumas taip pat yra didelis. Gauti rezultatai rodo, kad pediocino-chitooligosacharidų kompleksavimasis esant pH 4–6 vyksta silpnai. Planuojant eksperimentus buvo tikimasi, kad kompleksavimui svarbią įtaką turės hidrofobinė sąveika dėl stipriai hidrofobinių pediocino N-galų [2]. Vis dėlto elektrostatinės atostūmio jėgos tarp chitooligosacharidų –NH<sub>2</sub> ir kationinės prigimties pediocino yra stipresnės ir lemia silpną šių junginių kompleksavimąsi.

**Padėka:** Dėkojame dr. E. Servienei, dr. R. Gruškienei ir R. Stanevičienei už pagalbą atliekant eksperimentus.

---

### **Literatūra**

- [1] Liaqat, F., Eltem, R. *Carbohydrate polymers*, 2018, 184, 243–259.
- [2] Porto, M. C. W., Kuniyoshi, T. M., Azevedo, P. O. S., Vitolo, M., Oliveira, R. P. S.. *Biotechnology Advances*, 2017, 35, 361–374.
- [3] Rios Colombo, N. S., Chalón, M. C., Navarro, S. A., Bellomio, A. *Current Genetics*, 2018, 64, 345–351.

**Ž. Takulinskas,  
R. Šiaučiušas**

*Kauno technologijos universitetas*

## **RIŠAMOSIOS MEDŽIAGOS IŠ $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH SINTEZĖ IR KIETĖJIMAS CO<sub>2</sub> APLINKOJE**

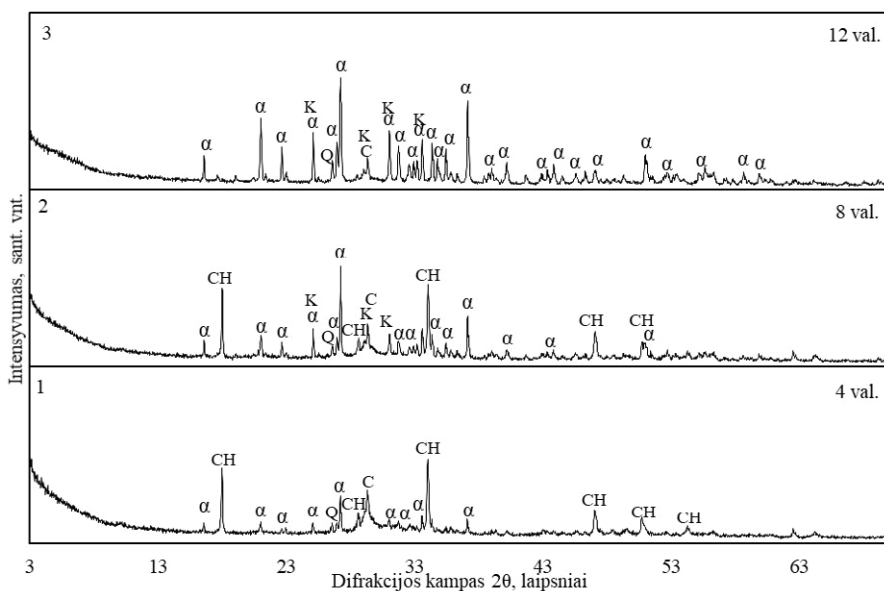
Portlandcementis – plačiausiai naudojama hidraulinė rišamoji medžiaga. Iš portlandcemenčio gamyklų į aplinką patenka apie 5 proc. pasaulio pramonės išmetamų šiltnamio efektą sukeliančių CO<sub>2</sub> dujų ir šis kiekis vis didėja [1]. Dėl šios priežasties mokslininkai intensyviai ieško būdų kaip pakeisti portlandcemenčio gamybą, jog į aplinką būtų išskiriama kuo mažiau dujų. Vienas iš variantų yra hidroterminė kalcio hidrosilikatų sintezė. Žinoma, kad hidroterminiu būdu ne aukštesnėje kaip 200 °C temperatūroje galima susintetinti dvibazį kalcio hidrosilikatą –  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH. Nors šis junginys nepasižymi cementuojančiomis savybėmis, tačiau jis didina gaminių ilgaamžiškumą ir atsparumą šalčiui, kadangi kalcio hidrosilikatas lėtai karbonizuoja, o kietėjimo metu bandinių stiprumas didėja. Šio **projekto tikslas** - iš gamtinių žaliavų susintetinti dvibazį kalcio hidrosilikatą  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH ir iš jo bei smėlio mišinių pagaminti CO<sub>2</sub> aplinkoje kietėjantį betoną.

Hidroterminė sintezė vykdyta maišomose ir nemaišomose suspensijose. Homogenizuoti pradiniai mišiniai užpilti distiliuotu vandeniu, kad suspensijų vandens ir kietųjų medžiagų santykis V/K būtų lygus 10. Sintezė vykdyta nemaišant suspensijos, kai sočiųjų vandens garų temperatūra 200 °C ir 220 °C, o izoterminio išlaikymo trukmė – 4; 8; 24; 72 val. Maišomose suspensijose, kai sočiųjų vandens garų temperatūra 200 °C ir 220 °C, o izoterminio išlaikymo trukmė – 4; 8; 12; 16; 24; 48 val. Abiejose suspensijose izoterminio išlaikymo temperatūra buvo pasiekta per 2 val. Gauti sintezės produktai nufiltruoti Biuchnerio piltuvu, džiovinti 100 °C temperatūroje 24 val. ir persijoti per sietą, kurio akučių dydis 80  $\mu$ m.

Pirma buvo atliekamos **nemaišomos suspensijos** sintezės. Iš trepelio ir kalkių gaunamų kalcio oksido ir silicio dioksido molinio CaO/SiO<sub>2</sub> santykio  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH sintezei vykdyti buvo pasirinkti 1,5; 1,75; 2 ir 2,5. Sintezę vykdant 4 val. pastarasis junginys nesusidarė. Gautame produkte, visų C/S santykių spektre dominavo portlanditas. Didėjant mišinių moliniams santykiams taip pat didėja portlandido smalių intensyvumas, kitų žymesnių pokyčių nepastebėta. Ilgėjant izoterminio išlaikymo trukmei iki 8 val., gauti rezultatai parodė, kad duomenys yra beveik identiški į sintezės kuri vykdyta 4 valandas. Skiriasi tik gautos portlandito difrakcinių smalių intensyvumas, kuris yra neženkliai didesnis.  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH nepavyko aptikti ir po 24 val. Sintezę išlaikant 72 val., rezultatai parodė pirmuosius žymesnius pokyčius. Slenkant į didesnių pradinų medžiagų molinių santykių pusę susidarė nauji sintezės metu susidariusių kalcio silikatų pėdsakai. Tačiau čia taip pat  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH gauti nepavyko.

Norint išsiaiškinti ar iš tiriamųjų žaliavų (trepelio ir kalkių) mišinio visgi galima susintetinti  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH nemišomoje suspensijoje, padidinta sintezės temperatūra iki 220 °C (kadangi pastarojo junginio sintezė pagerėja keliant temperatūrą) [2]. Rezultatai parodė, kad tik didėjant moliniam santykiui (nuo C/S = 1,75) pradeda formuotis  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH.  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH smailių intensyvumas palaipsniui auga ir savo piką pasiekia kai C/S = 2. Kadangi  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH tarp gautų produktų nėra pagrindinis dominuojantis junginys, toliau vykdyti sintezę nemišomoje suspensijoje nėra tikslinga.

Atlikti **maišomos suspensijos** sintezę buvo pasirinktas trepelio ir kalkių mišinio molinis santykis CaO/SiO<sub>2</sub> lygus 2, kadangi, šiame santykiyje, nemišomoje suspensijoje  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH susidarymo rezultatai buvo geriausi. Sintezės produktų rezultatai, kurie pateikti 1 paveiksle parodė, kad 200 °C temperatūroje kai izoterminio išlaikymo trukmė 4 val. (1 pav. 1 kreivė) vyrauja  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH bei portlandintas. Sintezę pratęsus iki 12 (1 pav. 3 kreivė) valandų matomas visiškas  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH junginio dominavimas. Tolimesni sintezės rezultatai parodė, kad toliau didinti izoterminio išlaikymo trukmę nėra tikslinga. Reakcijos metu nežymiai padidėjo  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH pagrindinių smailių intensyvumas, kilhoanito smailės išlieka stabilios – neidentifikuojamas jų kiekio padidėjimas.



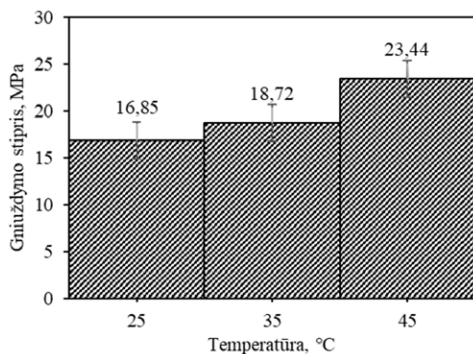
**1 pav.**

*Hidroterminės sintezės produktų, esant 200 °C temperatūrai, kai pradinių mišinių molinis santykis C/S = 2 RSDA kreivės esant skirtingoms izoterminio išlaikymo trukmėms. Žymenys: CH – portlanditas, C – kalcitas, K – kilhoanitas, α –  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH*

Pakėlus sintezės temperatūrą iki 220 °C gautos difraktogramos parodė, kad procesą vykdant 4 val  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH smailių intensyvumas didesnis negu 200 °C temperatūroje, tačiau taip pat identifikuojamas ir portlandintas bei kilhoanitas. Sintezę tęsiant iki 12 val. ryškių pokyčių neįžvelgiama – neženkliai padidėja  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH pagrindinės smailės intensyvumas. Tačiau atsižvelgiant į ekonomiškai parankesnį rezultatą nuspręsta, kad tolimesniems rišamosios medžiagos tyrimams prekursorių, t.y.,  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH junginį reikia sintetinti 200 °C temperatūroje izotermiškai išlaikant 12 val.

Kitame tyrimo etape siekiant įvertinti sintezės produkto **mechanines savybes**, jo perspektyvas bei tinkamumą rišamosioms medžiagoms gaminti, buvo nustatytas suformuotų bandinių stipris gniuždant. Pirmiausia nustatytas optimalus vandens kiekis – matavimai atlikti su 24 valandas karbonizuotais bandiniais 25 °C temperatūroje, kuriuose vandens ir rišamosios medžiagos kiekis mišinyje yra skirtingas, atitinkamai  $V/K = 0,2; 0,25; 0,3; 0,35$ . Rezultatai, kurie parodė, kad mažiausias nustatytas stipris gniuždant yra 12,51 MPa ir jis būdingas bandiniams, kurių  $V/K = 0,2$ . Su didesniu vandens ir rišamosios medžiagos santykiu stiprio gniuždant vertė išaugo. Didžiausias rezultatų padidėjimas užfiksuotas bandiniams, kurių  $V/K = 0,3$  – stipris gniuždant pasiekia 16,85 MPa.

Žinoma, kad kalcio silikatų karbonizacijos procesas paspartėja didinant reakcijos terpės temperatūrą [3]. Siekiant nustatyti, kaip temperatūros didinimas įtakoja rišamosios medžiagos fizikines-mechanines savybes bandiniai buvo sukietinti  $CO_2$  aplinkoje, kurios temperatūra kito nuo 25 °C iki 45 °C. Pasirinkti optimalaus drėgnio ( $V/K = 0,3$ ) mišiniai kietinant 24 val. Duomenys (2 pav.) parodė teigiamą temperatūros įtaką bandinių stiprumui – ją didinant, stipris gniuždant taip pat auga ir sudaro: prie 25 °C – 16,85 MPa, prie 35 °C – 18,72 MPa, o didžiausia vertė gauta bandinius gauti sukietinus 45 °C temperatūros  $CO_2$  aplinkoje – pasiektas 23,44 MPa stiprumas.



**2 pav.**  
Temperatūros įtaka rišamosios medžiagos–smėlio bandinių stipriui gniuždant, kai karbonizacijos trukmė 24 val. ir  $V/K = 0,3$

Tad atlikti tyrimai įrodo, kad  $CO_2$  aplinkoje sukietintas betonas gali būti gaminamas ne tik iš bevandenių kalcio silikatų, bet ir iš kalcio hidrosilikatų.

## Literatūra

- [1] E. Benhelal E., Zahedi G., Shamsaei E., Bahadori A., „Global strategies and potentials to curb  $CO_2$  emissions in cement industry“, Volume 51, 2013, 142 – 161.
- [2] Gendvilas R. ir Siauciunas R., „The influence of temperature and nature of CaO component on the formation of  $\alpha-C_2SH$ “, *Solid State Phenomena*, 2016, 12 – 18.
- [3] Zhang H., et al., „The usage of rankinite for carbon capture and storage and carbonation kinetics“, *Energy Sources, Part A Recover. Util. Environ. Eff.*, 2018, 1 – 18.

**V. Tumosaitė,  
M. Stankevičius,  
T. Drevinskas, A. Maruška**

*Vytauto Didžiojo universitetas,  
Instrumentinės analizės atviros  
prieigos centras*

## **AGAROZĖS IR ŽELATINOS GELIO KOMPOZITAS KAPILIARINEI GEL-ELEK- TROCHROMATOGRAFIJAI**

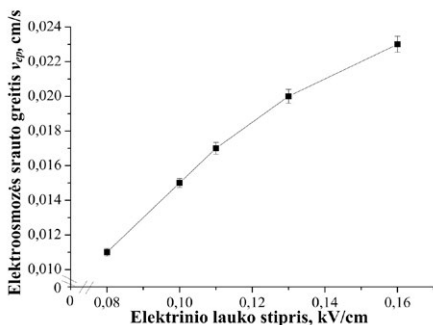
Mus supanti aplinka susideda iš skaitlingų medžiagų mišinių, kurių cheminės sandaros sudėtingumas reikalauja naujų atskyrimo metodų kūrimo. Dažnai, ypač sunku vienu metu atskirti didelės molekulinės masės junginius ir krūvį turinčias daleles. Todėl kuriami nauji ir tobulinami jau esami molekulinio lygmens atskyrimo metodai. Mokslinėje spaudoje tyrimų, susijusių su neutralių makromolekulių ir neigiamą krūvį turinčių dalelių atskyrimu kapiliarine gel-elektrochromatografija iki šiol nebuvo paskelbta.

Kapiliarinė elektrochromatografija yra kapiliarinės elektroforezės ir efektyviosios skysčių chromatografijos metodų junginys, pasižymintis abiejų šių metodų privalumais – dideliu atrankumu dėl nejudrios fazės ir analizuojamos medžiagos sąveikos ir aukštu efektyvumu, kurį suteikia elektroosmozės srauto sukūrimas kapiliarinėje kolonėlėje [1]. Medžiagų atskyrimas kapiliarine elektrochromatografija atliekamas mikro- ar nano- formate, tai yra, kapiliariniame lygmenyje. Metodo galimybės priklauso nuo to, kokia medžiaga yra pritvirtinta prie analizės metu naudojamos kapiliarinės kolonėlės vidinio paviršiaus [2]. Kapiliarinės elektrochromatografijos metodo principas yra analizuojamų medžiagų atskyrimas tarp skystos ir kietos fazių, kur metodo varomoji jėga yra elektroosmozės srautas [3]. Geliai – vienas iš galimų nejudrių fazių tipas, pasižymintis unikaliomis atskyrimo savybėmis – jei gelio porų dydis pakankamai mažas jie gali atlikti ir molekulinio sieto funkciją [4].

Paruošiamas 2 % agarozės gelis ir 2 % želatinos gelis. Geliai susmulkinami pro sietą ir sumaišomi 3:1 santykiu. Paruoštas gelio kompozitas išlydimas 78 °C temperatūroje ir juo užpildoma 75 μm vidinio skersmens kapiliarinė kolonėlė. Naudojant mikroskopą, patikrinama užpildymo kokybė. Paruošta kapiliarinė kolonėlė su gelio kompozitu pritaikyta neutralių makromolekulių skirstymui pagal molekulinę masę. Analizės sąlygos: kapiliarinės kolonėlės ilgis 40 cm, efektyvus ilgis 30 cm, 60 s elektrokinetinė injekcija, 4 kV įtampa, darbinis elektrolitas 30 mM acto rūgštis, pH 3,3, analizė atliekama 20 °C temperatūroje, analizės trukmė 90 min. Detekcijai naudojamas bekontakčio laidumo detektorius.

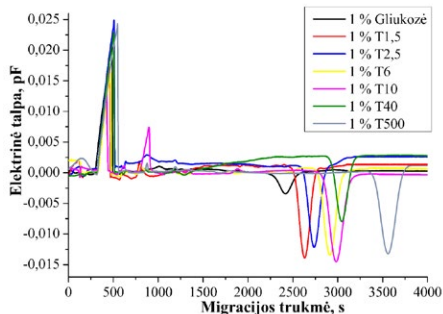
Elektroosmozės srauto greičio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio pavaizduota 1 pav. Remiantis gautu grafiku, galima pastebėti, kad didžiausias – 0,023 cm/s elektroosmozės srauto greitis pastebimas esant 0,16 kV/cm stiprumo elektriniam laukui. Mažiausias elektroosmozės srauto greitis – 0,011 cm/s pastebėtas esant 0,08 kV/cm stiprumo elektriniam laukui. Taip pat, pastebima teorijoje aprašoma

tiesinė elektroosmozės srauto greičio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio. Remiantis gauta priklausomybe, tolimesnei analizei su polisacharidų tirpalais buvo pasirinktas optimalus tiesinėje priklausomybės riboje esantis 0,10 kV/cm elektrinio lauko stipris kuomet pastebimas 0,015 cm/s elektroosmozės srauto greitis. Didesnė įtampa tolesniems tyrimams nebuvo naudojama, kadangi naudojant didelę įtampą kyla rizika, kad nejudri fazė, kuria užpildytas kapiliaras, gali tapti nehomogeniškas – gali susidaryti burbulai arba tarpai be nejudrios fazės.



**1 pav.** Elektroosmozės srauto greičio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio.  $SNN < 3\%$ ,  $n = 3$ .

Vizualiai pavaizdavus gautus analizės duomenis (2 pav.), galima pastebėti, jog didėjant analizuojamos medžiagos molekulinėi masei, migracijos trukmė ilgėja, tai yra, smailės migracijos laikas didėja, kadangi medžiaga, kuria yra užpildyta kapiliarinė kolonėlė su gelio kompozitu veikia kaip molekulinis sietas ir sulaukyti didesnės molekulinės masės junginius, mažesnės molekulinės masės junginius praleisti pro poras.

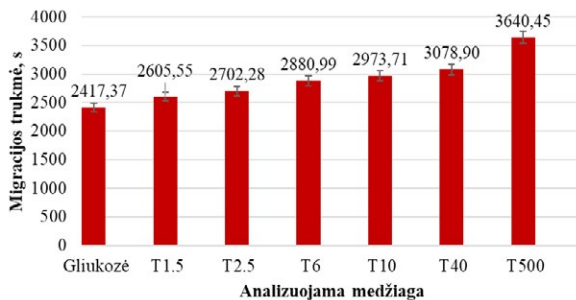


**2 pav.** Analizių migracijos trukmės vizualaus palyginimo chromatograma.

Greičiausiai (3 pav.) kapiliarinėje kolonėlėje judėjo 1 % gliukozės tirpalas – išėjimo trukmė 2417,37 s ( $\approx 40$  min 17 s), kadangi iš visų analizuojamų krūvių neturinčių mėginių, gliukozės molekulinė masė buvo mažiausia – 180,156 g/mol. Ilgiausia migracijos trukmė buvo pastebėta analizuojant paskutinį mėginį – 1 % dekstrano standartą T500, kuomet pastebėta 3640,45 s ( $\approx 60$  min 40 s) migracijos trukmė, kadangi šio mėginio molekulinė masė yra didžiausia iš visų tiriamųjų junginių – 500000 g/mol. Taip pat, galima pastebėti, kad paskutinio mėginio – 1 % dekstrano



standarto T500 migracijos trukmės santykinis standartinis nuokrypis buvo didesnis, nei kitų analizuojamų mėginių (2,79 %). Tokius rezultatus galima paaiškinti tuo, kad didelės molekulinės masės tirpalų klampa buvo didesnė, todėl atliekant elektrokinetinę injekciją bandinio į kapiliarinę kolonėlę galėjo patekti mažiau dėl jo klamos. Todėl matoma didžiausia šių mėginių migracijos trukmės paklaida.



**3 pav.**  
Analičių migracijos trukmės palyginimas.  
SSN < 3 %, n = 3.

Buvo sukurtas teigiamą krūvį turintis gelio kompozitas iš neturinio krūvio polimero – agarozės gelio ir kito, krūvį turinio polimero – želatinos. Paruoštas gelio kompozitas pritaikytas neutralių makromolekulių skirstymui pagal molekulinę masę kapiliarinės gel-elektrochromatografijos metodu naudojant bekontakčio laidumo detekciją. Didžiausios (dekstrano standarto T500) ir mažiausios (gliukozės) molekulinės masės mėginių smailių migracijos trukmė skyrėsi 20 min 23 s, o paruoštų kapiliarinių kolonėlių su gelio kompozitu efektyvumas siekė iki 195 505 teorinių lėkštelių, o skiriamoji geba 28,23.

### Padėka

Dėkoju Lietuvos Mokslų Tarybai už studentų mokslinių tyrimų semestro metu Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0064 finansavimą.

### Literatūra

- [1] D'orazio, G. ir kt. *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*, 2016, 82, 250–267.
- [2] Bartle, K.D., Mayers, P. *Journal of Chromatography A*, 2001, 916(1), 3–23.
- [3] Kok, W.T. *Journal of Chromatography A*, 2004, 1044(1–2), 145–151.
- [4] Vegvari, A. *Journal of Chromatography A*, 2005, 1079, 50–58.

**M. Žagunis<sup>1</sup>, N. Tiso<sup>1</sup>,  
J. Mikašauskaitė Tiso<sup>2</sup>,  
A. Maruška<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Vytauto Didžiojo universitetas,  
Instrumentinės analizės  
Atviros prieigos centras

<sup>2</sup> Kauno Technologijos universitetas

## **BASIDIOMYCETES GRYBŲ IZOLIATŲ IR JŲ FERMENTŲ TAIKYMO TYRIMAS TEKSTILĖS DAŽŲ SKAIDYMU *IN VITRO***

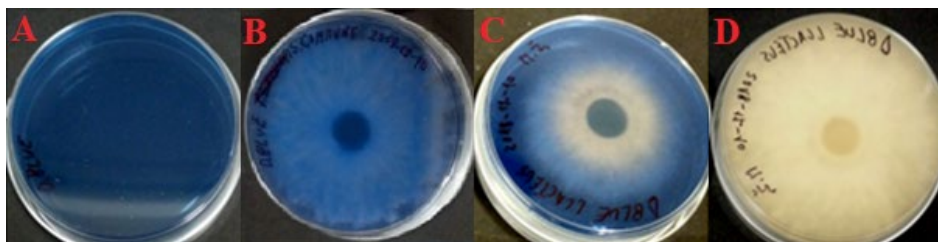
Tekstilės dažai yra vieni iš plačiausiai naudojamų dažų tekstilės pramonėje. Tačiau vis didėjantis tekstilės dažų naudojimas kelia ekologines problemas, kadangi juos naudojant, didelis kiekis dažų yra išmetamas į vandens nuotekas. Labai maži dažiklių kiekiai vandenyje yra lengvai pastebimi ir veikia vandens skaidrumą bei dujų tirpumą. Taip pat, daugelis šių dažų pasižymi toksinėmis bei kancerogeninėmis savybėmis. Todėl reikia pašalinti dažus prieš juos išleidžiant į vandens telkinius ar gruntą. Šiuo metu dažams apdoroti naudojami fizikiniai ir cheminiai metodai yra brangūs, žalingi aplinkai, neveiksmingi ir sunku pritaikyti plačiai dažų įvairovei. Dėl šių priežasčių daug dėmesio yra skiriama mikroorganizmų, gebančių skaidyti ir absorbuoti nuotekose esančius dažus, tyrimams [1]. Pastaraisiais metais mokslininkų atlikti tyrimai nustatė, kad vienas iš ligniną skaidančių fermentų, lakazė, gali būti sėkmingai panaudojamas dažų skaidymui. Lakazė gali būti sėkmingai taikoma dėl jos aukšto katalizinio aktyvumo, plataus substrato specifškumo ir didelio tolerantiškumo fizinėms ir cheminėms sąlygoms [2]. Taip pat, daug dėmesio sulaukė naujai nustatyta heme peroksidazių šeima, gebanti šalinti dažų spalvas – dažus balinanti peroksidazė (DyP) [3]. Pagrindinis projekto uždavinys – pritaikyti grybų išskirtus fermentus dažų skaidymui ir įvertinti dažų skaidymo efektyvumo tyrimus taikant instrumentinės analizės ir mikrobiologijos metodus.

Tyrimo metu atlikta penkių skirtingų Basidiomycetes izoliatų atranka: *Pleurotus eryngii* VMU 001, *Schizophyllum commune* VMU 002, *Irpex lacteus* VMU 003, *Fomitopsis pinicola* VMU 005, *Pleurotus ostreatus* SMR 684. Įvertinti izoliatų gebą šalinti dažus naudoti įvairių spalvų ir tipų dažai: direct red 81, direct blue 15, direct yellow 147, direct black 38, reactive red 241, reactive blue 89, reactive yellow 145, reactive black 5, acid red 73, acid blue 7, acid yellow 36 ir acid black 2.

Grybų izoliatų atrankai naudotas modifikuotas dažų spalvos agaras lėkštelėse įvertinimo metodas [4]. Mažose, 5,5 cm diametro, Petri lėkštelėse buvo paruoštos salyklo ekstrakto agarų terpės (SEA), į kurių sudėtį buvo papildomai pridedami įvairių spalvų (geltonos, raudonos, juodos ir mėlynos) ir tipų (rūgštiniai, tiesioginiai ir reaktyvūs) tekstilės dažai. Ant šių terpių buvo inokuliuotos izoliuotos grybų kultūros. Šios kultūros buvo inkubuojamos 1 savaitę  $28 \pm 1$  °C temperatūroje, esant 75 % santykinėi drėgmei, kuomet buvo vizualiai stebimas ir įvertinamas jų gebėjimas sumažinti terpės spalvą. Naudojant gautus rezultatus vizualiai palyginame ir įvertiname naudojamų grybų gebą šalinti dažus ir atrankame efektyviausią dažus pašalinusią izoliuotą grybo kultūrą tolimesniems tyrimams.

Skystos terpės spalvos mažėjimo kiekybinei analizei naudotas modifikuotas dažų spalvos mažėjimo tyrimo metodas [5]. Atlikta skystos terpės spalvos mažėjimo kiekybinė analizė, kuomet buvo paruoštos salyklo ekstrakto (SE) skystos terpės, į kurių sudėtį buvo pridėta 0,02 % (w/v) tekstilės dažo. Kiekvienam naudotam dažui iš anksto buvo išmatuotos absorbcijos 400 - 700 nm bangų ilgio diapazone naudojant spektrofotometrą, siekiant nustatyti optimalų absorbcijos bangos ilgį kiekvienam dažui ( $\lambda_{max}$ ). Į šių terpių sudėtį buvo inokuliuojama praėjusiame SEA tyrime atrinkta efektyviausia izoliuoto grybo kultūra. Terpės inkubuojamos 1 savaitę  $28 \pm 1$  °C temperatūroje, esant 75 % santykinei drėgmei, maišomos 120 rpm greičiu, kuomet kiekvieną dieną įvertinamos ir palyginamos neinokuliuotos ir inokuliuotos terpės su atitinkamu dažų absorbcija.

Tolimesniems tyrimams buvo atrinkta *I. lacteus* VMU 003 grybo kultūra, kadangi tai buvo vienintelė grybo kultūra gebėjusi matomai pašalinti dažų spalvą visose tirtose SEA terpėse tiriamojo laikotarpio metu, dažų spalvos nykimas dažnai prasidėjo panašiu metu bei sugebėjo pilnai pašalinti kai kurių terpių vizualiai matomą spalvą (1 pav.).



1 pav.

Tiesioginio (direct) mėlyno dažo spalvos terpėje pašalinimo palyginimo pavyzdys (A – neinokuliuota kontrolė; B – nepašalinta dažo spalva naudojant *S. commune* po 21 dienos VMU 002 kultūrą; C – dažo spalvos pašalinimo pradžia naudojant *I. lacteus* VMU 003 po 3 dienas; D – dažo spalvos pašalinimo pradžia naudojant *I. lacteus* VMU 003 po 6 dienas).

SE skystos terpės spalvos mažėjimo kiekybinei analizei naudota praeitame tyrime atrinkta *I. lacteus* VMU 003 kultūra. Naudojant gautus absorbcijos matavimus buvo kiekybiškai įvertintas galimai įvykęs terpės spalvos išnykimas. Nustatyta, jog *I. lacteus* pašalina apie 80-99 % į skystą salyklo ekstrakto mitybinę terpę pridėtų rūgštinių dažų, išskyrus acid black 2, kurio spalvos pašalinimas nebuvo aptiktas, 81-99 % tiesioginių dažų, tačiau ši grybo kultūra demonstravo žemesnį efektyvumą skaidant reaktyvius dažus, kurių suskaidė tik apie 50-79 % dažų.

## Padėkos

Dėkoju Lietuvos Mokslų Tarybai už studentų mokslinių tyrimų praktiką semestro metu Nr. 09.3.3.-LMT-K-712-16-0053 finansavimą.

## Literatūra

- [1] Fu, Y., Viraraghavan, T. *Bioresource Technology* 2001, 79, 251-262.
- [2] Mayer, A. M., Staples R. C. *Phytochemistry* 2002, 60, 551-565.
- [3] Sugano, Y. *Cellular and molecular life sciences: CMLS* 2009, 66(8), 1387-1403.
- [4] Munari, F. ir kt. *World Journal of Microbiology and Biotechnology*, 2007, 24, 1383-1392.
- [5] Rani, B. *Brazilian Journal of Microbiology*, 2014, 45(3), 1055-1063.

**J. Eimontas,  
N. Striūgas**

*Lietuvos Energetikos Institutas,  
Breslaujos g. 3, Kaunas, LT-44403*

## **JŪRŽOLIŲ IR JŲ DIGESTATŲ TERMINIO SKAIDYMO TYRIMAI**

**Išvadas.** Mažėjant iškastinio kuro ištekliams bei didėjant energijos paklausai yra labai svarbu ieškoti alternatyvių energijos šaltinių [1]. Vienas iš paklausiausių bei daugiausiai žadančių energijos gavybos žaliavų yra biomasė. Energijos sunaudojimas iš biomasės sudaro tik nedidelę dalį visos naudojamos energijos [2], todėl ieškomos ir optimizuojamos naujos technologijos [3], kurios leistu iškastinį kurą pakeisti atsinaujinančiu biokuru [4]. Kaip viena iš paklausiausių technologijų, kurios metu išgaunami energetiniai produktai yra anaerobinis apdorojimas. Šio proceso metu įvairių mikroorganizmų pagalba biomasė bei jos atliekos yra skaidomos į mažesnės molekulinės masės junginius ir to pasekoje, kaip galutinis produktas, gaunamos biodujos [5]. Vis dėlto, po anaerobinio apdorojimo bioreaktoriuje susidaro vis dar kaloringa organinė medžiaga vadinama digestatu. Šis digestatas galėtų būti panaudotas laukų tręšimui taip uždarant biomasės gyvavimo ciklą bei prisidedant prie žiedinės ekonomikos kūrimo. Tačiau siekiant išgauti maksimalų energijos kiekį turėtų būti svarstoma apie kombinuotas anaerobinio apdorojimo bei antrinio energijos išgavimo sistemas. Taip pat, susidaręs digestatas gali būti užterštas tam tikrais sunkiaisiais metalais ar kitomis priemaišomis, kas neleistų tiesiogiai susidariusios žaliavos naudoti laukų tręšimui. Dėl šių priežasčių, kaip antrinio apdorojimo technologija, galėtų būti panaudotas pirolizės procesas, kurio metu, kaip galutiniai energiniai produktai, yra gaunamos pirolizės nekondensacinės dujos, anglis bei skystosios dervos. Siekiant labiau susipažinti su procesų technologijomis bei įvertinti galimas produktų sudėtis bei išėigas tirtos jūržolių, nuotekų dumblo bei digestato pagrindinės terminės charakteristikos.

**Darbo tikslas.** Atlikti anaerobiškai apdorotų jūržolių ir jų substratų terminio skaidymo tyrimus, siekiant nustatyti pagrindinių produktų išėigą ir optimalias proceso sąlygas didžiausiai dujinių junginių išsiskyrimui.

**Tyrimų rezultatai ir jų aptarimas.** Pagrindinis šio darbo tikslas yra palyginti trijų žaliavų (jūržolių, nuotekų dumblo bei digestato) terminės charakteristikas ir nustatyti susidariusių produktų išėigas.

Atlikus mikroterminę analizę nustatyta, jog visi tirti mėginiai termiškai degraduoja dvejomis stadijomis. Pirmoji stadija yra tarp 300 – 350 °C temperatūrų ir yra siejama su celiuliozės ir hemiceliuliozės termine dekompozicija. Antroji stadija yra tarp 690 – 720 °C temperatūrų ir yra siejama su lignine esančių cheminių ryšių termine

destrukcija. Šis temperatūrų pasiskirstymas yra stebimas dėl žaliavos sudėties. Glikozidiniai ryšiai esantys celiuliozėje ir hemiceliuliozėje skyla žemesnėje temperatūroje nei lignine esantys ryšiai. Dėl šios priežasties ir išskiriamos dvi degradacinės zonos. Skilimo temperatūros gali keistis priklausomai nuo procentinės biomasės sudėties.

Terminės destrukcijos metu, imituojant pirolizę mikro mastelyje, susidariusių junginių struktūros analizuotos naudojant 2-3D Furjė transformacijos infraradonųjų spindulių spektroskopiją (FTIR). Iš atliktų terminės analizės rezultatų matosi, jog žaliava skyla dvejomis stadijomis: pradžioje trūkinėja ryšiai, esantys celiuliozėje bei hemiceliuliozėje ( $325 \pm 25$  °C), o vėliau, prie  $705 \pm 15$  °C temperatūros skyla lignine esantys ryšiai. Būtent dėl šios priežasties pasirinkta analizuotus spektrus, prie šių temperatūrų ir stebėti funkcinių grupių pasiskirstymą. Tikslios temperatūros paimtos iš derivatogramų, kuriose masės kritimo greitis yra didžiausias (išsiskiria daugiausiai dujų).

Analizuojant spektrus, prie  $325 \pm 25$  °C temperatūros išskiriamos funkcinės grupės, būdingos visiems tirtiems bandiniams. Prie  $3000$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio matomi aromatinųjų, bei alifatinių C-H ryšių vibravimai, kurie tikėtina, kad priklauso konkrečiam  $\text{CH}_4$  junginiui bei cikliniams benzeno žiedo dariniams. Aromatinių junginių buvimą patvirtina ir  $600$ - $1000$   $\text{cm}^{-1}$  zonoje esančios intensyvios smailės. Taip pat, gali būti persidengę merkaptio S-H grupės valentiniai svyravimai. Prie  $3600$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio matome mažo intensyvumo smailę, kuri signalizuoja, jog galėtų būti amino N-H grupės valentiniai virpesiai. Vis dėlto, kadangi ši smailė nėra itin intensyvi, jos formą sunku identifikuoti, tad galima daryti prielaidą, jog hidroskilo grupė taip pat tikėtina. Ties  $2300$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgiu matome ganėtinai intensyvią smailę, kuri sietina su konkrečiu O=C=O junginiui (tai būdinga anglies dioksido vieta). Ties  $1700$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgiu matome intensyvių karbonilinės jungties valentinių svyravimų piką C=O, kuris gali priklausyti esteriumi, aldehidui ar ketonui. Prie  $1100$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio matome deformacinius svyravimus, kurie yra labai būdingi eterinei C-O-C grupei. Minimalūs obertoniniai svyravimai matomi prie  $2100$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio, tad didelė tikimybė, jog substitutuoti benzeno dariniai proceso metu taip pat formavosi. Išskirtinumą galime pastebėti dumblo bei jūržolės bandiniuose, nes prie  $1300$   $\text{cm}^{-1}$  ir prie  $1500$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio matomi du valentinių svyravimų pikai, todėl galime teigti, jog fiksuojame nitro N-O grupės buvimą. Jūržolėse, prie  $3000$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio praktiškai nestebimi valentiniai virpesiai, tad galime teigti jog C-H grupių šioje žaliavoje yra mažiau, lyginant su kitomis dvejomis biomasėmis. Vis dėlto, jūržolės turi piką prie  $1900$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio, kas yra būdinga cikliniams (penkianariams ar ketunariams) esteriams.

Nagrinėjant spektrus prie  $705 \pm 15$  °C temperatūros labai didelių išskirtinimų nepastebima. Prie  $2300$   $\text{cm}^{-1}$  bangos ilgio matome intensyviausius valentinius vibravimus, kurie priskiriami O=C=O junginiui. Nedidelio intensyvumo smailės yra fiksuojami deformaciniai virpėjimų zonoje, tačiau juos priskirti konkrečiai funkcinei grupei sudėtinga.

Atlikus pirolizės tyrimus laboratorinio dydžio įrenginyje gauti trys skirtingi produktai: anglis, dervos bei nekondensacinės dujos.

Pagrindiniai susidaranciu dujų komponentai yra  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{CH}_4$  ir  $\text{H}_2$ . Kiti lengvesnieji angliavandeniliai, tokie kaip  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$  bei  $\text{C}_3\text{H}_8$  taip pat fiksuoti dujiniu chromatografu, tačiau jų koncentracijos nedidelės ir siekia iki 1 %. Pagrindinių komponentų išsiskyrimas prasideda prie  $300$  °C temperatūros ir tęsiasi iki pat konversijos pabaigos (iki  $900$  °C). Maksimalūs  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{CH}_4$  ir  $\text{H}_2$  išsiskyrimai nustatyti prie  $530$  °C,  $670$  °C,  $560$  °C ir  $750$  °C atitinkamai.

Pirolizės metu susidariusios dervos analizuotos dujų chromatografu su kvadrupoliniu masių spektrometrijos detektoriumi. Gautos dvi dervų frakcijos – lengvosios dervos, dar kitaip vadinamos kondensacinėmis dujomis, ir sunkiosios dervos (gautos iškart po pirolizės reaktoriaus be papildomos kondensacijos). Visi tirti mėginiai

parodė panašius rezultatus. Vis dėlto, galime įžvelgti nedidelius, tačiau reikšmingus skirtumus, susijusius su žaliavos pasirinkimu. Analizuojant lengvesniųjų dervų sudėtis nustatyta, jog didžiausias susidaręs junginio kiekis, vyraujantis tiriamosiose frakcijose, yra toluenas. Jis sudaro, nuo 20 iki 49 % viso gauto tirpalo. Vis dėlto, galima pastebėti, jog susidarė didelis kiekis įvairių benzeno darinių, tokių kaip fenolis, etilbenzenas, etanonas bei stirenas. Bendrai, šių junginių procentinės sudėties svyruoja nuo 10 iki 20%, priklausomai nuo žaliavos.

Analizuojant sunkesniusias dervas nustatyta, jog visuose mėginiuose buvo didelis kiekis bio-dervai būdingų junginių, tokių kaip įvairiai pakeisti fenolio junginiai (2-metil, 4- metilas), stireno junginiai, piridinas, benzilnitrilai ir alkoholiai. Sunkesniųjų dervų mėginiai, gauti iš jūržolių bei nuotekų dumblo turi 20 masės % ir 10 masės % tolueno, atitinkamai. Digestatas turi mažesnį tolueno kiekį, apie 5%. Šis skirtumas greičiausiai atsiranda dėl lengvesnio angliavandenilių susidarymo, kurį sukelia skirtinga biomasės sudėtis. Fenolio junginių skaičius dervoje svyruoja nuo 2 iki 9 masės %. Stirenas buvo aptiktas maždaug 3,5 masės % - 4,5 masės % nuotekų dumble bei digestate, tačiau jūržolėse jo nebuvo aptikta. Taip pat pastebimi ir įvairūs alifatiniai bei lengvieji angliavandeniliai, tačiau nereikšmingu kiekiu (iki 1 masės %).

Skirtingų žaliavų pirolizės proceso metu gautų produktų pasiskirstymas skirtingas. Jūržolių atveju nustatyta, jog 17,2 % sudarė pirolizės dervos, 43,7 % - dujos, o likę 39,1 % - anglis. Nuotekų dumblo atveju gauta, jog 30,5 % sudarė dervos, 19,4 % sudarė dujos, o 50,2 % - anglis. Digestato atveju 15,6 % sudarė dervos, 35,6 % sudarė dujos, o 48,8 % sudarė anglis.

**Išvados.** Visi tirti mėginiai termiškai degradoja dvejomis stadijomis: pirmoji smailė atsiranda prie ~300 °C temperatūros ir yra sietina su celiuliozės bei hemiceliuliozės glikozidinių ryšių skilimu. Antroji smailė pastebima prie ~ 700 °C temperatūros ir sietina su lignino struktūroje esančių ryšių degradacija. Analizuojant dujinius susidariusius produktus nustatyta, jog pagrindiniai komponentai yra CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, bei H<sub>2</sub>. Maksimalūs šių dujų išsiskyrimai nustatyti prie 530 °C, 670 °C, 560 °C ir 750 °C atitinkamai. Analizuojant lengvesnius dervų produktus gauta, jog pagrindinis susidaręs junginys yra toluenas. Vis dėlto, pastebėta, jog susidarė ir nemažai įvairių benzeno darinių, tokiu kaip fenolis, etilbenzenas, etanonas bei stirenas. Analizuojant sunkesniųjų dervų sudėtį nustatytas nemažas kiekis biodervoms būdingų junginių, tokių kaip įvairiai substitutuotus fenolinius junginius, benzilnitrilus, alkoholius. Visi šie junginiai papildomų reakcijų metu gali būti apdoroti ir naudojami kaip biokuras, gautas iš atsinaujinančių energijos šaltinių.

---

## Literatūra

- [1] Sipra AT, Gao N, Sarwar H. Municipal solid waste (MSW) pyrolysis for bio-fuel production: A review of effects of MSW components and catalysts. *Fuel Process Technol* 2018. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2018.02.012>.
- [2] Kotaiah Naik D, Monika K, Prabhakar S, Parthasarathy R, Satyavathi B. Pyrolysis of sorghum bagasse biomass into bio-char and bio-oil products: A thorough physicochemical characterization. *J Therm Anal Calorim* 2017. <https://doi.org/10.1007/s10973-016-6061-y>.
- [3] Khosravani pour Mostafazadeh A, Solomatnikova O, Drogui P, Tyagi RD. A review of recent research and developments in fast pyrolysis and bio-oil upgrading. *Biomass Convers Biorefinery* 2018. <https://doi.org/10.1007/s13399-018-0320-z>.
- [4] Striūgas N, Valinčius V, Pedišius N, Poškas R, Zakarauskas K. Investigation of sewage sludge treatment using air plasma assisted gasification. *Waste Manag* 2017. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2017.03.024>.
- [5] Gould MC. Bioenergy and Anaerobic Digestion. *Bioenergy*, 2015. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-407909-0.00018-3>.

**V. Kovalevskij,  
D. Viržonis**

*Vilniaus Gedimino  
Technikos Universitetas*

# HORIZONTALIOSIOS ŠVYTUOKLĖS TIPO ENERGIJOS RINKTUVO CHAOTIŠKO ŽEMO DAŽNIO VIRPESIŲ TRANSFORMACIJOS EFEKTYVUMO TYRIMAS

Tiriamasis objektas yra sukurtas harvesterio prototipas sujungtas su žingsniniu varikliu per mova, siekiant simuliuoti skirtingo dažnio virpesius.

Darbo tikslas – ištirti horizontaliosios švytuoklės tipo energijos rinktuvo panaudojimo galimybę žemo energinio tankio sistemose, nustatant tinkamiausius rinktuvo rotoriuje įstatytų magnetų tarpusavio kampus.

Siekiant nustatyti tinkamiausius rinktuvo rotoriuje įstatytų magnetų tarpusavio kampą, reikia:

- Sukurti rotorius su skirtingais magnetų įstatymų kampais tarp jų;
- Parinkti matavimo metodiką pagal analizuojamus pavyzdžius;
- Išmatuoti sistemos generuojama įtampa tyrimo metu;
- Gautus duomenis apdoroti ir nupaisyti atitinkamus grafikus;
- Atlikti gautų duomenų, po apdorojimo, analizę.

## 1. PRADINIS STEBĖJIMAS

Projektuojant harvesterio rotoriaus prototipus nuspręstą naudoti rotorijų su trimis neodimio magnetais. Šie magnetai yra įstatyti, vis didinant kampą tarp jų, kiekviename rotoriuje, o pats rotorius atspausdintas 3D spausdintuvu iš PLA plastiko. Suprojektuoti šeši rotoriai su neodimio magnetais, kurių matmenys  $5 \times 10 \times 20$  ir kampas tarp jų yra  $0^\circ$ ,  $2^\circ$ ,  $4^\circ$ ,  $6^\circ$ ,  $8^\circ$  ir  $10^\circ$ .

## 2. HIPOTEZIŲ IŠKĖLIMAS

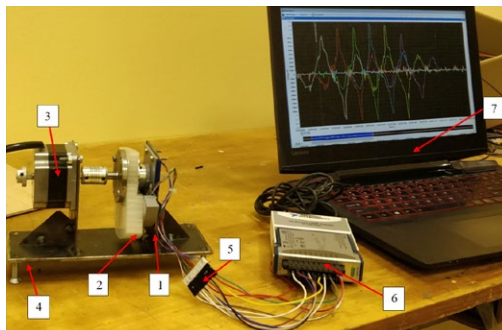
Siekiant nustatyti rinktuvo rotoriaus magnetų padėčių priklausomybę generuojamai srovei iškeliami hipotezė: kuo didesnis kampas tarp magnetų – tuo didesnė elektros srovė generuojama.

### **Eksperimentas hipotezėms patikrinti:**

Eksperimentas, kuriuo bus tikrinamos iškelta hipotezė, susideda iš kelių pagrindinių dalių: elektromechaninės švytuoklinės sistemos (harvesterio), įtampos matavimo įrangos, valdymo programa vibracijoms simuliuoti.

Tiriamas energijos rinktuvas veikia horizontaliosios švytuoklės principu. Įrenginį (2.1 pav.) sudaro dvi lygiagrečios plokštelės: viena plokštelė naudojama kaip korpusas (1), kita plokštelė laisvai svyruoja apie tvirtinimo tašką (2), kai yra žadinama korpusą veikiančių mechaninių virpesių. Elektrinės energijos rinktuvo sistemą sudaro ritės, kurios yra sumontuotos specialiaame laikiklyje (1) ir tvirtinamos prie stacionarios

energijos rinktuvo dalies bei magnetai, kurie tvirtinami prie judančios dalies(2). Ričių laidai (5) prijungiami prie matavimo įrenginio (6) kuris matuoja generuojamą elektros srovę ir atvaizduoja grafiškai kompiuteryje (7).



**2.1 pav.**  
Tyrimo stendas: 1) ričių laikiklis; 2) magnetų laikiklis; 3) žingsninis variklis; 4) stendo korpusas; 5) ritės išėjimai; 6) matavimo įrenginys; 7) kompiuteris nuskaitantis matavimo parametrus

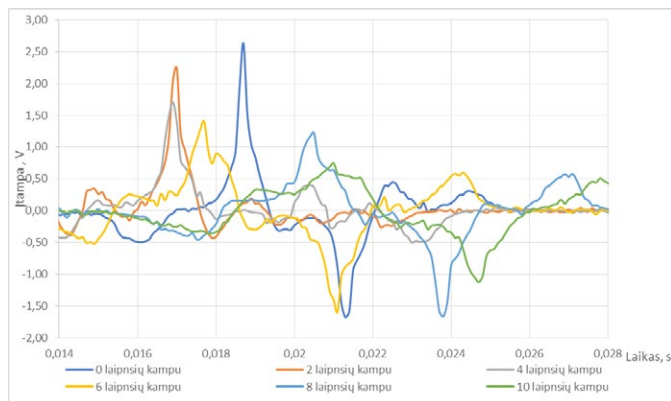
Pasirenkamas mažiausias 0,5 Hz simuliuojamos vibracijos dažnis su sąlyga, jog sistemos rezultatai pastebimai keičiasi tik didinant virpesius nuo 0,5 Hz. Matavimams atlikti naudojami dažniai: 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5 ir 3 Hz.

### 3. TYRIMO REZULTATAI

Rotorius, kuriame magnetai yra mažiausiu kampų nutolę vienas nuo kito generuoja aukščiausią įtampą. Norint įsitikinti ar iškelta hipotezė teisinga, tikrinama kaip skiriasi generuojamos įtampos priklausomybė nuo to, kokių kampų magnetai yra nutolę vienas nuo kito.

Šio eksperimento metu išbandyti šeši rotoriai, kuriuose magnetai vienas nuo kito nutolę 0, 2, 4, 6, 8 ir 10 laipsnių kampais.

Pagal anksčiau gautus rezultatus buvo nustatyta, kad didžiausią įtampą generuoja tada kai kiekvienas iš rotorium sukasi 2,5 Hz dažniu. Norint palyginti visus rotorius buvo parinkta vidurinė ritė, kuri generavo didžiausią įtampą, ir sulygininti visų šešių rotorium generuojamas įtampas šioje ritėje. Palyginimas pateikiamas 3.1 pav.



**3.1 pav.**  
Visų šešių rotorium generuojama įtampa, kai sukimosi dažnis 2,5 Hz.



Pagal 3.1 pav. grafike pavaizduotus duomenis matome, kad didžiausia įtampa generuojama kai magnetai nutolę vienas nuo kito 0° kampū, tuomet generuojama įtampa viršija 2,5 V.

Kai nutolstama 2° kampū generuojama įtampa, kuri yra šiek tiek didesnė nei 2 V. Toliau didinant kampą įtampa tik mažėjo, esant 10° kampū įtampa daugiau nei 1 V. Magnetus vieną nuo kito nutolinus 10° kampū generuojama įtampa sumažėjo 60 %.

## IŠVADOS

Atlikus harvesterio rotoriaus, kuriame magnetai yra nutolę 0, 2, 4, 6, 8 ir 10 laipsnių kampais, generuojamos įtampos tyrimą gauta, kad:

- Nustatyta, kad rotoriumi sukantis 2,5 Hz dažniu visais atvejais yra generuojama didžiausia įtampa, kuri siekia daugiau nei 2,5 V.
- Esant mažesniai kampū tarp magnetų, įtampa yra užfiksuojama greičiau, esant 0° kampū ir sukant rotoriumi įtampa buvo užfiksuota po 0,014s, o esant 10° kampū prie to paties dažnio įtampa buvo užfiksuota po 0,019s.
- Didinant kampą tarp neodimio magnetų generuojama įtampa ritėse mažėje, nuo 0° nutolimo iki 10° nutolimo generuojama įtampa sumažėjo 60%.

**A. Petronis,  
V. Bučinskas**

*Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas*

## MAŠININIO MOKYMO SISTEMŲ TAIKYMO ROBOTO DINAMINĖS TRAJEKTORIJOS PATAISOS NUSTATYMAI TYRIMAS

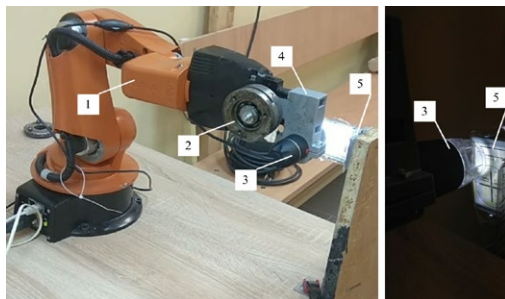
Viena svarbiausių industrinių robotų charakteristikų yra tikslumas. Tiek trajektorijos, tiek pozicionavimo tikslumas tiesiogiai veikia atliekamų procesų kokybę ir greitį. Šiuo atveju tikslumą galima apibrėžti pagal nuokrypio nuo norimo pasiekti taško erdvėje dydį.

Mašininis mokymas yra tam tikra algoritmų grupė, pasižyminti galimybe „mokyti“ iš duomenų siekiant priimti tinkamus sprendimus atitinkamuose kontekstuose. Tai drastiškai skiriasi nuo tradicinių algoritmų, kuri kiekviena veiksmų seka yra griežtai užprogramuota. Mašininio mokymo taikymas industrijoje yra ganėtinai nauja tyrimų šaka. Dėl to, jo taikymas robotų tikslumo gerinimui yra mažai ištirtas, bet rodo daug potencialo.

Siekiant sukurti mašininio mokymo sistemą galinčią gerinti robotų tikslumą reikia dviejų pagrindinių dalykų: tinkamo algoritmo ir tinkamos eksperimentavimo sistemos. Tokia sistema galiausiai pasiūlytų su minimaliu kiekiu papildomos įrangos ženkliai pagerinti gamybos linijose jau egzistuojančių robotų tikslumo charakteristikas.

Darbas ties šia tyrimu kryptimi buvo pradėtas su projektu „Mašininio mokymo sistemų taikymo artikuliaciniam robotui tyrimas“ [1]. To projekto pagrindinis rezultatas buvo eksperimentavimo sistemos pagrindų sukūrimas ir roboto pozicionavimo tikslumo matavimo technologijos demonstracija. Projektas taip pat pademonstravo galimybę naudoti mašininį mokymą pozicionavimo korekcijų atlikimui. Vis dėlto, projekto metu algoritmas galintis sėkmingai koreguoti nuokrypius nebuvo sukurtas.

Santraukoje aprašomas projektas, kurio metu buvo sukurtas paklaidų korekcijos algoritmas naudojant sukurtą patikimą ir daugiafunkcinę eksperimentavimo platformą mašininio mokymo algoritmų testavimui ir treniravimui roboto tikslumo gerinimo tikslais.

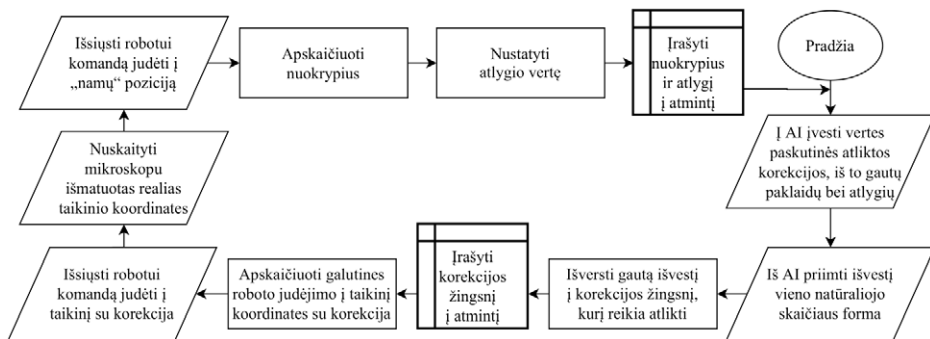


**Pav. 1.**  
*Eksperimento įrangos  
stendas: 1) KUKA youBot  
robotas; 2) masės simu-  
liatorius; 3) skaitmeninis  
mikroskopas; 4) roboto  
griebtuvo-mikroskopo  
adapteris; 5) taikynis su  
stovu.*

Eksperimentinės įrangos stendas yra pavaizduotas Pav. 1. Pagrindiniai jo elementai – KUKA youBot penkiaašis artikuliacinis robotas ir skaitmeninis mikroskopas, kurie yra valdomi kompiuterio pagalba. Mikroskopas yra primontuotas prie roboto griebtuvo, specialiai tam pagaminto adapterio pagalba. Masės simulatorius (taip pat primontuotas prie griebtuvo) leidžia pasiekti maksimalią roboto manipuliuojamą apkrovą (0.5 kg). Mikroskopas daro taikinio nuotraukas, kurios yra apdorojamos kompiuteriu taip nustatant reliatyvią roboto griebtuvo poziciją taikinio atžvilgiu.

Kompiuteryje veikianti projekto metu specialiai tam sukurta sistema koordinuoja įrangos elgesį, treniruoja gilaus q-mokymo algoritmą ir išsaugo duomenis eksperimentų metu. Sukurta programa veikia Debian OS 9 operacinėje sistemoje ir naudoja šią papildomą programinę įrangą bei bibliotekas: ROS (robot operating system) Melodic, KUKA youBot drivers, PyTorch 1.1, OpenCV, Kivy. Sukurta sistema leidžia atlikti tiek realius eksperimentus, tiek simuliacijas naudojant tiek realių eksperimentų metu surinktus, tiek sintetiškai sugeneruotus duomenis. Simuliacijų pranašumas yra greitis, tad jos naudojamos atrinkti algoritmus, kurie būtų tinkami realiems eksperimentams atlikti.

Sukurtą sistemą eksperimentams atlikti sudaro keturios pagrindinės programos. „AI“ programa yra gilaus q-mokymo tipo algoritmo branduolys, susidedantis iš q-mokymo algoritmo ir gilaus dirbtinio neuroninio tinklo. Ši programa priima apdorotus išorinių sensorių surinktus duomenis ir pateikia išvestį, kuri vėliau yra išverčiama į korekcijos vektorių „Main“ programoje. Pastaroji veikia kaip visos sistemos centras, koordinuojantis eksperimento eigą tarp visų programų bei sukuriantis vartotojo sąsają sistemos kontrolei. „Main“ susideda iš kelių dalių: eksperimento algoritmas (Pav. 2), simuliacija, vartotojo sąsaja ir duomenų įvestis/išvestis. „Vision“ programos tikslas – naudojant skaitmeninį mikroskopą, padaryti taikinio nuotrauką, joje atpažinti patį taikinį, apskaičiuoti jo centroido koordinates ir jas išsiųsti į „Main“. Tuo tarpu tiesioginė roboto parametru kontrolė ir vidinių sensorių rodmenų skaitymas atliekamas „Botmover“ programa.



**Pav. 2.** Eksperimento algoritmo veikimo principas Main programoje.

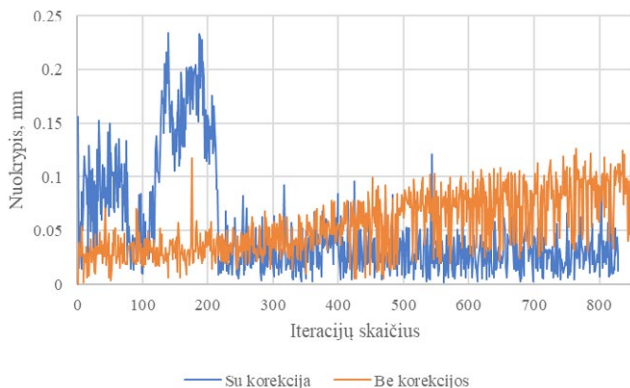
Eksperimentų tikslas – nustatyti ar gilaus q-mokymo algoritmas gali kompensuoti roboto KUKA youBot pozicionavimo paklaidas ir jei taip, nustatyti korekcijos lygį bei optimaliausias algoritmo konfigūracijas ir parametru vertes.

Eksperimento pagrindinis ciklas susideda iš roboto judėjimo tarp dviejų pozicijų, viena iš jų esanti tokia, kad mikroskopas galėtų padaryti taikinio nuotrauką. Ciklo

pradžioje robotas juda į koreguotas taikinio koordinatas. Pasiekus tą tašką, padaroma taikinio nuotrauka ir šie duomenys yra apdorojami, kurie yra įrašomi į atmintį ir įvedami į „AI“ programą. Pastaroji išveda korekcijos vertę, kuri yra „Main“ programos išverčiama į atitinkamą vektorių. Tuomet robotas grąžinamas į antrąją poziciją ir ciklas kartojasi.

Ekspperimentų rezultatų analizė lygina pozicionavimo tikslumo charakteristikas roboto judančio be korekcijos ir roboto judančio su korekcija, kurios specifines vertes suteikia gilaus q-mokymo algoritmas, kuris yra mokomas nuo nulio (nėra įkeltos algoritmo atminties). Abiem atvejais robotas yra nustatytas judėti ta pačia trajektorija tarp dviejų taškų. Robotas taip pat yra apkrautas tuo pačiu svoriu abiem atvejais.

Vienas iš pagrindinių roboto tikslumo rodiklių – absoliuti paklaida. Pav. 3 lyginami nuokrypiai robotui judant be korekcijos ir su ja. Jame matyti kaip su laiku kinta roboto pozicionavimo tikslumas. Esant judėjimui be korekcijos, absoliutus pozicionavimo nuokrypis su iteracijų skaičiumi didėja, o trumpo laiko perspektyvoje matomos žymios fliuktuacijos. Nuokrypio su korekcija charakteristikoje, matoma, kad po treniravimo stadijos pabaigos (apie 220 iteracijų), matoma, kad paklaidos vertė išlieka apytiksliai pastovi ir prilygsta tai, kuri pasireiškia nekoreguoto pozicionavimo pradžioje. Tai indikuoja, kad algoritmas sėkmingai pašalina pozicionavimo dreifą, nors vidutinė paklaidų vertė išlieka panaši tai, kuri pasirodo pačioje nekoreguoto pozicionavimo pradžioje.



**Pav. 3.**  
Pozicionavimo nuokrypio (paklaidos) kitimas iteracijų skaičiaus atžvilgiu.

Taigi, naudojant sukurtą platformą skirtą atlikti eksperimentus susijusius su ماشینinio mokymo algoritmų taikymu roboto tikslumui gerinti, buvo išvystytas optimalus algoritmas, galintis dalinai kompensuoti pozicionavimo paklaidas (t.y. pozicijos dreifą). Šis rezultatas pasiekiamas algoritmą treniruojant ne mažiau nei 200 iteracijų. Apibrėžiant roboto judėjimo trajektoriją kaip judėjimo kelią, einantį per tam tikrų taškų aibę erdvėje, galima daryti išvadą, kad gautas algoritmas galėtų kompensuoti trajektorijos paklaidas, koreguojant kiekvieno taško einančio per trajektoriją pozicijas.

## Literatūra

- [1] Petronis, A., Bučinskas, V., Šumanas, M., Dzedzickis, A., Petrauskas, L., Sitiajev, N. and Morkvenaitė-Vilkončienė, I., 2020. Improving Positioning Accuracy of an Articulated Robot Using Deep Q-Learning Algorithms. *Advances in Intelligent Systems and Computing*, pp.257-266.

**P. Svilainis,  
A. Kilikevičius**

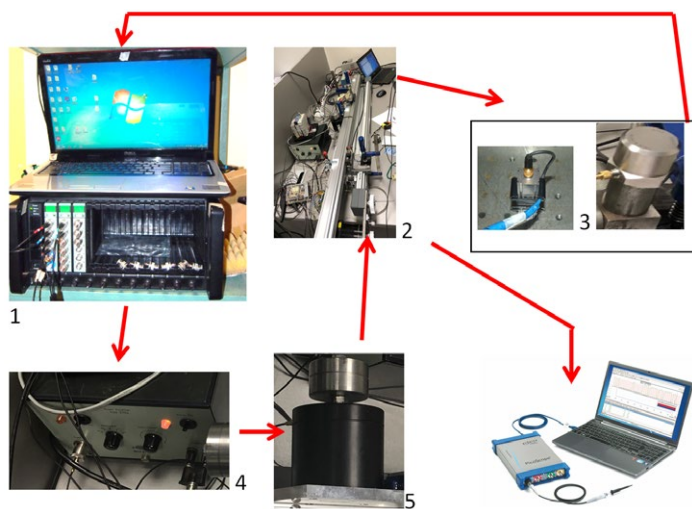
*Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas*

## **PRECIZINĖS ILGIO MATAVIMO SISTEMOS DINAMINIŲ REIŠKINIŲ TYRIMAI**

Reikalavimai precizinėms aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemoms auga ir vis griežtėja įvairiais aspektais – jų patikimumo, informatyvumo ir kitais. Ypač aktualūs yra tikslumo reikalavimai, jų nuolatinis griežtėjimas. Tikslumo parametro tobulinimas yra tampriai susijęs su galimybe jį kontroliuoti ir kurti jo valdymo realiomis darbo sąlygomis modelius. Šiuolaikinėje pramonėje precizinių aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemų vertinimas vyksta įterptinės metrologijos sąlygomis, kai neįmanoma sukurti idealių kalibravimo sąlygų, visą laiką sistema veikia išoriniai aplinkos ir vidiniai tikslumą mažinantys trikdžiai, bei dažnai keliami įvairūs specifiniai gamybos reikalavimai. Tačiau precizinių aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemų kalibravimo tikslumas turi būti garantuojamas ir šiomis sąlygomis. Norint įvertinti ir pasiekti užsaiduotus tikslus turi būti identifikuoti ir išnagrinėti pagrindiniai precizinių aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemų neapibrėžties sandai, apžvelgti precizinių aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemų paklaidų tyrimo metodai ir priemonės. Turi būti identifikuoti pagrindiniai precizinių aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemų paklaidų šaltiniai [1, 2].

Darbe pagrindinis dėmesys skirtas nustatyti aplinkos ir precizinių aukšto tikslumo poslinkių matavimo sistemų elementų virpesių įtaką sistemos dinaminiam procesams dinaminiam režime. Darbo pagrindinis tikslas nustatyti aplinkos ir precizinės ilgio sistemos elementų virpesių pokyčio įtaką sistemos dinaminiam procesams, kai nagrinėjama sistema dirba dinaminiam režime.

Dinaminių parametų matavimui buvo panaudotos Brüel & Kjør matavimo priemonės. 3.2 paveiksle pateikta linijinio keitiklio kartu su tvirtinimo konstrukcija sistemos dinaminių charakteristikų nustatymo blokinė schema. 3.2 paveiksle parodytos virpesių matavimo priemonės: 1. Trijų ašių akcelerometras 4506 ir vienašiai seisminiai akcelerometrai 8344 (1 pav. 3 pozicija); 2. Kilnojama matavimo rezultatų apdorojimo įranga „3660-D“ su kompiuterių (1 pav. 1 pozicija). 3. Žadinimo vibratorius su valdymu ir stiprintuvu (1 pav. 4 ir 5 pozicijos). Akcelerometrai 4506 ir 8344 buvo tvirtinami ant linijinio keitiklio atitinkamų taškų, vienas 4506 akcelerometras buvo tvirtinamas prie linijinio keitiklio matavimo galvutės, kiti 8344 akcelerometrai buvo tvirtinamas prie linijinio keitiklio korpuso. Duomenų iš linijinio keitiklio gavimui buvo panaudotos PicoScope 3203 matavimo priemonės (1 pav. 6 pozicija).



**1 pav.**  
 Precizinės aukšto tiks-  
 lumo poslinkių mata-  
 vimo sistemos kartu su  
 tvirtinimo konstrukcija  
 dinamiųjų charakteristikų  
 nustatymo stendo blok-  
 inė schema

*Išvados.* Darbe atlikti keitiklio analitiniai dinaminiai tyrimai. Tyrimus sudarė keitiklio mechaninės konstrukcijos skaičiuojamieji tyrimai, buvo atlikta keitiklio galvutės modalinė analizė. Pagrindinės deformacijos yra viršutinėje ant spyruoklių esančioje keitiklio galvutės konstrukcijos dalyje.

Darbe atlikti fotoelektrinio modulinio linijinio precizinio keitiklio sistemų, kai naudojami keitikliai su vientisu ir sudurtiniais korpusais, eksperimentiniai tyrimai. Atliekant eksperimentinius tyrimus buvo nustatomi tiriamųjų objektų dinaminiai parametrai prie įvairių vidinių ir išorinių sąlygų. Tyrimų pagrindų galima numatyti analogiškų sistemų dinamiųjų parametų pokyčių dėsningumas.

## Literatūra

- [1] D. Gurauskis, A. Kilikevičius, S. Borodinas, and A. Kasparaitis, "Analysis of geometric and thermal errors of linear encoder for real-time compensation," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 296, pp. 145–154, Sep. 2019.
- [2] A. Kilikevičius and A. Kasparaitis, "Dynamic research of multi-body mechanical systems of angle measurement," *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, vol. 18, no. 8, pp. 1065–1073, Aug. 2017.

**P. Uvarovas,  
K. Kilikevičienė**

*Vilniaus Gedimino  
technikos universitetas*

## **AUKŠTOS SKYROS PRECIZINIŲ KEITIKLIŲ DINAMINIŲ REIŠKINIŲ TYRIMAI**

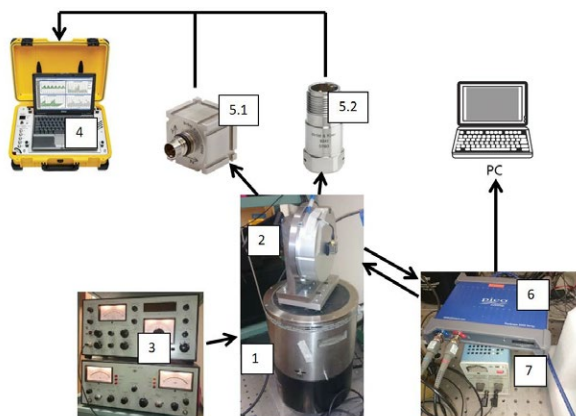
Aukštos skyros precizinių keitiklių padėties nustatymas yra aprašomas kaip precizinė objekto atskaita taško atžvilgiu. Prie padėties nustatymo sistemų yra priskiriami įvairaus tipo optiniai keitikliai, kurie yra labai svarbus gamyboje. Reikalavimai tiksliesiems aukštos skyros preciziniams keitikliams nuolat auga. Tikslumo didinimas jų gamybos tikslumo sąskaita ne visuomet įmanomas ir tuo labiau, ne visuomet techniškai ir ekonomiškai efektyvus [1, 2].

Darbe pagrindinis dėmesys skirtas nustatyti aplinkos ir aukštos skyros precizinio keitiklio sistemos elementų virpesių įtaką šios sistemos dinaminiam procesams dinamiiniame režime. Šiame darbe atliekami tyrimai yra taikomi specifinėms aukštos skyros precizinio keitiklio sistemos dinaminių procesų uždaviniams spręsti, gauti rezultatai gali būti panaudoti kuriant ir kitos paskirties precizines sistemas.

Aukštos skyros precizinių keitiklių dinaminių parametų matavimui buvo panaudotos 1 pav. pateiktos matavimo priemonės: trijų ašių akcelerometras 4506 ir vienos ašies akcelerometras 8341; kilnojama matavimo rezultatų apdorojimo įranga „9727“ su kompiuteriu; žadinimo vibratorius (4811) su valdymu ir stiprintuvu; duomenų iš aukštos skyros kodinio precizinio kampo keitiklio gavimui buvo panaudotos PicoScope matavimo priemonės. Akcelerometrai 4506 buvo tvirtinami ant keitiklio atitinkamų taškų ir akcelerometras 8341 buvo tvirtinamas prie vibratoriaus judamo pagrindo.

*Išvados.* Atlikti dinaminių aukštos skyros kodinio precizinio kampo keitiklio savybių tyrimai leidžia įvertinti darbinis parametrus, kurie turi įtakos kokybinėms keitiklio savybėms (tikslumas ir stabilumas). Gautų tyrimų pagrindu gali būti optimizuojama aukštos skyros kodinio precizinio kampo keitiklio konstrukciją (optroninės poros, skalės, guolių tvirtinimas), siekiant sumažinti virpesių įtaką ir padidinti keitiklio darbo patikimumą/stabilumą dinamiiniame režime.

Atliekant eksperimentinius tyrimus buvo nustatomos aukštos skyros kodinio precizinio kampo keitiklio dinaminiai parametrai prie įvairių vidinių ir išorinių sąlygų. Tyrimų pagrindų galima numatyti analogiškų sistemų dinaminių parametų pokyčių dėsningumas. Atlikti tyrimai parodė pasireiškiančias kampinio keitiklio sistemos 500-550 Hz, 800-900 Hz, 1100-1200 Hz ir 1300-1350 Hz rezonansines zonas.



**1 pav.**  
 Aukštos skyros kodinio  
 precizinio kampo keitiklio  
 kartu su tvirtinimo kons-  
 trukcija sistemos dinami-  
 nių charakteristikų nusta-  
 tyimo stendo schema

Apibendrinant tyrimo rezultatus matyti, kad aukštos skyros kodinio precizinio kampo keitikliai turi skirtingą konstrukcijos atsaką į dinaminį poveikį, atsižvelgiant į veikiančių virpesių kryptį. Paklaidų vertės tam tikrose vietose gali viršyti keitiklio tiks-  
 lumą, net esant pagreičio lygiams, kai gamintojai nerekomenduoja naudoti apsaugos  
 nuo vibracijos elementų.

### Literatūra

- [1] D. Gurauskis, A. Kilikevičius, S. Borodinas, and A. Kasparaitis, "Analysis of geometric and thermal errors of linear encoder for real-time compensation," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 296, pp. 145–154, Sep. 2019.
- [2] A. Kilikevičius and A. Kasparaitis, "Dynamic research of multi-body mechanical systems of angle measurement," *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, vol. 18, no. 8, pp. 1065–1073, Aug. 2017.



**D. Berenis<sup>1</sup>,  
K. Kazlauskas<sup>2</sup>**

*Vilniaus Universitetas,  
Fizikos Fakultetas, Fotonikos  
ir Nanotechnologijų institutas*

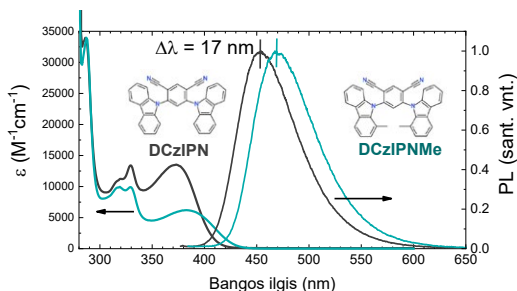
## **ORGANINIO ŠVIESTUKO SU IZOFTALONITRILLO TADF SPINDUOLIŲ GAMYBA IR OPTIMIZAVIMAS**

Organiniai šviestukai (angl. k. organic light-emitting device, OLED) pasižymi dideliu šviesiniu našumu, lankstumu, pritaikymu didelio ploto apšvietimo prietaisams bei palyginamai lengvu spinduolių spalvos derinimu [1–3]. Todėl OLED yra labai patraukli technologija komerciniams prietaisų ekranams ir apšvietimui. Dabar pramonėje naudojami našūs fosforescenciniai organiniai šviestukai, tačiau jie savyje turi sunkiųjų metalų, tokių kaip iridis ar platina, kurie didina prietaisų kainą, apriboja molekulių dizaino laisvę, paverčia organines molekules toksiškomis [4]. Taip pat santykinai silpni ryšiai tarp metalo ir ligandų neleidžia realizuoti stabilių mėlynų OLED, tai yra vienų didžiausių fosforescencinių OLED problemų [4]. Todėl vis daugiau populiarumo rinkoje ir mokslinėje srityje susilaukia naujos kartos organiniai spinduoliai, pasižymintys šiluma aktyvuota uždelstąja fluorescencija (angl. k. thermally activated delayed fluorescence, TADF). Dėl sukinių statistikos 75% organiniame šviestuke suformuotų eksitonų yra tripletiniai ir jie nedalyvauja elektroluminescencijoje, kadangi tokį procesą draudžia kvantinės mechanikos dėsniai [5]. TADF leidžia per atgalinę interkombinacinę konversiją konvertuoti nespindulinius tripletinius eksitonus į spindulinius singuletus imant šiluminę energiją iš aplinkos. Tokiu būdu teoriškai gali būti pasiektas 100% kvantinis našumas spinduolio medžiagoje. Yra pademonstruota, jog kruopščiai parinkus specifinę molekulės struktūrą turinčią erdviškai atskirtas elektronų donorines ir akceptorines dalis, toks procesas gali vykti kambario temperatūroje [6]. Šios medžiagos turi potencialo pakeisti dabar paplitusius našius fosforescencinius spinduolius.

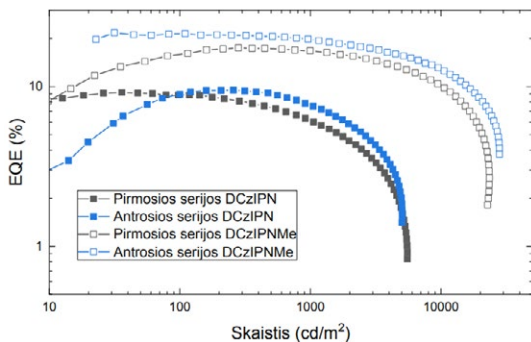
Šio tyrimo metu buvo pagaminti OLED prototipai su nauju TADF spinduoliu, turinčiu akceptorinį izoftalonitrilo fragmentą. Naujas spinduolis buvo susintetintas prijungus metilo (Me) grupes prie 2015 metais pademonstruoto našaus mėlyno spinduolio – 4,6-di(-karbazol-9-yl)benzene-1,3-dicarbonitrile (DCzIPN) [7] karbazolo donorinių fragmentų. DCzIPN molekulė dėl mažo karbazolų kiekio pasižymi gana dideliu energijos tarpu ir iki šiol šis junginys yra vienas perspektyviausių mėlynoje spektro srityje šviečiančių spinduolių. Prijungiant prie molekulės Me grupes siekta stipriau erdviškai atskirti elektronų akceptorinę (izoftalonitrilo) ir donorinę (karbazolo) grupes, ir keičiant erdvinę sąveiką padidinti atgalinės interkombinacinės konversijos spartą bei sumažinti molekulės lankstumą ir virpesinius nuostolius. Taip pat šiame projekte atliktas OLED optimizavimas etapiškai keičiant prietaiso struktūrą bei spinduolio koncentraciją emisiniame sluoksnyje siekiant efektyvios krūvininkų injekcijos į aktyvųjį sluoksnį ir konversijos į šviesą.

Apibendrinant tirpalų ir plonų sluoksnių su TADF spinduoliais fotoluminescencijos (PL) matavimų rezultatus, galima teigti, jog prie DCzIPN prijungus metilo grupes,

jų sukeltas erdvinis molekulių donorinių fragmentų išsukimas iš plokštumos sustiprina TADF molekulių krūvio pernašos (angl. k. charge transfer, CT) savybes. Tokiu būdu buvo sumažintas molekulių sužadinių energijų tarpas  $\Delta E_{ST}$ . Dėl susilpnėjusio osciliatoriaus stiprio  $\sim 2$  kartus sumažėjo pirminės fluorescencijos sparta, tačiau taip pat  $\sim 18$  kartų išaugo atgalinės interkombinacinės konversijos sparta ir  $\sim 15$  kartų – uždelstos fluorescencijos sparta. Šie PL pokyčiai lėmė, jog sluoksniai su modifikuotu spinduoliu pasižymėjo santykinai didesniu PL kvantiniu našumu ( $\phi_{PL\ vak} = 74\%$ ), lyginant su analogiškais sluoksniais su nemonifikuotu spinduoliu ( $\phi_{PL\ vak} = 51\%$ ).



**1 pav.**  
Tiriamų molekulių suger-  
ties ir PL spektrai tolueno  
tirpaluose.



**2 pav.**  
Pirmosios ir antrosios  
OLED serijų prietaisų  
išorinio kvantinio našumo  
(EQE) priklausomybė nuo  
išspinduliuoto skaičiaus.

Nežymi spinduolio modifikacija metilo grupėmis taip pat turėjo didelę įtaką OLED prietaiso savybėms. Lyginant tarpusavyje antrosios serijos OLED (2 pav.), prietaisas su modifikuotu spinduoliu pasižymėjo 2,3 kartų didesniu maksimaliu išoriniu kvantiniu našumu (angl. k. external quantum efficiency, EQE) bei žymiai silpnesniu šio našumo nuokryčiu didinant sužadimo intensyvumą. Tačiau stipriau išreikšta CT būseną modifikuotame spinduolyje, sąlygojo OLED prietaiso spinduliuotės bangos ilgio postūmį iš sodrios mėlynos į žalsvai mėlyną sritį. Atlikta OLED struktūros optimizacija parodė, jog pridėtas PVK sluoksnis pagerina OLED charakteristikas – padidina EQE, sumažina įsijungimo įtampą. Taip pat patikrinta, jog 7 wt% DCzIPNMe spinduolio koncentracija emisiniame sluoksnyje, iš tirtų, yra optimali maksimalaus išorinio kvantinio našumo atžvilgiu. Be to, atlikus šviesos ištrūkimo modeliavimą nustatyta, jog našiausio šiame darbe pademonstruoto OLED EQE gali dar būti padidintas iki 23 %, kas sąlygoja, jog su modifikuotu spinduoliu yra pasiekiamas beveik 100 % vidinis kvantinis našumas.

---

## Literatūra

- [1] K. Sun, Y. Sun, W. Jiang, S. Huang, W. Tian, Y. Sun, Highly efficient and color tunable thermally activated delayed fluorescent emitters and their applications for the solution-processed OLEDs, *Dye. Pigment.* 139 (2017) 326–333. doi:10.1016/j.dyepig.2016.12.037.
- [2] J. Song, K.H. Kim, E. Kim, C.K. Moon, Y.H. Kim, J.J. Kim, S. Yoo, Lensfree OLEDs with over 50% external quantum efficiency via external scattering and horizontally oriented emitters, *Nat. Commun.* 9 (2018). doi:10.1038/s41467-018-05671-x.
- [3] T.-H. Han, Y. Lee, M.-R. Choi, S.-H. Woo, S.-H. Bae, B.H. Hong, J.-H. Ahn, T.-W. Lee, Extremely efficient flexible organic light-emitting diodes with modified graphene anode, *Nat. Photonics.* 6 (2012) 105–110. doi:10.1038/nphoton.2011.318.
- [4] F.B. Dias, T.J. Penfold, M.N. Berberan-Santos, A.P. Monkman, Photophysics of Thermally Activated Delayed Fluorescence in Organic Molecules, (2018) 227–261. doi:10.1142/9789813230194\_0006.
- [5] A. Köhler, *Electronic Processes in Organic Semiconductors*, Wiley-VCH, 2015.
- [6] H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, Highly efficient organic light-emitting diodes from delayed fluorescence, *Nature.* 492 (2012) 234–238. doi:10.1038/nature11687.
- [7] Y.J. Cho, K.S. Yook, J.Y. Lee, Cool and warm hybrid white organic light-emitting diode with blue delayed fluorescent emitter both as blue emitter and triplet host, *Sci. Rep.* 5 (2015) 1–7. doi:10.1038/srep07859.

**P. Dolmantas<sup>1,2</sup>,  
Š. Meškiniš<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Kauno technologijos universitetas,  
Fizikos katedra

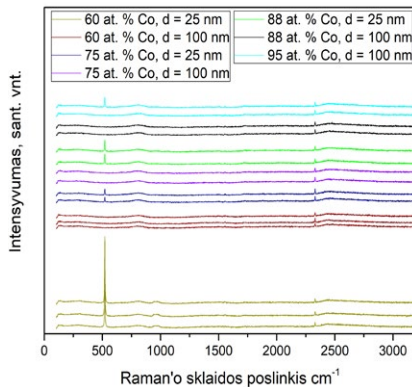
<sup>2</sup> Kauno technologijos universitetas,  
Medžiagų mokslo institutas

## AMORFINĖS ANGLIES IR KOBALTO NANOKOMPOZITŲ KAITINIMO ĮTAKOS TYRIMAS IR TAIKYMAS TIESIOGINEI GRAFENO SINTEZEI

Grafenas – dvimatis nanokristalas, kurį sudaro viena (ar kelios) grafito atominės plokštumos. Grafeno elektroninė struktūra ir geometrija lemia jo išskirtines fizikines savybes, tokias kaip dideli kambario temperatūros elektronų ir skylių judriai ( $2,5 \cdot 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) [1], tempimo riba  $\sim 130 \text{ GPa}$ , Jungo modulis  $1 \text{ TPa}$  [2], aukštas šiluminis laidumas (didesis kaip  $3000 \text{ W mK}^{-1}$ ) [3] ir kt.

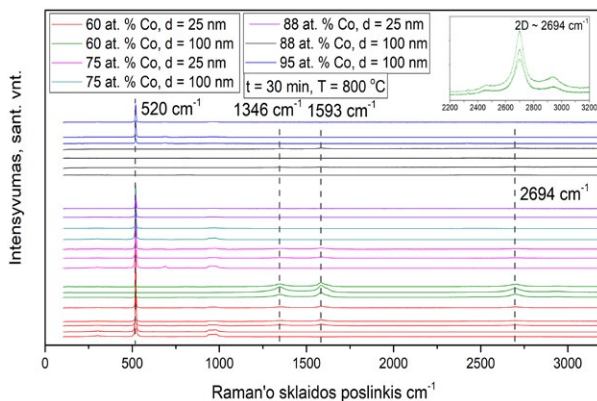
Šiame darbe nagrinėjama grafeno sintezė atkaitinant amorfinės anglies ir kobalto nanokompozitines dangas. Skirtingos atominės koncentracijos kobalto ir anglies kompozitinės dangos buvo užaugintos ant silicio pagrindų magnetroninio dulkinimo metodu. Atlikti dangų atkaitinimo eksperimentai siekiant rasti optimalią kobalto ir anglies koncentraciją, dangos storį bei kaitinimo laiką, kuriems esant gaunamas mažiausias defektų koncentracijos ir mažiausio sluoksnių skaičiaus grafenas. Iš atrinktų bandinių pagaminti silicio-grafeno Šotkio diodai ir nagrinėjamos jų fotovoltinės savybės.

Nekaitintų skirtingos koncentracijos  $100 \text{ nm}$  ir  $25 \text{ nm}$  storio kobalto ir anglies kompozitinių dangų Raman'o sklaidos spektrai pateikti 1 pav. Matyti, kad prieš kaitinimą, spektrai nepasižymi amorfinei angliai būdingomis smailėmis, matyti tik mažo intensyvumo  $\sim 2330 \text{ cm}^{-1}$  smailė, kuris atsiranda dėl adsorbuoto atmosferinio azoto ( $\text{N}_2$ ) [4] ir Si smailė ties  $\sim 520 \text{ cm}^{-1}$ .



**1 pav.**  
Nekaitintų kobalto-anglies dangų Raman'o sklaidos spektrai

Po dangų kaitinimo 800 °C temperatūroje 30 min. argono dujų sraute, Raman spektrai pavaizduoti 2 pav. 100 nm storio 60 at. % Co ir 40 at. % C bandinyje aiškiai matyti D smailė ties ~1346 cm<sup>-1</sup>, G smailė ~1593 cm<sup>-1</sup> bei 2D smailė ~2694 cm<sup>-1</sup>.

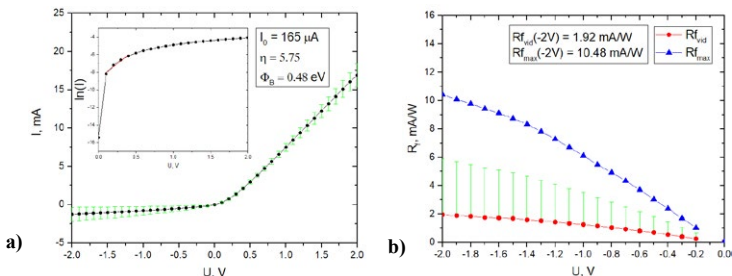


**2 pav.**  
Kobalto-anglies dangų  
Raman'o spektrai po  
30 minučių kaitinimo  
argone 800 °C

Atlikus plazminį išdūnimo H<sub>2</sub> plazmoje (galios tankis 1W/cm<sup>2</sup>, temperatūra 20 °C, išdūnimo laikas – 10 minučių) ir cheminį išdūnimą 70 % HNO<sub>3</sub> (išdūnimo laikas - 12 minučių) buvo įvertintas grafeno sluoksnių skaičius, remiantis I<sub>2D</sub>/I<sub>G</sub> ir I<sub>G</sub>/I<sub>SI</sub> santykiu [5].

Nustatyta, kad 60 at.% Co ir 40 at. % C 100 nm storio bandiniuose susidarė 7 sluoksnių storio grafenas. Tokios koncentracijos ir storio bandiniai buvo naudojami diodų formavimui ant n tipo silicio. Heterosandūros tamsinė voltamperinė charakteristika būdinga diodui (3 pav. a)). Nustatytas efektinis barjero aukštis  $\phi_B = 0,48 \text{ eV}$ , o idealumo faktorius  $\eta = 5.75$ . Maksimali ir vidutinė fotoatsako vertės esant 2 V atbulinei įtampai yra atitinkamai lygios 10,48 mA/W ir 1,92 mA/W (3 pav. b)).

**3 pav.**  
a) Tamsinė grafeno  
Šotkio diodo I-V cha-  
rakteristika. Įterptas  
grafikas skirtas diodo  
charakteristikų nusta-  
tymui; b) Fotoatsako  
priklausomybė nuo  
įtampos apšvietus  
730 nm bangos ilgio  
šviestuku



Gauta idealumo faktoriaus vertė rodo, kad diodui būdinga ne tik viršbarjerinė termoelektroninė emisija bet ir kiti pernašos mechanizmai. Tam turi įtakos ir grafeno kokybė. Be to, tarp silicio-grafeno galimai esantis dielektriko sluoksnis (SiO<sub>2</sub>) verčia Šotkio diodą elgtis kaip metalo-dielektriko-puslaidininkio diodą, kuriam būdingos žemesnės srovės, mažesnis barjero aukštis ir didesni idealumo faktoriai [6]. Atbuline kryptimi stebimos nuotėkio srovės (1,26 μA esant 2 V atbulinei įtampai) dėl tunelinės srovės komponentės [6].

---

## Literatūra

- [1] A. S. Mayorov *et al.*, 'Micrometer-scale ballistic transport in encapsulated graphene at room temperature', *Nano Lett.*, vol. 11, no. 6, pp. 2396–2399, 2011.
- [2] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, 'Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene', *Science (80- )*, vol. 321, no. 5887, pp. 385–388, Jul. 2008.
- [3] A. A. Balandin, 'Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials', *Nat. Mater.*, vol. 10, pp. 569–581, 2011.
- [4] H. Kato, N. Itagaki, and H. J. Im, 'Growth and Raman spectroscopy of thickness-controlled rotationally faulted multilayer graphene', *Carbon N. Y.*, vol. 141, no. 76–82, pp. 1–5, 2018.
- [5] J. S. Hwang *et al.*, 'Imaging layer number and stacking order through formulating Raman fingerprints obtained from hexagonal single crystals of few layer graphene', *Nanotechnology*, vol. 24, pp. 1–10, 2013.
- [6] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2006.

**M. Gužauskas,  
D. Volyniuk**

*Kauno Technologijos  
Universitetas, Chemijos  
Technologijos Fakultetas, Polimerų  
Chemijos ir Technologijos Katedra*

## **MĖLYNŲ OLED SPINDUOLIŲ SU VIRŠUTINIŲ SINGLETŲ- TRIPLETŲ KONVERSIJOS PROCESO SUSTIPRINTA FLUORESCENCIJA TYRIMAS**

Organiniai liuminoforai plačiai naudojami įvairiuose optoelektroniniuose prietaisuose kaip organiniai šviesą skleidžiantys diodai (OLED)[1] ir optiniuose sensoriuose[2]. Nauji organiniai liuminoforai su geresnėmis ar net unikaliomis savybėmis gali padidinti žinomų optoelektroninių prietaisų efektyvumą ar net leisti atrasti naujas šių medžiagų pritaikymo galimybes. Sukurti nauji junginiai su 5, 5-dioksi-fenotiazino, benzonono ir sulfo-dnii-4,1-phenileno fragmentais, bis[4-(5,5-dioksio-10H-fenotiazin-10-ik)fenil]metanonas (1) ir 10,10'-(sulfonyldi-4,1-fenilene)bis-10H-phenotiazine-5,5-dioksidas buvo tiriami šiame darbe siekiant surasti labiausiai tinkamą pritaikymą. Su šiuo tikslu, šios dvi medžiagos buvo tiriamos įvairiais spektroskopiniais metodais, tokiais kaip fotoluminescencijos priklausomybė nuo temperatūros. Abi medžiagos, 1 ir 2, pasižymėjo mėlynos spalvos emisija, tiek kietos būsenos bandiniuose, tiek silpnai poliškuose tirpaluose. Taip pat, abiejų medžiagų emisija galima charakterizuoti kaip termišškai aktyvuota uždelsta fluorescencija, kas leidžia pasiekti 100 % vidinį kvantinį efektyvumą. Dėl to, šios medžiagos buvo naudotos organiniuose švietestukuose kaip šviesą skleidžiantys sluoksniai. OLED prietaisai su 1 ir 2 medžiaga pasiekė 1,2 % išorinį kvantinį efektyvumą. Tokie sąlyginai žemi efektyvumai yra susiję dėl žemų fotoluminescencijos kvantinių išieigų kietos būsenos bandiniuose (iki 9,3 %). Šio tyrimo metu medžiagoms 1 ir 2 buvo taikomas apdorėjimas UV šviesa. Šis eksperimentas parodė, kad tirpalus su medžiaga 1 paveikus UV šviesa, tirpalo emisinės savybės pasikeičia. Taigi, šitame darbe pirma kartą aprašomas sustiprintos emisijos fenomenas, kuomet emisijos spalva pasikeičia, o intensyvumas išauga, sukeltas UV spinduliuotės. Žinant tai, fotofizikinės savybės apdorotų 1 tirpalų buvo tiriamos. Pastebėta, kad apdorojant UV šviesa intensyvumas gali išaugti net iki 83 kartų, o emisijos spektras pasislinkti iki 88 nm link didesnės energijos bangos ilgių (CIE koordinatų sistemoje spektrų padėtis pasikeičia iš (0,29; 0,45) į (0,17; 0,16)). Medžiagos 1 emisijos fenomenas paaiškintas UV spinduliuotės sukeltu molekulinės konformacijos pakitimu. Buvo parodyta, kad atrastos medžiagos 1 savybės gali būti naudingos kaip unikalus UV spinduliuotės dozimetru. Medžiaga 1 DMF tirpale 0-350 μW UV galios regione parodė linijinę priklausomybę su 115500 ( $R^2=0.93$ ) krypties koeficientu, kas rodo stiprų jautrumą UV spinduliuotei.

### **Literatūra**

- [1] KROTKUS, S. *Advances in Organic Displays and Lighting*. In [interaktyvus]. 2016. Prieiga per internetą: <[https://tud.qucosa.de/landing-page/?tx\\_dlf\[id\]=https%3A%2F%2Ftud.qucosa.de%2Fapi%2Fqucosa%253A30995%2Fmets](https://tud.qucosa.de/landing-page/?tx_dlf[id]=https%3A%2F%2Ftud.qucosa.de%2Fapi%2Fqucosa%253A30995%2Fmets)>.
- [2] GARCIA-BREIJO, E. et al. *Organic Sensors: Materials and Applications*. Institution of Engineering and Technology, 2016. ISBN 184919985X.

**Š. Jankauskas<sup>1</sup>,  
A. Lazauskas<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Kauno technologijos universitetas,  
Fizikos katedra*

<sup>2</sup> *Kauno technologijos universitetas,  
Medžiagų mokslo institutas*

## **TIESIOGIAI SINTEZUOTO GRAFENO OPTINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS IR TAIKYMAS DRAUSTINĖS ENERGIJŲ JUOSTOS PLOČIO ĮVERTINIMUI**

Grafenas, dvimatė medžiaga, kurios plokštuma yra šešiakampiais išsidėsčiusių anglies atomų visuma. Dėl unikalių savybių, tokių kaip, atsparumas mechaniniam poveikiui [1,2], išskirtinis šilumos laidumas [3], nepaprastas krūvininkų mobilumas [4] bei didelis šviesos pralaidumas regimojoje spektro dalyje [5], grafenas gali būti taikomas daugelyje pramonės šakų, įskaitant ir puslaidininkinių prietaisų gamybą. Deja, šios medžiagos panaudojimą greitaveikių tranzistorių gamybai stabdo 0 eV draustinės juostos plotis [6]. Siekiant atverti draustinę juostą naudojami įvairūs metodai, tarp jų ir priemaišinių atomų įterpimas ar defektų esančių medžiagoje, manipuliavimas.

Grafeno sintezė įprastai vykdoma ant puslaidininkinių bei dielektrinių pagrindų, naudojant pernešimo būdą. Iš pradžių, grafenas yra auginamas ant Cu ar Ni folijų, cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu. Tuomet vykdomas ilgas ir sudėtingas pernešimo procesas ant norimų pagrindų, kurio metu neišvengiama adsorbatų, defektų atsiradimo ir kitų, struktūrą bloginančių artefaktų [7]. Ši metodika neigiamai veikia medžiagos savybes, todėl ieškoma alternatyvų, leidžiančių išlaikyti sąlyginai didelį medžiagos paviršiaus plotą bei išvardintų, unikalių savybių, rinkinį.

Parodyta, kad grafeną galima auginti tiesiogiai ant įvairių puslaidininkinių ir dielektrinių pagrindų. Tai atliekama, patobulinant įprastinę cheminio nusodinimo iš garų fazės sistemą, panaudojant mikrobangės plazmos generatorių [8]. Nors taip auginamas grafenas pasižymi didesniu defektų tankiu nei auginamas įprastiniu cheminio nusodinimo iš garų fazės būdu, tačiau teigiama, kad parinkus reikiamus auginimo parametrus, galima to išvengti. Tyrimų, apie tiesiogiai sintezuotą grafeną sparčiai daugėja, tačiau bandymų, įvertinti optinės draustinės juostos plotį, nematyti. Todėl negalima atmesti atvejo, kad auginamas, didesnį defektų kiekį turintis, grafenas gali pasižymėti nenuliniu draustinės juostos pločiu.

Šiame darbe buvo tirti grafeno bandiniai, kurių sintezė atlikta, naudojantis mikrobangės plazma aktyvuoto cheminio nusodinimo iš garų fazės sistema (Cyrannus I-6 (Iplas), GmbH). Bandinių sintezė atlikta tiek ant Si(100), tiek ir ant lydyto kvarco pagrindų, keičiant auginimo parametrus. Siekiant atlikti kokybišką, ant lydyto kvarco suformuoto grafeno analizę, visi pasirinkti auginimo parametrai, išskyrus trukmę, buvo sugretinti. Tokiu pačiu principu bandiniai auginti ir Si(100) atveju. Taip pat tirta ir azotu legiruota grafeno danga.

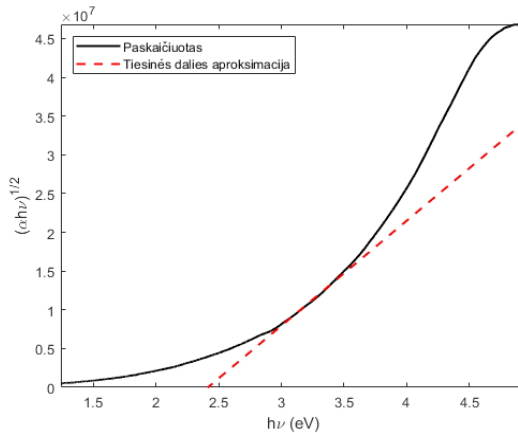
Ramano sklaidos spektroskopija rodo, kad grafenas, auginamas ant lydyto kvarco, pasižymi vertikalia geometrija, priešingai nuo to, kuris auginamas ant Si(100) pagrindų.



Azotu legiruoto grafeno atveju  $I_{2D}/I_G = 0,81$ , kas rodo 3-4 grafeno sluoksnių atvejį, o  $I_D/I_G = 1,35$ , kas leidžia manyti, jog šiuo atveju grafenas taip pat pasižymi dideliu defektų tankiu. Rentgeno spindulių fotoelektrinės spektroskopijos metodu ištyrus azotu legiruotą grafeną, pastebėta, kad atominių koncentracijų santykis N/C siekia 2,85%, kas įrodo, sėkmingą grafeno legiravimą azotu.

Vertinant vertikalaus grafeno optines savybes, galima įžvelgti ir auginimo trukmės įtaką – trumpiau auginto bandinio sugertis, kur kas mažesnė, nei ilgiau auginto grafeno atveju. Remiantis spektrų forma, taip pat pastebėti ir redukuoto grafeno oksido pėdsakai (sugerties smailė ties 262 nm).

Remiantis Tauko metodika, nustatyti optinių draustinių juostų pločiai ( $E_g$ ) yra ~2.4 eV abejais atvejais (1 pav.), kas leidžia manyti, jog gautas grafenas labiau primena redukuotą grafeno oksidą.



**1 pav.**  
Ant lydyto kvarco  
auginto grafeno Tauko  
grafikas.

### Literatūra

- [1] Liu, F., ir kt. *Physical Review B*, 2007, 76(6), 064120.
- [2] Lee, C., ir kt. *Science*, 2008, 321(5887), 385–388.
- [3] Balandin, A. A., ir kt. *Nano Letters*, 2008, 8(3), 902–907.
- [4] Mayorov, A. S., ir kt. *Nano Letters*, 2011, 11(6), 2396–2399.
- [5] Nair, R. R., ir kt. *Science*, 2008, 320(5881), 1308–1308.
- [6] Schwierz, F., ir kt. *Nanoscale*, 2015, 7, 8261–8283.
- [7] Zhang, Y., ir kt. *Acc. Chem. Res*, 2013, 46 (10), 2329–2339.
- [8] Woehrl, N., ir kt. *AIP Advances*, 2014, 4(4), 0–9.

**T. Jurkšas<sup>1</sup>, M. Juodėnas<sup>2</sup>,  
T. Tamulevičius<sup>1,2</sup>, A. Vailionis<sup>1,3</sup>,  
S. Tamulevičius<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Kauno technologijos universitetas Fizikos katedra,  
Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas, Lietuva

<sup>2</sup> Kauno technologijos universitetas Medžiagų mokslo  
institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51423, Kaunas, Lietuva

<sup>3</sup> Stanford Nano Shared Facilities, Stanford University,  
Stanford, CA 94305, USA

## TRIMAČIŲ MIKROSTRUKTŪRŲ FORMAVIMAS ULTRATRUMPŲ IMPULSŲ LAZERIU POLIDIMETILSILOKSANE

Polimerinės medžiagos yra plačiai naudojamos gaminant įvairius mikroprietaisus ir optinius elementus, dėl jų mažos kainos, lengvo pagaminimo, mechaninių savybių ir dėl jų skaidrumo regimojoje šviesos spektro dalyje. Viena tokių plačiausiai naudojamų polimerinių medžiagų yra polidimetilsiloksanas (PDMS). Polidimetilsiloksanas pasižymi ne tik skaidrumu, mažomis gamybos kainomis, bet ir elastingumu bei cheminiu atsparumu.

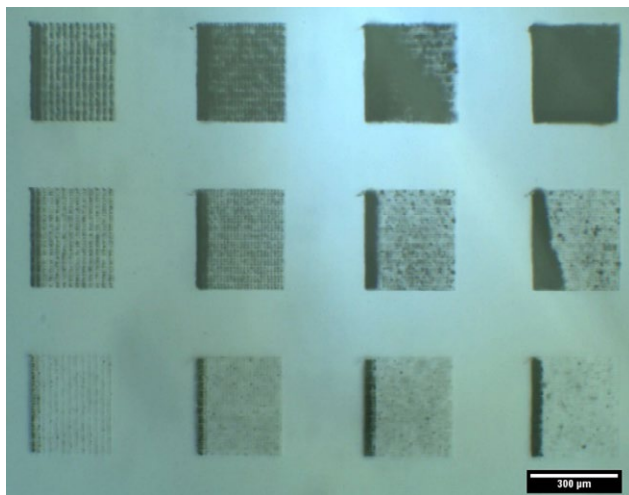
Skaidrių medžiagų mikroformavimas femtosekundiniais lazeriais susilaukia vis daugiau dėmesio optinių elementų formavimui medžiagos tūryje, nepažeidžiant jos paviršiaus [1]. Šis mikroformavimas yra vykdomas ir įvairiose skaidriose polimerinėse medžiagose. Buvo nustatyta, kad ultra trumpi femtosekundinio lazerio pulsai gali negrįžtamai pakeisti medžiagos lūžio rodiklį arba suformuoti mikroertmes polidimetilsiloksano tūryje [2]. O tai gali būti panaudojama sukuriant įvairias trimates struktūras PDMS tūryje nepažeidžiant jo paviršiaus ir nenaudojant kitų, daug sudėtingesnių ir litografijai imlesnių metodų, kaip minkštoji litografija, kurios metu antrinamas alternatyviu metodu suformuotas paviršius.

Keisdami femtosekundinio lazerio Yb:KGW impulsų energiją, impulsų tankį ir impulsų pasikartojimo dažnį, galime pasirinkti tarp PDMS negrįžtamo lūžio rodiklio pakyčių ir mikroertmių sudarymo jo tūryje.

Atliekant tyrimus buvo siekiama parinkti ultra trumpų impulsų lazerinio poveikio sąlygas efektyviam pažeidimų formavimuisi PDMS tūryje norint suformuoti trimates mikrostruktūras. Tyrimo metu buvo parinktos femtosekundinio lazerio poveikio sąlygos sukeliančios skirtingo tipo pažeidimus PDMS paviršiuje ir tūryje. Buvo suformuoti nesudėtingi mikroskysčių prietaisų elementai. Lazerinis poveikis buvo kiekybiškai apibūdinamas naudojant mikroskopines bei mikrokompiuterinės tomografijos metodikas.

Mikroformavimui atlikti buvo naudojamas Yb:KGW lazeris Pharos (Light Conversion) ir mikrofabrikavimo sistema FemtoLAB (Altechna R&D), su Galvo skeneriu ScanCubeIII 14 ir f-theta lęšiu. Struktūrų formavimui buvo naudojamas fundamentinės Yb:KGW lazerio harmonika (bangos ilgis 1030 nm), galia buvo keičiama nuo 150 mW iki 750 mW (1 pav.), impulso trukmė 290 fs, o pasikartojimų dažnis 200 kHz.

**1 pav.**  
*Pro optinį mikroskopą matomi 300 x 300 x 300 μm dydžio trimačiai kubai suformuoti PDMS tūryje po femtosekundinio lazerio apdorojimo esant skirtingiems energijos tankiams (energija didėja vertikalia kryptimi, impulsų tankis didėja horizontalia kryptimi)*



Trimatėms mikrostruktūroms apibūdinti buvo naudojama rentgeno mikrotomografija. Šis metodas leidžia ištirti tankio pokyčius medžiagoje su mikrometrine erdvine skiriamąja geba, jos nepažeidžiant.

Ištirtame lazerinio poveikio parametų diapazone buvo nustatyti trys būdingi pažeidimų tipai: lūžio rodiklio modifikacija, ertmių formavimasis ir mišrus režimas, kuriame pasireiškia abu pažeidimų tipai. Suformuotų trimačių kubų atveju mikroertmės pradeda formuotis esant 2,25 μJ impulso energijai, 150 impulsų/mm bei esant 12 μm tarp plokštumų, kurios sudaro šiuos kubus. Tokiu atveju bendras kubui tenkantis suminis energijos tankis 2,34 J/mm<sup>3</sup>.

### Literatūra

- [1] Gattass, R, Mazur, E. Femtosecond laser micromachining in transparent materials, *Nature Photonics* 2008, 2 p. 219–225.
- [2] Narayana, L, Deepak, K. Femtosecond-laser direct writing in polymers and potential applications in microfluidics and memory devices, *Optical Engineering* 2012, 51(7).

**K. Leitonas,  
R. Keruckienė,  
D. Volyniuk,  
J. V. Gražulevičius<sup>1</sup>**

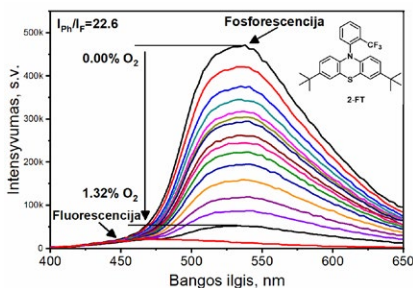
*Kauno technologijos universitetas*

## **BENZOTRIFLUORIDO IR FENTIAZINO DARINIŲ KAMABRIO TEMPERATŪROS FOSFORENCENCIJOS JAUTRUMO DEGUONIUI TYRIMAS**

Bemetalės organinės medžiagos, kurios pasižymi kambario temperatūros fosforencija (KTF) dėl pigios, paprastos sintezės, gerų optinių savybių, tinkamų energetinių lygmenų, stabilumo ir lengvo perdirbimo gali būti puikus pakaitalas jau spėjusioms pasenti organometalinėms medžiagoms, kurios savo struktūroje turi aplinkai žalingų sunkiųjų žemės metalų kaip iridis ar platina. Atsižvelgus į šias savybes, KTF medžiagos turi didelį potencialą būti plačiai pritaikomos saugumo, informacijos šifravimo, biologinių zondų bei optinių deguonies jutiklių sferose. [1-4]

Šio projekto metu buvo ištirtos du KTF efektu pasižymintys organiniai junginiai: 2 – ir 4 – trifluorbenzeno ir 3, 6 – di-tret-butil-fentiazino dariniai. Dėl pasirinktos donoro-akceptoriaus tipo junginio struktūros, oro aplinkoje abi medžiagų tirpalai pasižymėjo mėlyną spalvos fluorescencija, kuri pasireiškia dėl intramolekulinės krūvio pernašos, tačiau spindulių plonas plėvelės patalpinus į inertinę atmosferą, buvo aptiktas dvigubos emisijos reiškinys: spektras turėjo du maksimumus – aukštesnės energijos mėlyną fluorescencijos maksimumą bei žemesnės energijos fosforencijos maksimumą žalios spalvos regione.

Spindulių 1 % masės patalpinus į polimerinę Zeonex<sup>®</sup> matricą buvo pastebėtas didelis emisijos jautrumas deguonies kiekiui atmosferoje. Bedeguonėje aplinkoje emisija pakeitė spalvą iš mėlynos į žalią bei tapo intensyvesnė net 22.6 karto. Jautrumas deguoniui buvo ištirtas tiksliai kontroliuojant azoto (N<sub>2</sub>) ir deguonies (O<sub>2</sub>) dujų srautus bandinio matavimo kameroje. Buvo nustatyta, kad viena iš medžiagų gali būti jautri net labai mažam 0,02 % O<sub>2</sub> dujų kiekiui aplinkoje (1 pav.).



**1 pav.**  
2-FT medžiagos, patalpintos 1 % masės į polimerinę Zeonex<sup>®</sup> matricą fotoluminescencijos spektrai matuojant prie skirtingų O<sub>2</sub> dujų kiekių bandinio aplinkoje

## Padėka

Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712 veiklą „Studentų gebėjimų vykdyti MTEP veiklą ugdymas“

---

### Literatūra

- [1] J. Yang, X. Zhen, B. Wang, X. Gao, Z. Ren, J. Wang, Y. Xie, J. Li, Q. Peng, K. Pu and Z. Li, *Nature Communications*, 2018, **9**, 840.
- [2] R. Kabe, N. Notsuka, K. Yoshida and C. Adachi, *Advanced Materials*, 2016, **28**, 655–660.
- [3] L. Gu, H. Shi, M. Gu, K. Ling, H. Ma, S. Cai, L. Song, C. Ma, H. Li, G. Xing, X. Hang, J. Li, Y. Gao, W. Yao, Z. Shuai, Z. An, X. Liu and W. Huang, *Angewandte Chemie International Edition*, 2018, **57**, 8425–8431.
- [4] I. Sánchez-Barragán, J. M. Costa-Fernández, A. Sanz-Medel, M. Valledor and J. C. Campo, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2006, **25**, 958–967.

A. Hernandez<sup>1</sup>,  
N. Khinevich<sup>1,2</sup>,  
T. Tamulevičius<sup>1,3</sup>,  
S. Tamulevičius<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Materials Science, Kaunas University of  
Technology, Kaunas, Lithuania

<sup>2</sup>Applied Plasmonic Laboratory, Belarusian State University  
of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

<sup>3</sup>Department of Physics, Kaunas University of  
Technology, Kaunas, Lithuania

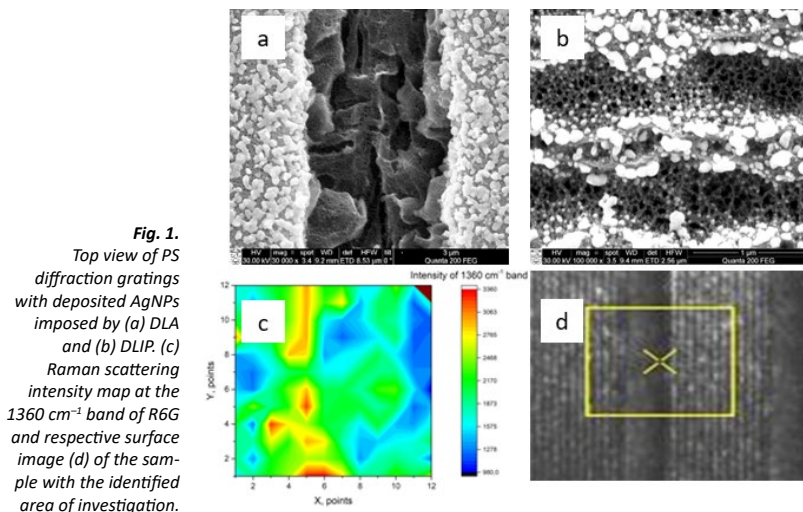
# POROUS SILICON DIFFRACTION GRATINGS WITH SILVER NANOPARTICLES AS SURFACE ENHANCED RAMAN SCATTERING SUBSTRATES

Raman scattering spectroscopy is a characterization method based on the interaction between molecules and laser light that take place when molecules vibrate and scatter light with different frequency than the incident beam [1]. The Raman scattering signal in general is very weak, therefore, it requires some enhancement pathways. Usually it is utilized employing rough films or nanoparticles of the noble metals deposited on glass or silicon surface. The enhancement itself is mainly due to the localized surface plasmon resonance [1]. Such structures are termed Surface Enhanced Raman Scattering (SERS) substrates. Recently SERS effect on porous silicon diffraction gratings was demonstrated [2].

In this work, two different laser microfabrication strategies, with the Yb:KGW femtosecond laser, were used to produce a diffraction grating in n-type crystal silicon <100>. The first one was direct laser ablation (DLA), where the laser beam was focused on the XYZ translated sample with a microscope objective [3]. It was used to impose diffraction gratings from 7  $\mu\text{m}$  to 14  $\mu\text{m}$  periods with the line width from 2 to 6  $\mu\text{m}$ . The second micromachining method used was the direct laser interference patterning (DLIP) where two coherent laser beams were intersected on the surface of the sample creating a periodical interference fringes [4]. Thus, producing a minimal period of 0.8  $\mu\text{m}$  and line width from 0.2 to 0.4  $\mu\text{m}$ . Linear dimensions of the structures were analyzed with a scanning electron microscopy. The laser-imposed silicon structures were electrochemically etched in a hydrofluoric acid solution resulting in porous silicon (PS) structures [2] with the porosity of 70% and an average pore size of 50 nm. Silver nanoparticles (AgNPs) of 60 nm average diameter were produced via Turkevich protocol [5]. AgNPs were deposited on the surface of the diffraction grating by immersion deposition.

Differences of AgNPs deposition density on planar PS surface and diffraction gratings in PS were observed. SERS activity was evaluated using 3D scanning confocal Raman spectroscopy with a 633 nm laser and using Rhodamine 6G (R6G) at  $10^{-6}$  M concentration as the test analyte.

AgNP covered PS DLA diffraction grating in the grooves demonstrated a Raman signal enhancement of two compared with plain PS surface (Fig. 1). It is believed that SERS activity for DLIP PS diffraction grating with AgNPs will show even better SERS performance.



**Fig. 1.**  
 Top view of PS  
 diffraction gratings  
 with deposited AgNPs  
 imposed by (a) DLA  
 and (b) DLIP. (c)  
 Raman scattering  
 intensity map at the  
 1360 cm<sup>-1</sup> band of R6G  
 and respective surface  
 image (d) of the sample  
 with the identified  
 area of investigation.

New kind of SERS substrate based on AgNPs in femtosecond laser-imposed diffraction grating of porous silicon were demonstrated.

### References

- [1] Mosier-Boss P. A. Review of SERS Substrates for Chemical Sensing. *Nanomaterials*, 2017, 7(6), 142.
- [2] Wang J., Jia Z. Lv C. Enhanced Raman scattering in porous silicon grating. *Opt. Express* 2018 Vol. 26, Issue 6, pp. 6507-6518.
- [3] Parmar V., Kanaujia P. K., Bommali R. K., Prakash G. V. Femtosecond Laser Based Fabrication of Nanostructured Silicon. *International Conference on Fibre Optics and Photonics 2016* Kanpur India 4–8 December 2016, paper W3A.91 ISBN: 978-1-943580-22-4.
- [4] Zabala Y., Perzanowski M., Dobrowolska A., Ka M., Polit A., Marszałek M., Direct Laser Interference Patterning: Theory and Application. *Acta Physica Polonica A* (2009) Vol. 115 No. 2 591-593.
- [5] Mazzonello A., Valdramidis V. V. Farrugia C., Grima J. N., Gatt R. Synthesis and characterization of silver nanoparticles, *International Journal of Engineering Research* (2017) 7 (3), 41.

S. Mačionis,  
D. Gudeika

## NAUJŲ TIOKSANTONO GRUPĖS TURINČIŲ JUNGINIŲ SINTEZĖ IR TYRIMAS

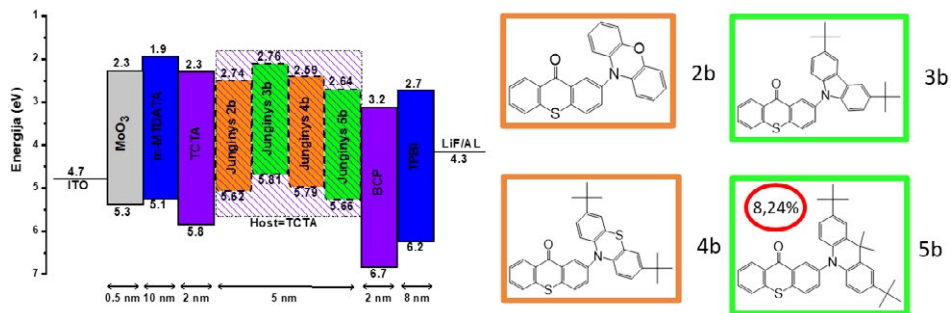
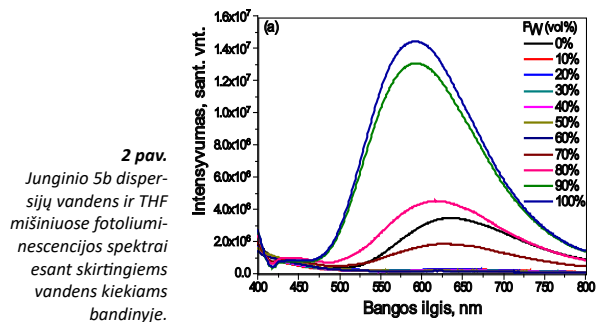
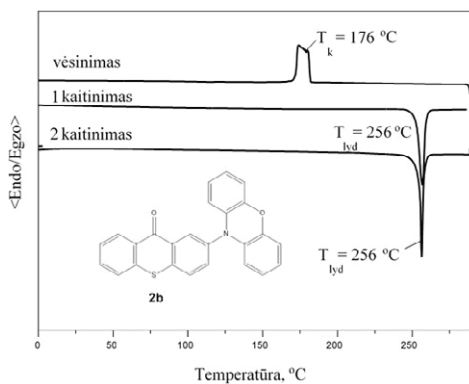
Kauno technologijos universitetas

Globalioje rinkoje ir moksle sparčiai vystomos naujausios optoelektroninių prietaisų technologijos. Mokslininkai kasdien stengiasi sukurti naujas tinkamomis savybėmis pasižyminčias organines puslaidininkines medžiagas dėl jų plataus panaudojimo galimybių bei sąlyginai pigios sintezės. Tokioms medžiagoms keliami itin aukšti reikalavimai - aukštas terminis stabilumas, tinkamas optinių, elektrocheminių ir fotofizikinių savybių spektras bei kuo paprastesnė sintezė.

Viena didžiausių optoelektroninių prietaisų pritaikymo sričių yra organiniai šviesos diodai arba OLED (*angl. Organic Light Emitting Diode*). Šiuo metu didelio susidomėjimo šioje srityje susilaukia medžiagos, pasižyminčios termiškai aktyvuota uždelstą fluorescencija (TADF, *angl. Thermally Activated Delayed Fluorescence*) ir agregacijos sustiprinta emisija (AIEE, *angl. Aggregation Induced Emission Enhancement*). Per pastaruosius keletą metų mokslinėje literatūroje aprašyti tokiomis savybėmis pasižymintys tioksantono grupės turintys junginiai [1].

Šiame darbe susintetinti ir ištirti keturi tioksantono fragmentus turintys junginiai 2b-5b, kurie buvo pritaikyti formuojant organinius šviestukus. Nauji bipoliniai junginiai gauti Buchwaldo-Hartwigo metodu atlikus reakcijas tarp elektronų akceptorines savybes turinčio tioksantono darinio ir keturių skirtingų donorinių junginių, t.y. 10*H*-fenoksazino, 3,6-di-*tert*-butil-karbazolo, 3,7-di-*tert*-butil-fentiazino ir 2,7-di-*tert*-butil-9,9-dimetil-9,10-dihidroakridino. Susintetinti junginiai pasižymėjo aukštu terminiu stabilumu. Jų terminio skilimo pradžios temperatūra siekė 366 °C. Junginiai sudarė molekulinis stiklus su aukštomis stiklėjimo temperatūromis, kurios siekė 116 °C (**1 pav.**). Atlikus fotofizikinių savybių tyrimus, nustatyta, kad susintetinti junginiai pasižymi termiškai aktyvuota uždelstą fluorescencija ir agregacijos sustiprinta emisija (**2 pav.**). Ištirti junginiai panaudoti formuojant organinius šviestukus. Prietaiso, kuriame kaip spinduolis buvo panaudotas 2-(2,7-di-*tert*-butil-9,9-dimetilakridin-10(9*H*)-il)-9*H*-tioksanten-9-onas, maksimalus išorinis kvantinis efektyvumas siekė 8,24 % (**3 pav.**).





## Literatūra

- [1] Wang, Z., Yunchuan, L. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2016, 8, p. 8627-8636.

**M. Mikalkevičius<sup>1</sup>,  
M. Juodėnas<sup>2</sup>, T. Tamulevičius<sup>1,2</sup>,  
A. Tamulevičienė<sup>1,2</sup>**

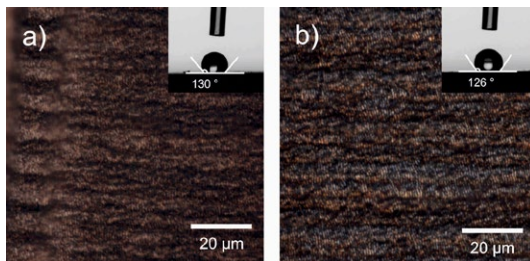
<sup>1</sup> Kauno Technologijos Universitetas, Matematikos  
ir gamtos mokslų fakultetas, Fizikos katedra,  
Studentų g. 50, LT-51368, Kaunas, Lietuva

<sup>2</sup> Kauno Technologijos Universitetas,  
Medžiagų mokslo institutas,  
K. Baršausko g. 59, LT-51423, Kaunas, Lietuva

# NERŪDIJANČIO PLIENO VILGUMO KAMPO VALDYMAS NAUDOJANT FEMTOSEKUNDINIŲ LAZERIŲ INDUKUOTAS PERIODINES STRUKTŪRAS IR AMORFINĖS DEIMANTO TIPO ANGLIES DANGŲ NUSODINIMĄ

Nerūdijantis plienas yra labai plačiai įvairiems taikymams naudojama medžiaga. Paviršiaus vilgumą galima valdyti arba keičiant pačią medžiagą, arba formuojant struktūras medžiagos paviršiuje. Vienas iš būdų keisti paviršiaus šiurkštumą yra naudojant ultratrumpus lazerio impulsus. Kietų kūnų apdorojimas naudojant didelio intensyvumo poliarizuotą lazerio šviesą šalia jų abliacijos slenksčio gali paskatinti nanomatmenų dydžio struktūrų saviformavimąsi. Šios struktūros yra vadinamos lazeriu indukuotomis periodinėmis paviršiaus struktūromis (angl. Laser induced periodic surface structures - LIPSS). LIPSS formavimas medžiagų paviršiuose suteikia įvairių savybių, tokių kaip: pagerėjęs ar pablogėjęs vilgumas, pakitusios tribologinės savybės, šviesos difrakcija bei optiniai pritaikymai [1], antibakteriniai paviršiai [2] ir t.t. Be to, drėkinimas gali būti papildomai kontroliuojamas paviršių padengiant hidrofobine amorfinės deimanto tipo anglies plėvele (DTAD), kuri galėtų padidinti vilgumo kampą.

Šiame darbe buvo naudota tiesiškai poliarizuota 1030 nm bangos ilgio Yb: KGW femtosekundinio lazerio spinduliuotė. Plieno plokštelės paviršius buvo skenuojamas lazerio pluoštu keičiant impulsų energiją ir impulsų persidengimą. Amorfinės deimanto tipo anglies dangos buvo nusodintos ant neapdoroto ir lazeriu apdoroto nerūdijančio plieno paviršių, naudojant tiesioginę jonų pluošto sintezę iš heksametil-disiloksano pirtako. Paviršiaus drėkinimo kampas buvo išmatuotas naudojant statinio vilgumo kampo metodą, kai ant nepaveikto ir skirtingai apdoroto paviršiaus buvo užlašinamas 1  $\mu$ l tūrio distiliuoto vandens lašelis. Lazeriu apdorotų ir vėliau DTAD dengtų pavyzdžių optinio mikroskopo vaizdai pateikti 1 pav.



**1 pav.** Nerūdijančio plieno paviršiaus su LIPSS struktūromis optinio mikroskopo nuotraukos. a) LIPSS struktūros pliene, b) plienas su LIPSS struktūromis ir DTAD

Optinės mikroskopijos tyrimai parodė, kad parinkus lazerio parametrus, paviršiuje buvo suformuotos LIPSS struktūros. Atlikus vilgumo kampo matavimus nustatyta, jog suformavus periodines struktūras plieno paviršiuje, plieno drėkinimo kampas pakito nuo  $47^\circ$  iki  $130^\circ$ . Padengus nerūdijančio plieno paviršių DTAD, plieno vilgumo kampas padidėjo  $\sim 40^\circ$ , tuo tarpu DTA dangos suformavimas ant struktūrizuoto paviršiaus neturėjo didelės įtakos vilgumo kampo vertei (1 pav., b).

---

### Literatūra

- [1] Van Driel, H. M., Sipe, J. E., and Young, J. F., Laser-induced periodic surface structure on solids: a universal phenomenon, *Physical Review Letters* 49(26), 1955–1958 (1982). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.1955>
- [2] Lutey, A. H., Gemini, L., Romoli, L., Lazzini, G., Fuso, F., Faucon, M., and Kling, R., Towards laser-textured antibacterial surfaces, *Scientific Reports* 8(1), 1–10 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-28454-2>

**E. Svirplys,  
S. Indrišiūnas**

*Valstybinis mokslinių  
tyrimų institutas Fizinių  
ir technologijų mokslų centras,  
lazerinių technologijų skyrius*

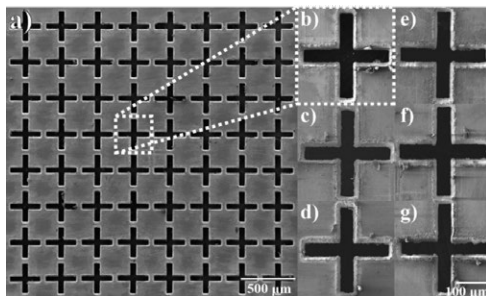
## PERIODINIŲ STRUKTŪRŲ GAMYBA THZ OPTINIAMS KOMPONENTAMS, NAUDOJANT FOKUSUOTŲ LAZERIO PLUOŠTŲ MASYVĄ

Terahercinė (THz) elektromagnetinių bangų spektro dalis apima dažnius nuo 0,1 THz iki 10 THz, o ją atitinkantis bangos ilgių intervalas yra nuo 3 mm iki 30  $\mu\text{m}$ . THz dažnio spinduliuotės fotono energija yra maža, todėl ši spinduliuotė nėra pavojinga biologiniams audiniams. Tokio dažnio spinduliuotė gali prasiskverbti pro įvairias medžiagas, tokias kaip plastikai, popierius, biologiniai audiniai, tačiau yra sugerama vandens ir jo garų. Naudojantis THz spinduliuotės skvarba per įvairias medžiagas yra kuriamos vaizdinimo sistemos, kurios pritaikomos daugelyje sričių: medicininėje tomografijoje, farmacijoje, oro uostų apsaugos sistemose [1]. Paskutinius kelis dešimtmečius THz spinduliuotės technologijos sparčiai vystėsi, tačiau vis dar ieškoma kaip sumažinti pasyviųjų optinių elementų dydį ir kainą.

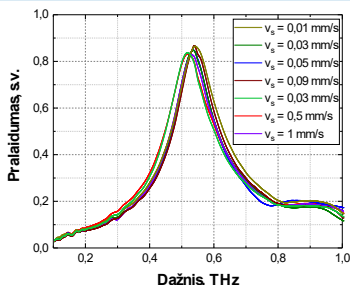
Daugelis THz dažnių generavimo šaltinių sukuria plataus diapazono spinduliuotę, kuri THz vaizdinimo sistemų veikimui nėra optimali, nes medžiagų atpažinimui reikia fiksuoto dažnio spinduliuotės. Dažnio išskyrimui galima naudoti rezonansinius pralaidumo filtrus, kurie taip pat leidžia formuoti ir sufokusuoti THz pluoštą. Rezonansiniai filtrai (RF) susideda iš pasirinktos geometrijos apertūrų matricių metalinėje plokštelėje ar folijoje, ir yra gana plačiai ištirti [2]. Tokie filtrai gali būti gaminami metalo frezavimo staklėmis, nors kur kas dažniau naudojama UV fotolitografija. Šių filtrų gamybos kaštus galima sumažinti gamybai naudojant tiesioginę lazerinę metalo abliaciją [3]. Lazerinė abliacija leidžia pasiekti iki kelių ar kelių dešimčių  $\mu\text{m}$  raišką, o po apdirbimo lazeriu bandiniui nereikia taikyti jokio papildomo apdirbimo. Tokių struktūrų gamybos trukmė aukštesniems THz srities dažniams vienu fokusuotu lazerio pluoštu yra nemaža dėl didelio apertūrų, kurias reikia išpjauti elemento plote, skaičiaus.

Šiame tyrime buvo gaminamos juostinių filtrų struktūros THz dažnių sričiai, formuojant kryželio formos apertūras nerūdijančio plieno folijoje, kurios storis 0,1 mm. Darbo pradžioje atliktas tokių apertūrų formavimas vienu fokusuotu lazerio pluoštu. Antroje darbo dalyje buvo surinktas ir išbandytas apdirbimo keliais fokusuotais lazerio pluoštais (fokusuotų lazerio pluoštų masyvu) stendas, kurį naudojant buvo siekiama gamybos spartą padidinti keliasdešimt kartų. Pluoštų masyvui suformuoti naudotas difrakcinis pluošto daliklis (DPD), kuris lazerio pluoštą padalina į 64 pluoštelius. RF gaminti iš plieno folijos, pasirinktam 580 GHz rezonansiniam dažniui. Lazerinei abliacijai naudotas sub-nanosekundinis lazeris („Ekspla“, I1H: 532 nm, 1 mJ, 1 kHz). Iš viso pagaminti 7 skirtingi filtrai, naudojant skirtingą lazerio pluošto skenavimų skaičių ir greitį (1 pav). Pagamintų THz filtrų pralaidumas įvertintas laikinės skryso THz spektrometru.

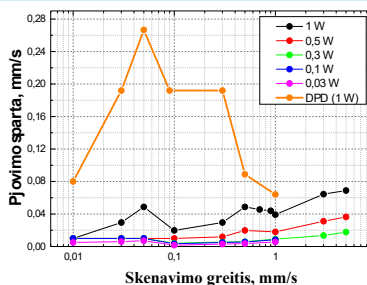
**1 pav.**  
 Plieno folijoje fokusuotų  
 lazerio pluoštų masyvių  
 (8 x 8) išpjauti kryželiai  
 naudojant skirtingus  
 abliacijos režimus SEM  
 darytos nuotraukos. a) ir  
 b)  $V_s = 0,01$  mm/s,  $N = 8$ ,  
 c)  $V_s = 0,05$  mm/s,  $N = 12$ ,  
 d)  $V_s = 0,09$  mm/s,  $N = 30$ ,  
 e)  $V_s = 0,3$  mm/s,  $N = 100$ ,  
 f)  $V_s = 0,5$  mm/s,  $N = 360$ ,  
 g)  $V_s = 1$  mm/s,  $N = 1000$ .



THz filtrų pralaidumo rezultatai parodė, jog pagamintų filtrų pralaidumas siekia iki 87%, o vidutinis juostos pralaidumas yra apie 0,18 THz (FWHM). Tokie rezultatai atitinka įprastų THz filtrų, pagamintų naudojant litografiją, našumą [2].



**2 pav.**  
 Pagamintų THz filtrų pralaidumo priklausomybė nuo elektromagnetinės spinduliuotės dažnio.



**3 pav.**  
 Skirtingų THz filtrų gaminimo strategijų pjovimo spartų palyginimas. DPD – difrakciniu pluošto dalikliu gamintų THz filtrų pjovimo sparta.

Be to, buvo nustatyta, kad naudojant 8 x 8 fokusuotų lazerio pluoštų matricą, gamybos laikas sumažėjo 27 kartus, palyginti su įprasta vieno pluošto sistema, kai buvo naudojami panašūs apdorojimo parametrai (3 pav).

Tokio DPD naudojimas taip pat sumažino lazerio pluoštelių energijos tankį ( $J/cm^2$ ), taigi nebuvo pasiekta efektyvi plieno folijos abliacija [4]. Todėl naudojant didesnės energijos impulsus arba pasiekus aštresnį pluoštelių fokusavimą, būtų galima dar labiau padidinti pjovimo spartą.

Buvo padaryta išvada, jog naudojantis fokusuotu lazerio pluoštų masyvu galima gaminti THz rezonansinius pralaidumo filtras, o tokie filtras pasižymi dideliu pralaidumo efektyvumu ir žymiai sumažintu gamybos laiku, tačiau efektyviam lazeriniam šių mikrostruktūrų pjovimui reikia didelių lazerio impulso energijų ( $\geq 1$  mJ).

### Literatūra

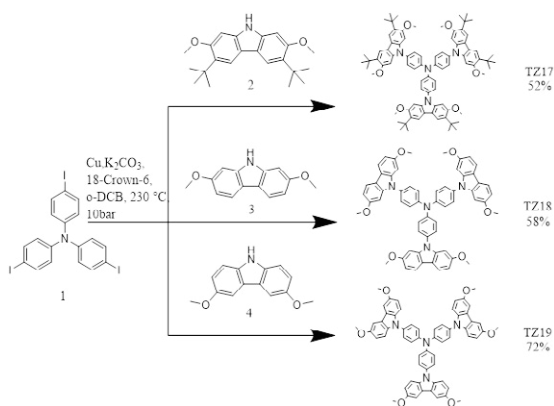
- [1] Zhang, X.C., Shkurinov, A., Zhang, Y. *Nature Photonics*, 2017, 11.
- [2] Melo, A., Gobbi, A., Piazzetta, M. *Advances in Optical Technologies*, 2012, 5,
- [3] Voisiat, B., Bičiūnas, A., Kašalynas, I. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 2011, 104.
- [4] Račiukaitis, G., Brikas, M. Gečys, P. *Journal of Laser Micro Nanoengineering*, 2009, 4.

**T. Žutautas,  
A. Bučinskas**

*Kauno technologijos universitetas,  
Polimerų chemijos  
ir technologijos katedra*

## NAUJŲ EFEKTYVIA SKYLIŲ PERNAŠA PASIŽYMINČIŲ IR ORGANINĖJE ELEKTRONIKOJE PRITAIKOMŲ ORGANINIŲ PUSLAIDININKIŲ PAIEŠKA

Projekto metu atlikta trijų naujų junginių, paremtų plačiai kaip skyles puslaidininkiuose transportuojančio junginio (TCTA) sandara, sintezė, identifikavimas ir terminų, optinių, fotofizikinių savybių tyrimas. Junginiai sudaryti iš tris-fenilamino šerdies ir modifikuotų karbazolo pakaitų, prie šerdies prijungtų pakeitus fenilo žiedo 4-osios padėties vandenilį. Junginiai susintetinti Ullmann [1] reakcijos metodu (1 pav.)



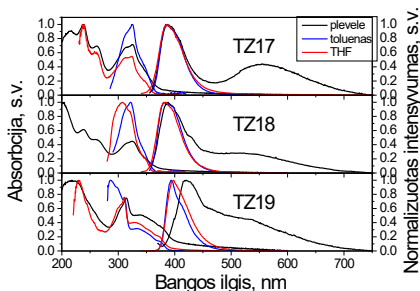
**1 pav.**  
*Junginių TZ17-19  
sintezės schema*

Atlikus junginių sužadintų būvių singletinės ir tripletinės energijų teorinius skaičiavimus, matyti, jog junginių TZ17-19 singletinės energijų vertės yra 3,48 eV, 3,57 eV ir 3,43 eV ir nedaug skiriasi nuo TCTA (3,5 eV). Tripletinės energijų vertės irgi artimos viena kitai bei TCTA vertei – 2,93 eV, 2,96 eV, 2,91 eV, o TCTA – 2,96 eV. Atlikus junginių terminų savybių tyrimą, matyti, jog panašiu aukštu terminiu stabilumu į TCTA (440 °C)[2] pasižymi tik junginiai turintys 2,7-dimetoksi-9H-karbazolo ir 3,6-dimetoksi-9H-karbazolo fragmentą (TZ-18, 420 °C; TZ-19, 415 °C).

### **Optinės ir fotofizikinės savybės**

Junginių (TZ17-19) THF tirpalų absorbcijos kreivės krašto vertės svyruoja nuo 362 nm iki 366, o sluoksnyje – nuo 362 iki 373 nm. Jos yra artimos TCTA absorbcijos

krašto absorbcijos krašto vertei DCM tirpale - 365 nm [3] ir sluoksnyje – 385 nm [4]. Junginių (TZ17-19) ir TCTA THF tirpalų fotoemisijos kreivės maksimumo vertės yra artimos viena kitai ir svyruoja nuo 385 iki 398 nm [2]. Kita vertus, fiksuojant naujų junginių (TZ17-19) fotoemisiją kietame sluoksnyje, užregistruoti du papildomi išplitę maksimumai mėlynojoje (390 – 418 nm) ir žalioje (520 – 555 nm) regimojo spektro dalyje. Manome, kad fotosužadavimo medžiagų sluoksnyje vyksta krūvio pernaša arba eksiplexų susidarymas.



**2 pav.**  
Junginių TZ17-  
19 praskiestų tirpalų  
sluoksnių sugerties  
(kairėje) ir FL spektrai

Krūvininkų pernašos signalus pavyko užfiksuoti tik junginiui, turinčiam 3,6-dimektoksi-9H-karbazolo fragmentą, ir krūvininkų (sylių) judrio vertės aukštuose elektriniuose laukuose yra  $10^{-5}$ - $10^{-4}$   $\text{cm}^2\text{V}^{-1}$  eilės dydis.

### Literatūra

- [1] "Ullmann Reaction." [Online]. Available: <https://www.organic-chemistry.org/namedreactions/ullmann-reaction.shtml>.
- [2] "TcTa, Ni-HB03." [Online]. Available: <http://www.nichem.com.tw/en/product-253067/TcTa-Ni-HB03.html>.
- [3] B. Pan *et al.*, "Systematic study of TCTA -based star-shaped host materials by optimizing ratio of carbazole/ diphenylphosphine oxide: Achieving both low efficiency roll-off and turn-on voltage for blue PHOLEDs," *J. Mater. Chem. C*, vol. 2, no. 35, pp. 7428–7435, Sep. 2014.
- [4] H.-T. Cao *et al.*, "Novel electron acceptor based on spiro[fluorine-9,9'-xanthene] for exciplex thermally activated delayed fluorescence," *Dye. Pigment.*, vol. 149, pp. 422–429, Feb. 2018.

**E. M. Jonaitytė,  
V. Pečiulienė**

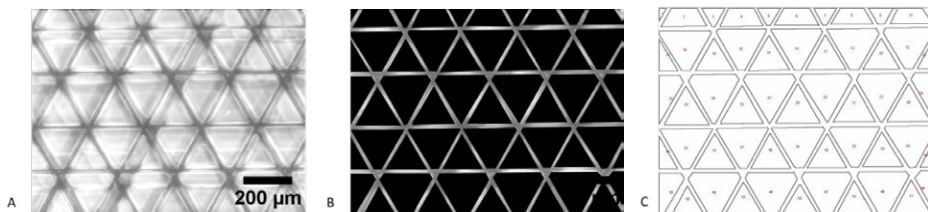
*Vilniaus Universitetas,  
Medicinos fakultetas,  
Odontologijos institutas.*

## **DANTIES PULPOS REGENERACIJAI SKIRTŲ 3D POLIKAPROLAKTONO IR KOLAGENO KARKASŲ SUKŪRIMAS ELEKTROSPININGO BŪDU**

Dantų ėduonis pažeidžia beveik 100 proc. suaugusiųjų ir iki 90 proc. vaikų dantis [1]. Ėduoniui progresuojant sukiamas danties pulpos uždegimas, todėl pulpa pašalinama, endodontiškai gydomi dantų kanalai. Atlikus šią procedūrą vaikų amžiuje stabdomas tolimesnis šaknų vystymasis. Trumpos ir plonos šaknys lemia prastą danties prognozę. Danties pulpos regeneracija yra perspektyvus būdas išsaugoti danties gyvybingumą, pratęsti šaknų formavimąsi ir išsaugoti dantį. Norint atlikti pulpos regeneracijos procedūrą reikia sukurti 3D karkasą, kuris būtų biosuderinamas, tinkamas ląstelių proliferacijai, rezorbuotųsi nesukeldamas žymesnių uždegiminių reakcijų [2]. Išvardytomis savybėmis gali pasižymėti polikaprolaktono (PCL) ir kolageno karkasas. Kolageno skaidulos sudaro didžiąją natūralios dantų pulpos dalį, o PCL suteikia palankias karkaso mechanines savybes. Karkasą sukurti galima naudojant elektrospiningą, kuris leidžia pagaminti 3D karkasus, sudarytus iš skirtingų medžiagų nano skaidulų.

**Darbo tikslas.** Sukurti 3D karkasą, kuris galėtų būti naudojamas danties pulpos regeneracijai.

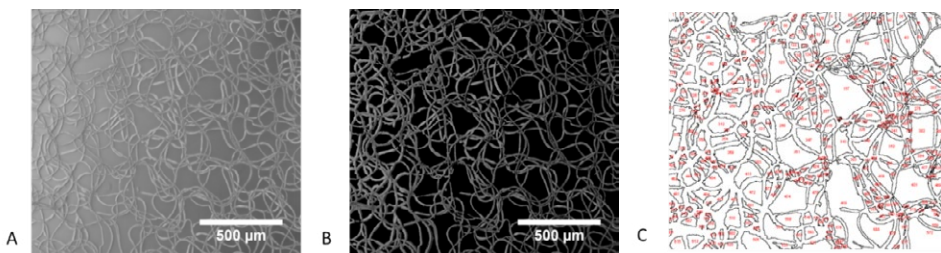
**Darbo metodika.** RegenHU programinė įranga BioCAD naudota sukurti taisyklingos ir netaisyklingos struktūros karkasų STL modelius. Karkasai atspausdinti iš PCL naudojant RegenHU 3D spausdintuvo MESW (Melted electrospinning writing) antgalį. Optiniu mikroskopu padarytos karkasų nuotraukos. Karkasų poros užtušotos juoda spalva naudojant Adobe Photoshop programinę įrangą. Tuomet karkasų porų diametras ir plotas, nustatčius ilgio skalę, apskaičiuotas vaizdų analizės programa ImageJ (1, 2 paveikslai). Naudojant ImageJ cirkuliarumo apskaičiavimo įrankį įvertinta porų forma.



**1 pav.**

*Taisyklingos struktūros karkaso porų dydžio skaičiavimas. A – 3D karkaso nuotrauka optiniu mikroskopu (didinimas 4 kartai); B – juodai užtušotos poros; C – sužymėtos poros ImageJ programa (kraštinės poros nebuvo įtraukiamos į skaičiavimus).*





**2 pav.**

*Netaisyklingo karkaso porų dydžio skaičiavimas. A – 3D karkaso nuotrauka optiniu mikroskopu (didinimas 4 kartai); B – juodai užtušotos poros; C – sužymėtos poros ImageJ programa (kraštinės poros nebuvo įtraukiamos į skaičiavimus).*

Taisyklingos ir netaisyklingos struktūros karkasų padengimas kolagenu atliktas pagal Aishwarya et al. aprašytą protokolą prie kolageno prijungiant acetilo grupę ir naudojant etilendiamino/n-propanolio tirpalą [3]. PCL karkasų padengimas kolagenu įvertintas kokybiškai atliekant nuotraukas optiniu mikroskopu. Kiekybiniam įvertinimui naudotas Sirius Red dažas, kuris buvo tirpintas 0,1N NaOH tirpalu bei gauto tirpalo sugertis matuota ties 550 nm bangos ilgiu plokštelių skaitytuvu. Karkasų fono nustatymui naudoti 20 val. steriliame vandenyje laikyti mėginiai. Statistinė analizė atlikta IBM SPSS Statistics 20 programa pritaikius Sjudento T testą. Skirtumai tarp reikšmių buvo priimti kaip statistiškai reikšmingi, kai paklaidos tikimybė  $p < 0,05$ .

Iš žmogaus trečių krūminių dantų pulpos išskirtos pulpos kamienines ląsteles. Ląstelės laikomos skysto azoto konteineryje ir bus panaudotos tolimesnių tyrimų metu.

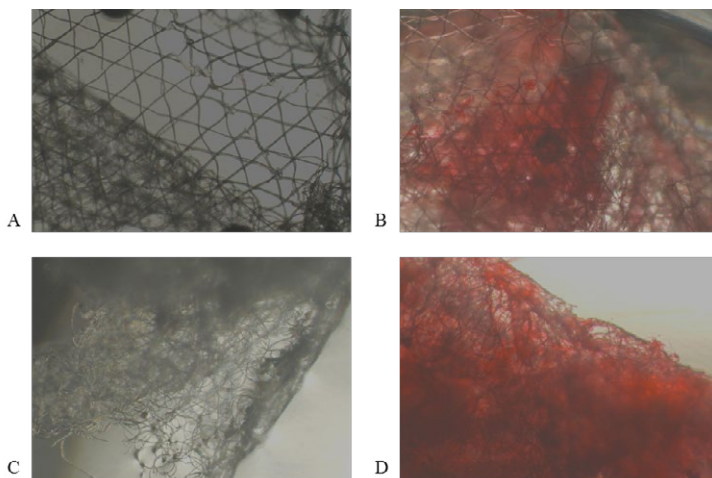
**Rezultatai.** Taisyklingos struktūros karkaso vidutinis porų skersmuo 194,23 µm. Mažiausia pora 152,92 µm, didžiausia 226,22 µm skersmens. Karkaso porėtumas 77,43 proc. Vidutinis porų cirkuliarumo koeficientas  $0,6 \pm 0,04$ . Netaisyklingos struktūros karkaso vidutinis porų skersmuo 54,54µm. Mažiausia pora 5,82 µm, didžiausia 373,72 µm skersmens. Mažesnės nei 50 µm poros sudarė 55,97 proc. (361 pora), 50 – 100 µm poros 31,16 proc. (201 pora), 100 – 150 µm poros 9,46 proc. (61 pora), > 150 µm poros 3,42 proc. (22 poros). Karkaso porėtumas 58,62 proc. Vidutinis porų cirkuliarumo koeficientas  $0,47 \pm 0,18$ .

Tiek taisyklingos, tiek netaisyklingos struktūros karkasai pasidengė kolagenu (3 paveikslas). Kontrolinėje grupėje kolageno padengimo nebuvo stebima.

Netaisyklingos struktūros karkasų tirpalo sugerties vidurkis atėmus fono sugertį  $0,0976 \pm 0,03$ , taisyklingos –  $0,0878 \pm 0,02$ . Statistiškai reikšmingo skirtumo šių grupių nebuvo rasta ( $p=0,54$ ).

**Išvados.** RegenHU 3D spausdintuvo MESW galva yra tinkama spausdinti taisyklingos ir netaisyklingos struktūros PCL 3D karkasus. Taisyklinga karkaso struktūra lemia didesnes karkaso poras ir didesnį karkaso porėtumą. Spausdinant netaisyklingos struktūros 3D karkasą dauguma porų yra mažesnės nei 50 µm. Tiek taisyklingos, tiek netaisyklingos struktūros karkasų porų cirkuliariskumas yra panašus. 3D PCL karkasas gali būti padengtas kolagenu naudojant acetilintą kolageną ir etilendiamino/n-propanolio tirpalą.

**3 pav.**  
 3D PCL karkasų padengimas kolagenu (dėdininimas 4 kartai). A – taisyklingos struktūros karkaso kontrolinė grupė; B – taisyklingos struktūros karkasas padengtas kolagenu; C – netaisyklingos struktūros karkaso kontrolinė grupė; D – netaisyklingos struktūros karkasas padengtas kolagenu.



### Literatūra

- [1] World Health Organization. Diet and Oral Health: Fact sheet on oral health and sugars. 2018.
- [2] Jiang Q, Reddy N, Zhang S, Roscioli N, Yang Y. Water-stable electrospun collagen fibers from a non-toxic solvent and crosslinking system. *J Biomed Mater Res.*2013;101(5):1237-47.
- [3] Aishwarya S, Mahalakshmi S, Sehgal PK. Collagen-coated polycaprolactone microparticles as a controlled drug delivery system. *J Microencapsul.* 2008 Aug;25(5):298–306.

**R. Jonaitis<sup>1</sup>,  
N. German<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Vilniaus Gedimino Technikos  
Universitetas, Saulėtekio g.11,  
LT-10223 Vilnius, Lietuva

<sup>2</sup> VMTI Inovatyvios medicinos centras,  
Imunologijos skyrius, Santariškių g. 5,  
LT-08406, Vilnius, Lietuva

## ĮVAIRIAI MODIFIKUOTI AUKSO DARINIAIS GLIUKOZĖS BIOLOGINIO JUTIKLIO KŪRIMAS BEI PRAKTINIS PRITAIKYMAS

**Įvadas** – Elektrocheminiai biologiniai jutikliai yra prietaisai, pasižymintys dideliu selektyvumu įvairioms medžiagoms, duodantys elektrinį atsaką tirpale esant atitinkamos matuojamos analitės [1]. Jie leidžia nustatyti ir stebėti ligas, sukeliančias medžiagų koncentracijos nukrypimus nuo normos žmogaus organizme, todėl šių jutiklių technologijoms yra skiriamas didelis dėmesys [2]. Viena plačiausiai paplitusių tokio tipo liga – cukrinis diabetas. Gliukozės koncentraciją kraujyje galima stebėti pasitelkiant gliukozės oksidazės (GOx) fermentą, kuris pasižymi geru bioelektrokataliziniu aktyvumu, stabilumu ir nedidele produkcijos kaina – svarbiausiais biologinio jutiklio aspektais. Siekiant sukurti tikslesnius, ilgalaikius, ne toksiškus sveikatos stebėjimo būdus, reikia atlikti įvairių šias savybes gerinančių medžiagų tyrimus. Progresas šioje mokslo srityje leistų žmonėms patogiau ir tiksliau stebėti sveikatos būklę [3, 4, 5].

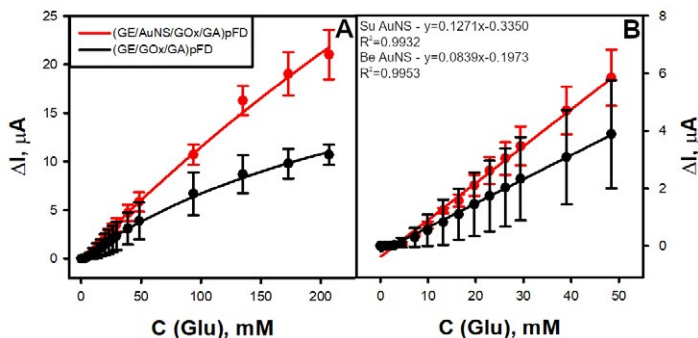
Šio tyrimo **tikslas** – sukurti biologinį jutiklį naudojantis aukso nanodarinius bei netirpiu elektronų pernašos tarpininku (EPT) 1,10-fenantrolin-5,6-dionu (FD), ir įvertinti šio jutiklio stabilumą, atsparumą elektroaktyvioms medžiagoms. Netirpius EPT naudojamas kadangi biologinėse sistemose tirpių EPT naudojimas yra sudėtingas dėl pasklidimo ir galimo toksiškumo organizme [6, 7].

**Rezultatai ir jų aptarimas** – Preliminarių tyrimų metu patvirtinus, kad analizinis signalas padidėja naudojant aukso nanodarinis (13 nm AuND ir AuNS), nustačius optimalias FD polimero sudarymo sąlygas, tolimesni tyrimai buvo atliekami tik naudojant AuNS modifikuotus ir ne elektrodus.

Optimaliomis sąlygomis paruošti elektrodai pasižymi itin dideliu gliukozės koncentracijos intervalu (iki 48,4 mM). Naudojant (GE/AuNS/GOx/GA)pFD ir (GE/GOx/GA)pFD elektrodus, maksimalios srovės skirtumas yra laikomas hiperbolinės lygties  $y = ax/(b + x)$  a parametru ir naudojantis 1 pav. A pateiktomis kalibracinėmis kreivėmis įvertintas, kaip  $DImax=133 \mu A$  ir  $27,5 \mu A$ . Iš 1 pav. B matyti, kad (GE/AuNS/GOx/GA)pFD elektrodai būdingas tiesinis gliukozės koncentracijos intervalas nuo 0,30 mM iki 48,4 mM su koreliacijos koeficientu 0,9932, Glu aptikimo riba 0,264 mM. Tuo tarpu, naudojant (GE/GOx/GA)pFD elektrodus tiesinis koncentracijos intervalas pasiekė iki 48,4 mM su koreliacijos koeficientu 0,9953, Glu aptikimo riba 0,995 mM.

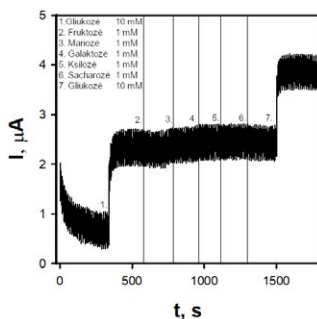
Stabilumo matavimams buvo naudoti (GE/GOx/GA)pFD ir (GE/AuNS/GOx/GA)pFD elektrodai, kurie tarp matavimų buvo laikomi šaldytuve (+4 °C) Eppendorf mėgintuvėliuose virš acetatinio buferinio tirpalo (pH 6,0) lašelio. Stabilumo tyrimai buvo atliekami 28 dienas. Pradinės signalų reikšmės prilygintos 100 %, kurios po 28 dienų

sumažėjo iki 26 % (GE/AuNS/GOx/GA)pFD elektrodo atveju ir 15 % (GE/GOx/GA)pFD elektrodo atveju. Elektrodo su AuNS signalas per pusę sumažėjo per 8 dienas, o be AuNS per 3 dienas. Iš to galima spręsti, kad AuNS modifikuoti elektrodai išlaiko stabilumą geriau nei elektrodai be AuNS.



**1 pav.**  
Chronoamperometrinio analizinio signalo kalibracinės kreivės (A) ir tiesinės priklausomybės (B), naudojant (GE/GOx/GA)pFD ir (GE/AuNS/GOx/GA)pFD elektrodus acetatiname buferiniame tirpale (pH 6,5).

Kokybinė analizė buvo atlikta į žmogaus serumą pridendant 10 mM Glu, po 1 mM skirtingų angliavandenių (fruktozę, manozę, galaktozę, ksilozę ir sacharozę), ir vėl 10 mM Glu. Šlapimo rūgšties ir vitamino C analizė buvo atlikta į žmogaus serumą įdėjus 10 mM Glu, įvairias koncentracijas šlapimo rūgšties ir vitamino C. Iš pateiktų 2 pav. matavimų duomenų matosi, kad sukurtas biologinis jutiklis yra atsparus angliavandeniams.



**2 pav.**  
Angliavandenių įtaka gliukozės biologiniam jutikliui (GE/AuNS/GOx/GA)pFD elektrodo pagrindu 10 kartų praskiestame žmogaus serume.

Didėjant vitamino C koncentracijai nuo 0,01 iki 0,1 mM fiksuojamo signalo stiprumas didėja nuo 107 % prie 0,01 mM iki 130 % ties 0,1 mM. Toliau didinant vitamino C koncentraciją iki 0,2 mM analizinio signalo stiprumas padidėjo iki 149 %. Eksperimentų metu paaiškėjo, kad sukurtas gliukozės biologinis jutiklis labiausiai yra atsparus mažoms šlapimo rūgšties (iki 0,05 mM) ir vitamino C (iki 0,1 mM) koncentracijoms, kurios dažniausiai ir būna žmogaus serume.

Sukurtas tyrimų metu biologinis jutiklis buvo pritaikytas gliukozės nustatymui žmogaus serume priedų metodu, pridendant tam tikrus analitės kiekius, kad išliktų tiesinė analizinio signalo nuo gliukozės koncentracijos priklausomybė. 10 kartų praskiestame žmogaus serume išgavos siekė nuo 94,8 % iki 104 %, esant gliukozės koncentracijoms nuo 9,92 iki 19,7 mM.

---

## Literatūra

- [1] D’Orazio, P. Biosensors in clinical chemistry. *Clinica Chimica Acta*, 2003, 334, 41-69.
- [2] Clement, S., Braithwaite, S. S., Magee, M. F., Ahmann, A., Smith, E. P., Schafer, R. G., & Hirsh, I. B. Management of Diabetes and Hyperglycemia in Hospitals. *Diabetes Care*, 2004, 27, 553-591.
- [3] Abdulbari, H. A., & Basheer, E. A. M. Electrochemical Biosensors: Electrode Development, Materials, Design, and Fabrication. *ChemBioEng Reviews*, 2017, 4(2), 91-105.
- [4] Brownson, D. A. C., Banks, C. E., Brownson, D. A. C., & Banks, C. E. Interpreting Electrochemistry. *The Handbook of Graphene Electrochemistry*, 2014, 20-77.
- [5] Menezes, F. G., Neves, A. C. O., De Lima, D. F., Lourenço, S. D., Da Silva, L. C., & De Lima, K. M. G. Bioorganic concepts involved in the determination of glucose, cholesterol and triglycerides in plasma using the enzymatic colorimetric method. *Quimica Nova*, 2015, 38(4), 588-594.
- [6] Clark, H. A., Hoyer, M., Philbert, M. A., & Kopelman, R. Optical nanosensors for chemical analysis inside single living cells. 1. Fabrication, characterization, and methods for intracellular delivery of PEBBLE sensors. *Analytical Chemistry*, 1999, 71(21), 4831-4836.
- [7] Jones, D. P. Disruption of mitochondrial redox circuitry in oxidative stress. *Chemico-Biological Interactions*, 2006, 163(1-2), 38-53.

## Padėka

Mokslinis tyrimas finansuotas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0006) „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

**M. Pivoriūnaitė<sup>1,2</sup>,  
A. Gulbinas<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Vytauto Didžiojo universitetas  
<sup>2</sup> Lietuvos sveikatos mokslų  
universitetas, Virškinimo sistemos  
tyrimų institutas

## ŽMOGAUS ALFA- LAKTALBUMINO (HAMLET) CITOTOKSIŠKUMO PALYGINIMAS TARP VĖŽINIŲ IR NEVĖŽINIŲ STOROSIOS ŽARNOS LĄSTELIŲ, *IN VITRO*

Storosios žarnos vėžys – antroje vietoje pagal mirtingumą ir trečiasis labiausiai paplitęs piktybinis navikas pasaulyje. Ankstyvųjų šio vėžio stadijų gydymas gali būti efektyvus, tačiau vykdomų prevencinių diagnostikos programų metu itin dažnai nustatomi lokaliai išplitusio ar metastazavusio storosios žarnos vėžio atvejai. Be to, sparčiai augantis susirgimų skaičius bei jų sudėtingumas reikalauja naujų sprendimų.

Žmogaus pieno baltymo  $\alpha$ -laktalbumino ir oleino rūgšties kompleksas (HAMLET – angl.: *Human Alpha-lactalbumin Made Lethal to Tumor cells*) yra inovatyvus priešvėžinis preparatas, sukeliantis programuotą navikinių ląstelių mirtį [1], ir tuo pačiu nepažeidžiantis sveikų diferencijuotų ląstelių [2]. Tačiau HAMLET veikimo mechanizmas nėra pilnai suprastas, tikėtina, jog dažnai storosios žarnos vėžio ląstelėse aptinkamame mitogenų aktyvuojamų proteinkinazių (MAPK) signaliniame kelyje esančių KRAS, BRAF onkogenų [3] ar kitų šio kelio komponentų sąveika su HAMLET sukelia toksinį poveikį vėžinių ląstelių metabolizmui. Vėžinėse ląstelėse randamos mutacijos yra svarbus klinikinis veiksnys, lemiantis storosios žarnos vėžio atsaką į naudojamas ir testuojamas gydymo priemones, vaistus ar jų kombinacijas (pavyzdžiui, KRAS mutacijos atveju taikomas gydymas cetuksimabu ir kt.) [4]. Todėl tikėtina, kad MAPK signalinio kelio komponentai gali būti svarbūs taikant ir HAMLET kompleksą.

**Tyrimo tikslas** – palyginti kaip kinta HAMLET citotoksinis poveikis tarp mutuo-  
tų (KRAS/BRAF) bei nemutuotų vėžinių ir nevėžinių storosios žarnos ląstelių, taikant skirtingas komplekso dozes ir/ar ekspozicijos laiką.

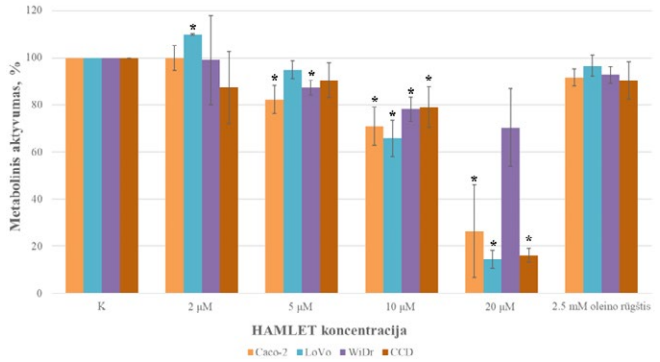
Tyrimuose buvo naudotos keturios ląstelių linijos: žmogaus storosios žarnos vėžio ląstelių linijos Caco-2 (KRAS ir BRAF laukinis tipas), LoVo (KRAS mutacija, BRAF laukinis tipas) ir WiDr (KRAS laukinis tipas, BRAF mutacija), taip pat nevėžinės storosios žarnos ląstelės CCD 841 CoN (toliau – CCD). Jos buvo veiktos  $\alpha$ -laktalbumino ir oleino rūgšties kompleksu, vadinamu HAMLET, kuris gamintas pagal Kamijima ir kt. [5] metodiką. Tirtų ląstelių metabolinis aktyvumas po 6 val. HAMLET poveikio buvo vertinamas MTT (3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difeniltetrazolio bromido) metodu. Tuo tarpu ląstelių žūties mechanizmo vertinimas po 1 ir 6 val. HAMLET poveikio atliktas naudojant tėkmės citometrijos metodą.

Buvo nustatyta, jog didėjant HAMLET koncentracijai mitybinėje terpėje, žmogaus storosios žarnos vėžinių ląstelių linijų Caco-2, LoVo ir WiDr bei nevėžinių storosios žarnos ląstelių CCD metabolinis aktyvumas tolygiai mažėjo, palyginus su kontroliniu mėginiu (1 pav.). Be to, HAMLET citotoksinis poveikis storosios žarnos vėžio ląstelėms nepriklausė nuo KRAS mutacijos statuso (mutacija ar laukinis tipas), tačiau BRAF mutacija sumažino šio komplekso efektyvumą.

### 1 pav.

6 val. HAMLET (2, 5, 10, 20  $\mu\text{M}$ ) ir oleino rūgšties (2,5 mM) poveikio įtaka storosios žarnos vėžio Caco-2, LoVo, WiDr ir nevėžinių storosios žarnos CCD ląstelių linijų metaboliniam aktyvumui procentais.

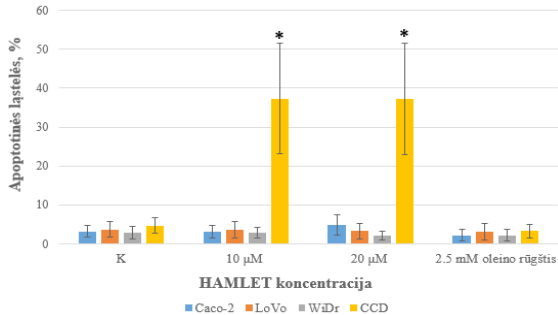
Kontrolinis mėginys prilygintas 100 proc. ląstelių metaboliniam aktyvumui. Grafike pateikiami trijų ar daugiau matavimų vidurkiai ir standartinė paklaida ( $n \geq 3 \pm \text{SE}$ ); \* pažymėti statistiškai reikšmingi skirtumai tarp kontrolinės ir tiriamųjų grupių,  $p < 0,05$ .



Ląstelių žūtys tyrimo rezultatai, gauti storosios žarnos vėžio Caco-2, LoVo ir WiDr ląstelių veikus skirtingomis HAMLET koncentracijomis parodė, jog po 1 val. ir 6 val. (2 pav.) poveikio didžioji dalis šių ląstelių išliko gyvos ir nepasizymėjo aktyvuotais apoptozės signalais. Tuo tarpu tarp tiriant HAMLET poveikį nevėžinėms storosios žarnos CCD ląstelėms, gautoms iš embriono, pastebėtas statistiškai reikšmingas žuvusių ląstelių kiekio padidėjimas ir nustatyta, kad daugumą jų žuvo nekrozės būdu (3 pav.).

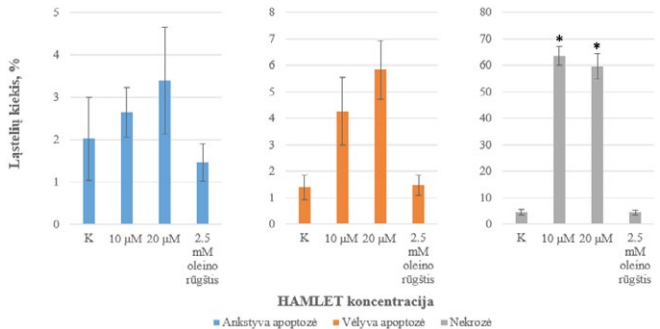
### 2 pav.

6 val. HAMLET (10, 20  $\mu\text{M}$ ) ir oleino rūgšties (2,5 mM) poveikio įtaka storosios žarnos vėžio Caco-2, LoVo, WiDr ir nevėžinių storosios žarnos CCD apoptotinių ląstelių kiekiui procentais. Grafike pateikiami trijų ar daugiau matavimų vidurkiai ir standartinė paklaida ( $n \geq 3 \pm \text{SE}$ ); \* pažymėti statistiškai reikšmingi skirtumai tarp kontrolinės ir tiriamųjų grupių,  $p < 0,05$ .



### 3 pav.

6 val. HAMLET (10, 20  $\mu\text{M}$ ) ir oleino rūgšties (2,5 mM) poveikio įtaka nevėžinių storosios žarnos CCD ankstyvųjų ir vėlyvųjų apoptotinių bei nekroziųjų ląstelių kiekiui procentais. Grafike pateikiami penkių matavimų vidurkiai ir standartinė paklaida ( $n = 5 \pm \text{SE}$ ); \* pažymėti statistiškai reikšmingi skirtumai tarp kontrolinės ir tiriamųjų grupių,  $p < 0,05$ .



Šio tyrimo metu gauti rezultatai parodė, kad HAMLET kompleksas pasižymi citotoksiniu priešvėžiniu poveikiu. Esant BRAF mutacijai, stebėtas šio junginio rezistentiškumas. Todėl tolimesniuose klinikiniuose tyrimuose HAMLET preparatas galėtų būti sėkmingiau pritaikomas grupėms, turinčioms laukinį arba KRAS mutacijos tipą junginiuose su sisteminiu gydymu ir/ar biologine terapija pagal personalizuotos medicinos principus. Visgi, literatūroje įprastai išryškinama tik teigiama HAMLET komplekso pusė, apibūdinanti komplekso toksiškumą navikinėms, bet ne sveikoms diferencijuotoms ląstelėms [2]. Tačiau remiantis rezultatais matyti, jog kompleksas buvo citotoksiškas ir nevėžinėms, galimai nediferencijuotoms storosios žarnos CCD ląstelėms. Todėl, taikant gydymą HAMLET kompleksu, svarbu atsižvelgti į galimas pasekmes.

---

### Literatūra

- [1] Svanborg, C., Agerstam, H. ir kt. *Advances in cancer research*. 2003, 88, 1–29.
- [2] Mossberg, A. K., Hun Mok, K. ir kt. *The FEBS journal*. 2010, 277(22), 4614–4625.
- [3] Bond, C. E. ir Whitehall, V. L. J. *Gastroenterology Research and Practice*. 2018, 9250757.
- [4] Martin, S. Z., Wagner, DC. ir kt. *BMC Cancer*. 2019, 1;19(1).
- [5] Kamijima, T., Ohmura, A. ir kt. *Biochemical and Biophysical Research Communications*. 2008, 376(1), 211-4.



**A. Bakšinskaitė,  
V. Tilvikienė**

*Lietuvos agrarinių ir miškų  
mokslų centras*

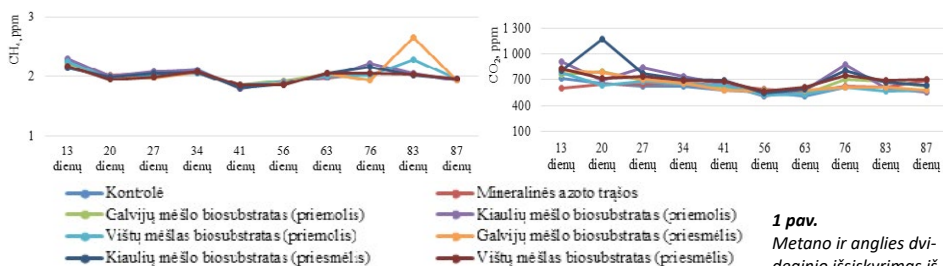
## **BIODUJŲ GAMYBOS PROCESE PERDIRBTO SUBSTRATO NAUDOJIMAS AUGALŲ TRĘŠIMUI - ĮTAKA ŠESD EMISIJOMS IR AUGALAMS**

Klimato kaita yra viena iš svarbiausių šių dienų problemų, dėl to pastaruoju metu dažniau susiduriama su įvairiais anomaliniais reiškiniais, tokiais kaip uraganai, gausūs ir trumpi lietūs, sausros ir kt. Norint sušvelninti šiuos reiškinius, reikia atkreipti dėmesį į įvairias sritis, kurios prisideda prie klimato pokyčių. Lietuva yra viena iš šalių, kurios išmeta daugiausiai šiltnamio efektą sukeliančių dujų (ŠESD) iš transporto bei žemės ūkio sektorių. Vertinant žemės ūkio poveikį klimato pokyčiams, labai svarbu ir dirvožemio kokybė, organinių medžiagų kaupimasis ir dirvožemio degradacija [2]. Vis dėl to informacijos apie įvairių žemės ūkio organinių atliekų poveikį dirvožemiui, augalų kokybei ir išmetamų ŠESD kiekiui yra nedaug.

Darbo tikslas: nustatyti skirtingų biodujų gamybos procese perdirbtų substratų naudojamų augalų tręšimui įtaką dirvožemio kokybei, augalų vystymosi intensyvumui bei šiltnamio efektą sukeliančių dujų emisijai iš dirvožemio kontroliuojamomis klimato sąlygomis.

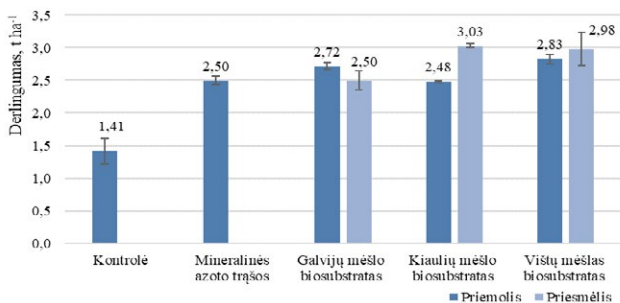
Matuojant dirvožemio CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> ir N<sub>2</sub>O srautus naudojama uždaros kameros metodas. Mėginiai imama su švirkštu po 10 min. gaubto uždengimo [1]. Lapų spalva yra augalų chlorofilo kiekio rodiklis, taip pat gali atspindėti augalų azoto būklę [3]. Chlorofilo indeksas matuojamas su MINOLTA SPAD 502, o chlorofilo fluorescencija matuojama naudojant nešiojamą fluorimetą OS-30p.

**Tyrimų rezultatai.** Metano dujų kiekis visuose variantuose, lyginant su kontrole, buvo vienodas išskyrus 76 ir 83 dienas po sėjos (1 pav.). Čia metano kiekis labiausiai išsiskyrė galvijų mėšlo biosubstrate priesmėlyje bei vištų biosubstratų priemolyje. Analizuojant anglies oksido dujų išskyrimo iš dirvožemio buvo nustatyta, kad po tręšimo praėjus 7 dienomis labiausiai iš visų variantų išsiskyrė kiaulių mėšlo biosubstratas, kuriuo tręštų augalų pasėlyje CO<sub>2</sub> emisijos siekė 1174,4 ppm (1 pav.). Palyginus ŠESD išskyrimą iš dirvožemio mažiausiai yra išskiriama azoto oksido dujų, kurios kaip pateikta diagramoje didžiausia kiekį turėjo praėjus po tręšimo 7 dienoms (20 diena po sėjos). Toliau vykstant ŠESD emisijų matavimui azoto oksido kiekiai mažėjo daugumoje variantų



**1 pav.**  
Metano ir anglies dioksido išsiskyrimas iš dirvožemio

Augalų produktyvumas esmingai nesiskyrė tręšiant mineralinėmis azoto trąšomis, lyginant su biosubstratais tręštais augalais (2 pav.). Didžiausias derlingumas nustatytas tręšiant kiaulių mėšlo biosubstratais priemėlyje –  $3,03 \pm 0,03 \text{ t ha}^{-1}$ .



**2 pav.**  
Augalų produktyvumas t ha<sup>-1</sup>

Augalų chlorofilo indeksas didžiausias tręšiant augalus mineralinėmis azoto trąšomis, o mažiausias tręšiant su galvijų mėšlo biosubstratu. Tyrimais nustatyta, kad chlorofilo kiekis augaluose svyruoja nuo 26,31 iki 49,82, o tai reiškia, kad augalas yra sveikas.

Fluorescencijos kiekis augaluose lyginant su kontrole visus matavimo kartus esmingai kito. Sveiki augalai, kurie yra auginami laukuose dažniausiai pasiekia 0,85 Fm/v vertę. Lyginant skirtingų biosubstratų įtaką augalams skirtinguose dirvožemiuose, nustatyta, kad tręšiant augalus galvijų ir vištų mėšlo biosubstratais fluorescencijos kiekis buvo didesnis priemolyje augintų augalų.

Apibendrinat galima teigti, kad augalai produktyviausi patręšti kiaulių mėšlo biosubstratu priemėlyje –  $3,03 \pm 0,03 \text{ t ha}^{-1}$ , lyginant su kitomis tręstomis trąšomis. ŠESD emisijų išskyrimas visuose variantuose reikšminio skirtumo neturėjo. Daugiausia CH<sub>4</sub> dujų buvo išskirta 83 dieną po sėjos priemėlyje tręšiant su galvijų mėšlo biosubstratu. CO<sub>2</sub> dujų kiekis labiausiai skyrėsi augalus patręšus kiaulių mėšlo biosubstratu. Augalų chlorofilo indeksas didžiausias tręšiant augalus mineralinėmis azoto trąšomis, o mažiausias su galvijų mėšlo biosubstratu. Didžiausia fluorescencijos kiekis nustatytas augalus tręšiant kiaulių mėšlo biosubstratu bei auginant augalus priemolyje.

---

### Literatūra

- [1] Alessandra, L., & Elio, A. A. (2020). Influence of vegetation cover and soil features on CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub>O fluxes in northern Finnish Lapland. *Polar Science*, 100531. <https://doi.org/10.1016/j.polar.2020.100531>
- [2] Sá, M. M. F., Schaefer, C. E. G. R., Loureiro, D. C., Simas, F. N. B., Alves, B. J. R., de Sá Mendonça, E., Panosso, A. R. (2019). Fluxes of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, and N<sub>2</sub>O in tundra-covered and *Nothofagus* forest soils in the Argentinian Patagonia. *Science of the Total Environment*, 659, 401–409. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.12.328>
- [3] Song, Y., Teng, G., Yuan, Y., Liu, T., & Sun, Z. (2020). Assessment of Wheat Chlorophyll Content by the Multiple Linear Regression of Leaf Image Features. *Information Processing in Agriculture*. <https://doi.org/10.1016/j.inpa.2020.05.002>

**L. Budginas<sup>1</sup>,  
V. Stanys<sup>2</sup>**

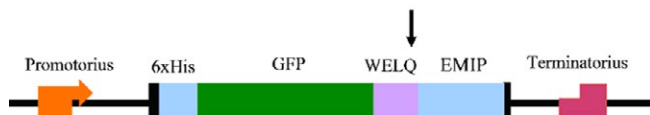
<sup>1</sup> Vytauto Didžiojo universitetas

<sup>2</sup> Lietuvos agrarinių ir miškų  
mokslų centras, Sodinininkystės  
ir daržininkystės institutas

## REKOMBINANTINIŲ PEPTIDŲ RAIŠKOS TABAKO AUGALUOSE IR GRYNINIMO OPTIMIZAVIMAS

Augalų auginimas naudojant uždaro tipo (*in vitro*) sistemą rekombinantinių baltymų gamybai yra ekonomiškai efektyvi ir kokybę užtikrinanti alternatyva, tradiciniams metodams. Tokį baltymų gamybos būdą būtų galima lengvai pritaikyti didelės apimtys pramoninei gamybai [1]. Tabakas yra viena iš populiariausių augalų ekspresijos sistemų, jis plačiai naudojamas gaminant antikūnus, farmacinius ir pramoninius baltymus [2]. Bioaudinių gamybai naudojami sudėtiniai polimerų ir gyvūninio audinio tarpląstelių matricos baltymų mišiniai, kuriuos sudaro kolagenas, fibronektinas, lamininas. Tačiau specifines tarpląstelinės matricos baltymų funkcijas galima lengvai atkurti naudojant palyginti trumpus jų struktūros segmentus – peptidus, imituojančius tarpląstelinę matricą. Šio tyrimo tikslas buvo sukurti uždaro tipo augalų audinių auginimo sistemą, naudojant tabako augalus (*Nicotiana tabacum*), skirtus rekombinantinio peptido, atkartojančio III tipo fibronektino 9-10 domeno segmentus (FN9-10), gamybai.

FN9-10-3 gamybai augaluose buvo paruošta konstrukcija su papildomais moduliais reikalingais raiškos detekcijai (GFP fluorescuojantis baltymas), peptido grynimui (6xHis žymė) ir gyno peptidui atskyrimui nuo žymės (WELQ proteazės kirpimo seka) (1 pav.).



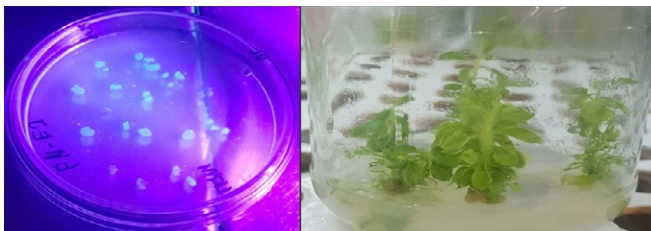
### 1 pav.

Peptidų gamybai augaluose naudota DNR konstrukcija. FN9-10 naudoti skirtingi promotorius ir terminatorius, kaip nurodyta tekste. Rodykle pažymėta WELQ proteazės kirpimo vieta.

Peptido DNR konstrukcija buvo paruošta genų sintezės būdu ir klonuota pDG-B3alfa-1 klonavimo vektoriuje panaudojant GoldenBraid technologiją. Sukurti transformacijos vektoriai taikant skirtingus promotoriaus ir terminatoriaus derinius:

- 1) pastovios raiškos promotorius p35S ir terminatorius t35S,
- 2) pastovios raiškos promotorius pNos ir terminatorius tNos,
- 3) temperatūros indukuojamas promotorius pHsp18.2 ir terminatorius t35S.

Paruoštos *Agrobacterium* ląstelės ir tabako augalų branduolio genomo transformacija atlikta taikant lapų transformacijos metodą. Transformuoti augalai gauti panaudojant konstrukciją su promotoriumi p35S. Pagal GFP fluorescenciją, atrinkti kaliaus fragmentai, pasižymintys FN9-10 konstrukcijos raiška (2 pav.).



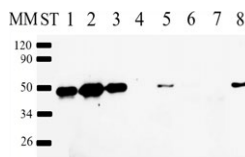
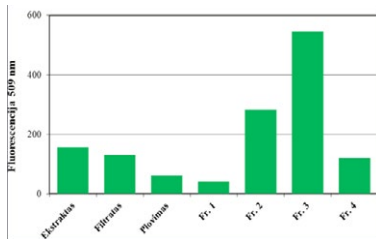
**2 pav.**  
Transformuoti tabako (*N. tabacum*) nediferencijuoti kaliaus audiniai (kairėje) bei mikroūgliai (dešinėje).

Atlikus augimo sąlygų optimizavimo eksperimentus nustatyta, kad tabako suspensijos ląstelių gyvybingumas priklausė nuo maitinamosios terpės sudėties. Tyrimai rodo, kad daugiausia gyvų ląstelių buvo MS terpėje su 0,25 mg/l BAP + 2 mg/l NAR (vidutiniškai 21 ląstelė mikroskopo matymo lauke). Tinkamiausia temperatūra auginti ląsteles 25 °C. Taip pat nustatyta optimali ląstelių pradinės masė – 0,045 g kai terpės tūris 100ml.

Atrinkus efektyviausia rekombinantinio FN9-10 peptido raiška pasižyminčias tabako ląstelių suspensijos linijas ir jų auginimo sąlygas, atlikti rekombinantinio FN9-10 peptido gryninimo eksperimentai. Šiam tikslui buvo panaudota nikelio jonų afininė matrica. Eksperimentai parodė, kad sukurta konstrukcija specifiskai sąveikauja su afinine matrica (3 pav.) ir metodas gali būti taikomas didesniems peptido kiekiams paruošti.

**3 pav.**

FN9-10 gryninimo iš tabako ląstelių vertinimas taikant GFP fluorescenciją (kairėje) ir imunocheminę analizę (anti-FN antikūnis) (dešinėje). ST – molekulinės masės standartas, 1-3 – gryno peptido frakcijos, 4 – neigiamo kontrolinio mėginio eliuacija, 5 – plovimas, 6 – filtratas, 7 – neigiamas kontrolinis mėginys, 8 – tabako audinių ekstraktas.



## Padėka

Dėkoju Lietuvos Mokslų tarybai už mokslinio studentų projekto Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0028 finansavimą.

## Literatūra

- [1] Conley A.J., Zhu H., Le L.C., Jevnikar A.M., Lee B.H., Brandle J.E., Menassa R. Recombinant protein production in a variety of *Nicotiana* hosts: a comparative analysis. *Plant Biotechnol. J.* (2011). 9(4): Psl. 434–444
- [2] Colgan R., Atkinson C. J., Paul M., Hassan S., Pascal M. W. Drake, Sexton A. L., Santa-Cruz S., James D., Hamp K., Gutteridge C., K-C. Ma. J. Optimisation of contained *Nicotiana tabacum* cultivation for the production of recombinant protein pharmaceuticals. (2010) DOI 10.1007/s11248-009-9303-y. Psl. 241–256.

**U. Stulpinaitė<sup>1</sup>,  
V. Tilvikienė<sup>2</sup>, M. Ayaz<sup>2</sup>,  
D. Feizienė<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Vytauto Didžiojo universitetas  
<sup>2</sup> Lietuvos Agrarinių ir  
Miškų Mokslų Centras

## BIOANGLIES ĮTAKA DIRVOŽEMIO VANDENS SULAIKYMUI IR AUGALAMS

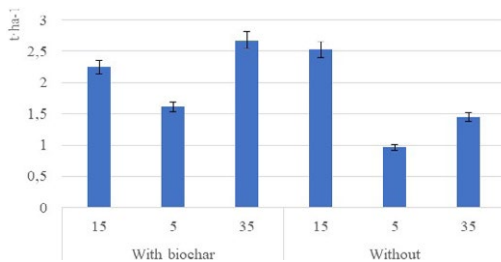
**Įvadas.** Klimato kaita ir dirvožemio kokybės blogėjimas yra viena iš svarbiausių šių dienų aplinkos problemų, todėl reikia ieškoti sprendimų. Norint išvengti katastrofiško poveikio globaliai visuomenei, reikėtų dėti visas pastangas, kad temperatūra nepakistų daugiau kaip 1,5 ° C pasaulio mastu. Todėl šalia greito antropogeninių šiltnamio efektą sukeliančių dujų išmetimo mažinimo būtina ieškoti ir alternatyvių būdų anglies kaupimui dirvožemyje. Bet ne tik klimato pokyčiai kelia grėsmę planetų ekosistemų pusiausvyrai. Pavyzdžiui, dirvožemio degradacija, be kita ko, atsirado dėl netvarių ūkininkavimo metodų ir vėlesnio miškų naikinimo ieškant naujų dirbamų žemių, o tai kelia tiesioginę grėsmę ir pasaulio biologinei įvairovei.

Tikėtina, kad bioanglis (angl. Biochar) gali būti viena iš priemonių, padedančių pasaulinei visuomenei priartėti prie anglies atžvilgiu neutralios ekonomikos, taip pat kovoti su dirvožemio blogėjimu. Bioanglis yra kietos anglies turinčios medžiagos, susidarančios termofiziškai konvertuojant biomasę bedeguoje aplinkoje. Bioanglis gali būti gaminama iš įvairių biomasės žaliavų: medienos, žemės ūkio atliekų produktų, tokių kaip ryžių lukštai, aliejinių palmių atliekų, šiaudų arba iš nuotekų dumblo [1].

**Tyrimų tikslas** - įvertinti bioanglies įtaką dirvožemio cheminėms savybėms, augalų cheminiai sudėčiai bei produktyvumui auginant augalus skirtingomis drėgmės sąlygomis.

### **Metodika. ....**

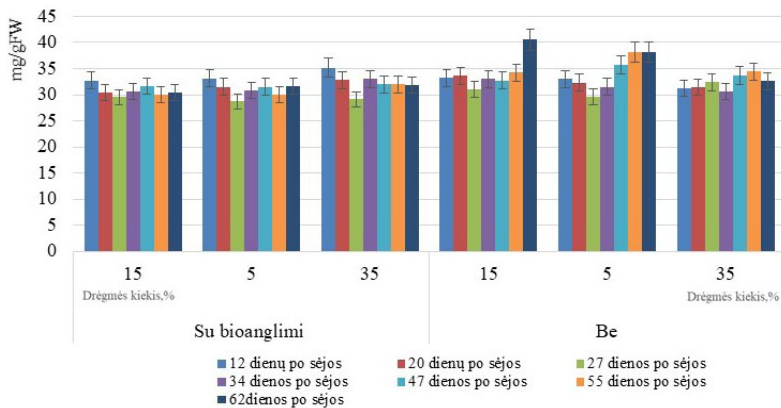
**Resultatai.** Atlikus eksperimentą nustatyta, kad didžiausias augalų produktyvumas buvo esant drėgmės pertekliui variantuose, kuriuose dirvožemis buvo sumaišytas su bioanglimi – 2,68 t·ha<sup>-1</sup>, tuo tarpu mažiausias esant sausrui be bioanglies, kur produktyvumas siekė tik 0,96 t·ha<sup>-1</sup> (1 pav.).



**1 pav.**  
Augalų produktyvumas esant skirtingam dirvožemio drėgmeniui

Nustatyta, kad sausrroje dirvožemyje su bioanglimi, augalų produktyvumas yra didesnis negu tose pačiose drėgmės sąlygose dirvožemyje be bioanglies. Šio varianto produktyvumas taip pat didesnis už perteklinį vandens kiekį turintį variantą be bioanglies, kurio augalų produktyvumas buvo – 1,45 t·ha<sup>-1</sup>.

Atlikus chlorofilo indekso matavimus, nustatyta, kad didžiausias jo kiekis buvo 62 dienos po sėjos variante be bioanglies, kur drėgmės kiekio sąlygos yra optimalios (2 pav.), o tuo tarpu mažiausias 27 dienos po sėjos variante su bioanglimi kurio esant sausrai – 5 %.



**2 pav.**  
Chlorofilo indekso matavimas

**Išvados.** Atlikus tyrimus nustatyta, kad bioanglis turėjo įtakos augalų produktyvumui, variantuose su bioanglimi augalų produktyvumas buvo didesnis, nei variantuose su įprastu dirvožemiu, didžiausias produktyvumas - 2,68 t·ha<sup>-1</sup> nustatytas esant drėgmės pertekliaus sąlygoms su bioanglies priemaiša. Tačiau didelis – 2,53 t·ha<sup>-1</sup> augalų produktyvumas nustatytas ir esant optimalioms drėgmės sąlygoms įprastame dirvožemyje. Šie tyrimai parodė, kad bioanglis praturtina dirvožemį ir augalus mikroelementinėmis medžiagomis tokiomis kaip fosforas, kalcis, kalis, magnis. Tačiau kartu su bioanglimi į dirvožemį ir augalus atkeliauja ir sunkieji metalai, toki kaip cinkas, varis. Labai svarbu prieš maišant bioanglį su dirvožemiu nustatyti dirvožemio ir bioanglies chemines savybes.

### Literatūra

- [1] Assessment LC, Matu J, Hn T, et al (2020) Life Cycle Assessment of biochar-to-soil systems : A review. doi: 10.1016/j.jclepro.2020.120998
- [2] Bashir A, Rizwan M, Zia M, et al (2020) Chemosphere Application of co-composted farm manure and biochar increased the wheat growth and decreased cadmium accumulation in plants under different water regimes. Chemosphere 246:125809. doi: 10.1016/j.chemosphere.2019.125809

**D. Sidabrienė,  
A. Augustaitis**

*Vytauto Didžiojo Universitetas,  
Žemės Ūkio Akademija  
Studentų g. 1,  
LT-53361 Akademija, Kauno r.*

## **LIETUVOS MIŠKŲ PAGRINDINIŲ MEDŽIŲ RŪŠIŲ EKOFIZIOLOGINĖS REAKCIJOS EKSTREMALIAUS METEOROLOGINIO STRESO SĄLYGOMIS**

Transpiraciją vadiname procesą, kurio metu vanduo juda iš dirvožemio į augalo šaknis, ir per balaną pasiekia lapus, o kaitinant saulei, vanduo virsta garais, ir jie išgaruoja per tūkstančius mažų žiotelių. (Lambers et al., 1998). Šis vandens judėjimo ciklas saugo augalus nuo perkaitimo.

Vandens ir anglies ciklai yra glaudžiai tarpusavyje susiję dėl dujų ir vandens apykaitos per žioteles, kurie glaudžiai siejasi su aplinkos veiksniais pirmiausiai su dirvožemio ir oro drėgme bei temperatūra (Moren et al., 2001). Transpiracija yra vienas svarbiausių augalo funkcionavimui reikalingų procesų (Baumgarten et al., 2019). Per žioteles vyksta dujų mainai, į ląsteles patenka fotosintizei reikalingas CO<sub>2</sub>, o išskiriamas O<sub>2</sub> bei transpiruojamas H<sub>2</sub>O. Trumpalaikės sausros sumažina medžio lapų ir augalų žiotelinį laidumą (Lambers et al., 1998).

Vandens naudojimo efektyvumas gali būti naudojamas kaip streso indikatorius brandiems medynams (Morén et al., 2001; Beer et al., 2009) taip pat buvo sužinota, kad vandens naudojimo efektyvumas medžiuose didėja dėl streso (Juonytė ir kt., 2019). Ilgalaikiai vandens efektyvumo tyrimai eglei ir pušiai parodė didėjimą, kuris paaiškinamas ne tik padidėjusia CO<sub>2</sub> koncentracija (Keenan et al. 2013; Penuelaset al 2011; Wullschlegler et al 1995, Levesque et al., 2014), bet ir sustiprintu rūšių prisitaikymu, susidūrus su stresoriais, didinant vandens naudojimo efektyvumą (Lambers et al., 1998; Ge et al., 2011).

### **Metodas**

Vyraujančių rūšių medžių transpiracijos ir kamienų augimo į skersmenį sezoniniai intensyvumo ypatumų tirti 2016-2018 m. vegetacijos sezono metu Aukštaitijos kompleksinio monitoringo stotyje. Tirtos trys medžių rūšys: paprastoji eglė, paprastoji pušis ir karpotasis beržas. Sulčių tėkmė balanoje buvo išmatuota karščio bangos plitimo metodu, naudojant SFM1sensorius. Sulčių tėkmės sensoriai buvo instaliuoti į kamieno balaną maždaug 130 cm stiebo aukštyje šiaurinėje kamieno dalyje ir apsaugoti aliuminio folijos gaubtu. Žievės storis buvo matuojamas naudojant specialiu žievės storio matuokliu. O medžių perimetro prieaugis 1,3 m aukštyje buvo matuojamas aukštos skiriamosios gebos dendrometrais (DRL26, EMS Brno).

**Vykdomo tyrimo tikslas** – nustatyti Lietuvos miškų pagrindinių medžių rūšių ekofiziologines reakcijas ekstremalaus meteorologinio streso sąlygomis. Tikslui siekti buvo iškelti šie uždaviniai.



## Uždaviniai

1. nustatyti vegetacijos ir tirtų medžių transpiracijos laikotarpių sąsajas.
2. nustatyti tirtų medžių rūšių transpiracijos ypatumus skirtingose medynuose augančiuose skirtingose miško augavietėse.
3. Nustatyti meteorologinių veiksnių poveikį tirtų medžių transpiracijos paros intensyvumui.
4. Išaiškinti žiotelių pralaidumo kaitą karščio bangų ir intensyviausios sausros laikotarpiu.
5. Įvertinti tirtų medžių rūšių prisitaikymą prie pastarojo laikotarpio klimatinėms sąlygoms pagal jų vandens panaudojimo efektyvumo pokyčius.

## Tyrimo rezultatai

Vertinant 2016-2019 m. meteorologines sąlygas galime teigti, kad 2019 m. buvo ekstremalaus streso metai (1 lentelė). Šių metų vegetacijos laikotarpiu (kovo – lapkričio mėnesiais) buvo fiksuojama aukščiausia oro temperatūra, dirvožemio temperatūra 20 cm gylyje, vėjo greitis mažiausia drėgmė. Tokios meteorologinės sąlygos turėjo didelę įtaką pagrindinių medžių rūšių transpiracijos intensyvumui ir prieaugio susidarymui.

### 1 lentelė. Vidutiniai meteorologinių sąlygų rodikliai

	Oro temperatūra	Slėgis	Dirvožemio t. 20 cm gylyje	Drėgmė	Krituliai	Vėjo greitis
2016	9,77	996,9	9,4	80,4	64,47	1,45
2017	9,53	994,52	9,02	81,6	96,42	1,53
2018	10,72	997,66	9,79	77,77	54,22	1,46
2019	10,84	995,27	10,04	77,3	63,02	1,56

Tyrimo metu nustatyta, kad pušies ir eglės transpiracija prasideda panašiu laikotarpiu kovo – balandžio mėnesiais, o pasibaigia lapkričio mėnesį. Beržo transpiracijos pradžia fiksuojama nuo gegužės mėnesio, kada išsiskleidžia pirmieji beržo lapai, o pasibaigia spalio mėnesį, krentant lapams. Intensyviausia transpiracija vyko grynuose medynuose.

2019 m. išsiskyrė trumpiausiu paprastosios pušies ir paprastosios eglės vegetacijos laikotarpiu. Spygliuočiuose vegetacija truko nuo 203 iki 217 dienų (2 lentelė). Kuomet perteklinės drėgmės metais (2017 m.) vegetacijos laikotarpis mišriuose eglės medynuose siekė iki 279 dienų (Nb augavietėje) (3 lentelė). 2019 m. Karpotojo beržo, augančio grynoje Pc augavietėje, medynuose vegetacijos laikotarpis buvo didžiausias, lyginant su kitomis beržo augavietėmis jis truko 194 dienas (4 lentelė). Tai rodo, kad aukšta oro temperatūra ir pakankamas vandens kiekis skatino karpotojo beržo transpiracijos intensyvumą.

### 2 lentelė. Paprastosios pušies 2016-2019 m. aukščiausia transpiracija skirtingose miško augavietėse.

	Nb P mišrus l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Nb P grynas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Pc P grynas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius
2016	57,0	186	48,0	186	102,7	184
2017	63,6	258	31,4	256	75,3	240
2018	67,8	232	56,9	232	72,1	230
2019	55,9	213	46,2	213	99,7	217

**3 lentelė.** Paprastosios eglės 2016-2019 m. aukščiausia transpiracija skirtingose miško augavietėse.

	Nb E I ardas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Nb E II ardas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Lc E grynas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Pc E grynas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius
2016	36,1	187	46,4	186		249	117,7	178
2017	46,1	279			72,8	230	157,3	173
2018	41,5	218			87,2	216	122,9	158
2019	35,8	217	48,4	203	66,1	231	125,1	194

**4 lentelė.** Karpotojo beržo 2016-2019 m. aukščiausia transpiracija skirtingose miško augavietėse.

	Nb P mišrus l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Nb P grynas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius	Pc P grynas l/parą	Trukmė/ dienų skaičius
2016	63,3	159	64,8	185	111,6	178
2017	63,9	156	90,4	163	55,1	173
2018	40,4	176	85,3	188	44,8	158
2019	39,3	173	66,2	175	62,7	194

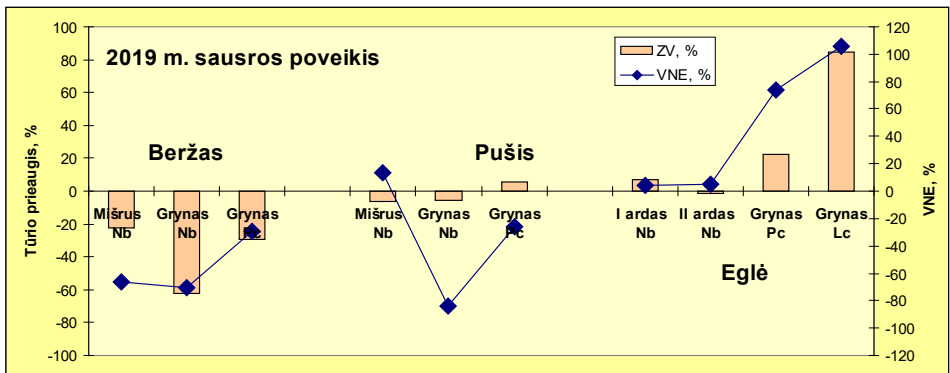
Vertinant meteorologinių veiksnių įtaką eglės transpiracijai nustatyta, kad kritulių ir drėgmės neigiamas poveikis intensyviausiai jautėsi Nb miško augavietėje II arde augančioms eglėms. Maksimali ir vidutinė oro temperatūra turėjo mažiausią poveikį II arde augančioms eglėms. Didžiausias FAR spinduliuotės poveikis buvo Nb miško augavietės I arde ir grynoje Pc miško augavietėje.

Kritulių ir drėgmės didžiausias neigiamas poveikis pušies transpiracijai buvo grynoje Nb miško augavietėje. Temperatūrų, slėgio ir FAR spinduliuotės didžiausias teigiamas poveikis buvo mišrioje Nb miško augavietėje.

Intensyviausia meteorologinių veiksnių įtaka beržo transpiracijai buvo grynoje Nb miško augavietėje. Meteorologiniai veiksniai medžių transpiracijos intensyvumą sąlygojo priklausomai nuo medyno mišrumo ir augavietėse drėgmės režimo. Normaliai drėkinamose miško augavietėse, kritulių, oro drėgmės ir saulės spinduliuotės poveikis buvo reikšmingesnis tirtų medžių rūšių transpiracijos intensyvumui, negu laikinai užmirkusiose ar pelkinėse miško augavietėse.

Apibendrinti gauti duomenys parodė, kad eglės apsisaugojimas nuo perkaitimo yra pats didžiausias ji beveik dvigubai sumažina transpiracijos intensyvumą uždarydama žioteles.

Prieaugio analizės rezultatai parodė, kad kad eglų kamienų prieaugis didžiausias yra Lc miško augavietėje. Ši reikšmė taip pat yra didžiausia tarp visų tirtų medžių rūšių. Pušų didžiausias tūrio prieaugis yra mišriame Nb miško augavietės medyne. Beržų - didžiausias tūrio prieaugis yra grynoje Nb miško augavietėje.



1 pav.

2019 m. sausros poveikis medžių tūrio metiniam prieaugiui ( $dm^3$ ) ir vandens naudojimo efektyvumui (VUE  $cm^3 / l$ ) lyginant su 2017 m. laikotarpiu

2019 m. sausra turėjo didelį neigiamą poveikį karpotojo beržo tūrio prieaugiui, jis sumažėjo net 60%, o vandens panaudojimo efektyvumas sumažėjo 70% (1 pav.). Paprastosios pušies tūrio prieaugiui sausros laikotarpis neturėjo didelio poveikio, išskyrus gryną Nb miško augavietės medyną, kuriame VPE nukrito net iki -70%, kas rodo, kad paprastoji pušis sausros laikotarpiu transpiravo 60% daugiau vandens, o tūrio prieaugis liko nepakitęs. Išsiskyrė tik paprastoji eglė, kurios tūrio prieaugis sausros laikotarpiu grynoje Lc miško augavietėje padidėjo net 84%, o VPE viršijo 100%.

### Išvados

1. Visų rūšių intensyviausia transpiracija vyko grynuose medynuose.
2. Tirtų medžių suminę paros transpiraciją didino oro temperatūra, slėgis ir FAR spinduliuotė, o mažino drėgmė ir krituliai.
3. Oro temperatūra - meteorologinis veiksnys, sąlygojantis medžio apsisaugojimo reakciją. Kai oro temperatūra pakyla iki 25 laipsnių, vyksta maksimali medžių transpiracija, tačiau kai tik oro temperatūra viršija 30 °C, spygliuočiai medžiai, bandydami išvengti dehidratacijos, uždaro žioteles ir sumažina jų pralaidumą. Eglų transpiracija sumažėja nuo 100 l/dieną iki 60 l/dieną, pušų - nuo 100 l/dieną iki 80 l/dieną.
4. Beržai nėra prisitaikę prie dabartinių klimatinių sąlygų ir karščio bangų, didėjantis transpiracijos intensyvumas, gali sukelti šios rūšies medžių dehidrataciją. Tai viena iš pagrindinių priežasčių, kodėl beržų prieaugis paskutiniu metu yra reikšmingai mažesnis, nei kitų vyraujančių Lietuvoje medžių rūšių, ir kodėl toliau šylant klimatui jų prieaugis reikšmingai mažėja.
5. Gauti rezultatai leidžia teigti, kad priešingai nusistovėjusiai nuomonei apie eglų mažą atsparumą sausrai (Kharuk et al., 2015) eglės yra pakankamai gerai prisitaikiusios prie dabartinių meteorologinių sąlygų Lietuvoje. Ko gero, paprastosios eglės apsisaugojimo mechanizmas nuo sausrų užveriant žioteles kaitrų ir sausrų metu yra gerai išvystytas ir prisitaikęs prie jau daugiau kaip 30 metų intensyviai besikeičiančio klimato šiaurės rytinėje Europos dalyje.

---

## Litertūra

- [1] Keenan, T.F., Hollinger D.Y., Bohrer G., Dragonis D., Munger J.W., Schmid H.P., Richardson A.D. 2013. Increase in forest water – use efficiency as atmospheric carbon dioxide concentrations rise. *Nature*, 499, 324-327.
- [2] Morén, A.-S., Lindroth, A., Grelle, A. Water-use efficiency as a means of modelling net assimilation in boreal forests. 2001.15, 67–74
- [3] Lambers H. Stuart F. Chapin III Thijis L. Pons *Plant Physiological Ecology*. Springer, Germany, 1998. 223 p.
- [4] Baumgarten, M., Hesse, B.D., Augustaitienė, I, Marozas, V., Mozgeris, G., Byčėnkiėnė, S., Mordas, G., Pivoras, A., Pivoras, G., Juonytė, D., Ulevičius, V., Augustaitis, A., Matyssek, R. Responses of species-specific sap flux, transpiration and water use efficiency of pine, spruce and birch trees to temporarily moderate dry periods in mixed forests at a dry and wet forest site in the hemi-boreal zone. *Journal of Agricultural Meteorology*, . 2019. 75: 13-29.
- [5] Juonytė, D., Sidabras, N., Pivoras, A., Augustaitis, A. Vyraujančių rūšių medžių transpiracijos sezoniniai intensyvumo ypatumai ir juos sąlygojantys meteorologiniai veiksniai// *Miškininkystė*. ISSN 1392-2041. 2019, Nr. 1 (83), p. 7-26. [CAB Abstracts; IndexCopernicus].
- [6] Beer C, Ciaic P, Reichstein M., Baldocchi D., Law BE, Papale D., Soussana J-F, Ammann C., Buchmann N., Frank D, Gianelle D., Janssens IA, Knohl A, Köstner B., Moors E, Rouspard O, Verbeeck H, Vesala T, Williams CA, Wohlfahrt G., 2009. Temporal and among- site variability of inherent water use efficiency at the ecosystem level. *Global Biogeochemical Cycles*, 23, GB 2018, DOI: 10.1029/2008GB003233.
- [7] Ge Z.,-M., Kellomäki S., Peltola H., Zhou X., Wang K.-Y., Väisänen H. 2011. Impacts of changing climate on the productivity of Norway spruce dominant stands with a mixture of Scots pine and birch in relation to water availability in southern and northern Finland. *Tree Physiology* 31, 323-338 p.
- [8] Kharuk V.I., Im S.T., Dvinskaya M.L., Golukov A.S., Ra K.J 2015 *Climate – induced mortality of spruce stands in Belarus*. *Environ. Res Lett*.
- [9] Levesque M., Siegwolf R., Saurer M., Eilmann B., Rigling A. 2014 Increased water – use efficiency does not lead to enhanced tree growth under xeric and mesic conditions. *New Phytologist* 203: 94-109
- [10] Penuelas, J., Canadell, J. G., Ogaya, R. 2011 Increased water – use efficiency during the 20<sup>th</sup> century did not translate into enhanced tree growth. *Glob. Ecol. Biogeogr.*, 20, 597-608
- [12] Wullschlegel S.D., Post W., King A., 1995. On the potential for a CO<sub>2</sub> fertilization effect in forests: Estimates of the biotic growth factor based on 58 controlled- exposure studies. In *Biotic Feedbacks in the Global Climatic System*; Woodwell G.M., Mackenzie F.T., Oxford University Press: New York, NY, USA, 85-107 P.

**R. Šiaulytė,  
A. Lakšutienė**

*Kauno technologijos universitetas*

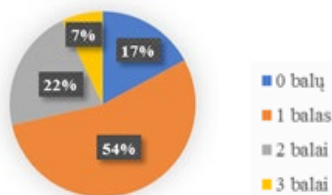
## **FINANSINIO RAŠTINGUMO VERTINIMAS INOVATYVIŲ FINANSINIŲ PASLAUGŲ VYSTYMOSEI KONTEKSTE**

*Jvadas.* Finansinio raštingumo gerinimas siejamas su finansų technologijos (angl. FinTech) plėtra [2], kuri sukelia perversmą visame finansinių paslaugų sektoriuje. FinTech industrijos teikiamos finansinės technologijos yra technologijomis grindžiamos finansinės inovacijos, kurios padeda kurti naujus verslo modelius, veiklos programas, procesus bei produktus [1]. Tokiu būdu pateikiamos inovatyvios finansinės paslaugos suteikia lengvesnę prieigą vartotojams dalyvauti finansinėje veikloje, tačiau, kad būtų priimti tinkami finansiniai sprendimai tam reikalingas finansinis raštingumas [3]. Dėl to, šio darbo tikslas atlikti finansinio raštingumo vertinimą, lemiantį vartotojų elgsenos pasikeitimus inovatyvių finansinių paslaugų vystymosi kontekste.

*Tyrimo metodika.* Siekiant atlikti finansinio raštingumo vertinimą, lemiantį vartotojų elgsenos pasikeitimus inovatyvių finansinių paslaugų vystymosi kontekste, pasirinktas anketinės apklausos metodas. Toliau finansinio raštingumo vertinimui buvo sudaryti trys klausimai apie palūkanas, infliaciją ir rizikos diversifikaciją. Tyrimo populiacija – Lietuvos Respublikos aukštųjų mokyklų studentai, tiriamųjų imtis - 100. Tyrimas buvo atliekamas internetu, o atranka vyko netikimybinio atrankos būdu.

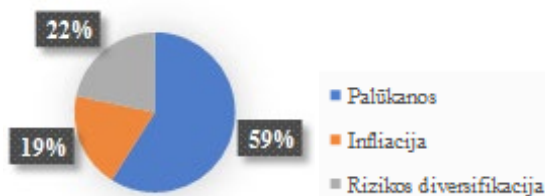
*Tyrimo rezultatai.* Nustatyta, kad inovatyviomis finansinėmis paslaugomis naudojasi 94 proc. apklaustųjų. Tarp respondentų labiausiai žinomos trys kategorijos: pinigų pavedimai ir mokėjimai (99 proc.), taupymas ir investicijos (81 proc.), skolinimasis (87 proc.). Toliau tarp respondentų populiariausia kategorija yra pinigų pavedimo ir mokėjimų (95 proc.) paslauga. Respondentai įvertino, kad juos labiausiai paskatino naudotis lengva sąranka (63 proc.) bei platus funkcijų diapazonas (56 proc.), o didžiausios rizikos srities respondentų nuomone yra trys: kibernetinio saugumo pavojaus (76 proc.), vartotojų apsaugos galimas neužtikrinimas (67 proc.), pinigų plovimo atvejai (49 proc.). Tokie rezultatai tik patvirtina diskusijas apie FinTech sukeltimus kibernetinius pavojus mokslinėje literatūroje. Toliau respondentų finansinio raštingumo įvertinimui, dėl inovatyvių finansinių paslaugų pokyčių, buvo klausama jų asmeninės nuomonės apie tikimybę, kad inovatyvių finansinių paslaugų pagalba yra didinamas finansinis raštingumas. Su tokiu teiginiu sutiko didžioji dauguma respondentų (73proc.), o tik mažuma įvertino, kad nedidina (4 proc.) bei dalis respondentų neturėjo nuomonės šiuo klausimu (23 proc.).

Toliau finansinio raštingumo vertinimui, buvo atrinkti tik tie respondentai, kurie teigė, kad naudojasi inovatyviomis finansinėmis paslaugomis ir sutinka su teiginiu, kad tai daro įtaką finansiniam raštingumui ir dėl to jis didėja.



**1 pav.**  
Finansinio raštingumo vertinimas

Kaip matyti iš 1 pav., nustatyta, kad finansinį raštingumą galima laikyti žemu, nes didžioji dalis respondentų surinko žemus balus nors jau naudojami FinTech paslaugomis. Kiekvienas klausimas buvo sudarytas remiantis mokslinėje literatūroje išskirtu dažniausiai pasitaikančiu finansinio raštingumo vertinimu, pateikiant tris klausimus, o balas buvo skiriamas už teisingai atsakytą kiekvieną klausimą. Kadangi, klausimų buvo trys iš skirtingų sričių, todėl rezultate respondentai daugiausia galėjo surinkti tris balus (7 proc.). Toliau du balus teisingai atsakė į du klausimus (22 proc.), bei atitinkamai vieną balą (54 proc.), atsakė į vieną klausimą. Tačiau buvo ir tokių, kurie teisingai nesugebėjo atsakyti nei į vieną klausimą (17 proc.).



**2 pav.**  
Finansinio raštingumo analizė pagal kategorijas

Toliau rūšiuojant pagal atsakymų grupes išryškėjo dar viena tendencija, kad tie kurie naudojami inovatyviomis finansinėmis paslaugomis dažniausiai teisingai atsakė į klausimą susijusi su palūkanų žinių įvertinimu (59 proc.) (žr. 2 pav.). Toliau respondentų žinios apie infliaciją ir rizikos diversifikavimą maždaug lygiavertės ir atitinkamai siekia 19 proc., 22 proc. Be to, apklausoje išryškėjo, kad studentai tikisi, jog akcijoms nuvertėjant investicinis portfelis leis patirti mažesnį nuostolį, kurį sudaro nekilnojamas turtas kartu su smarkiai nuvertėjusiomis akcijomis nei investiciniai portfeliai į kuriuos buvo įtrauktos obligacijos. Toliau išryškėjęs labiausiai neteisingas atsakymas apie infliacijos suteikiamą naudą buvo siejamas kaip teisingas: asmeniui, pasiskolinusiam per skolinimosi platformą 500 eurų be palūkanų. Tikėtina, kad didelė infliacijos nauda buvo lyginama su skolinimusi be palūkanų, todėl buvo suklysta renkantis teisingą atsakymą. Toliau tie kurie dar nesinaudoja inovatyviomis paslaugomis iš visų apklaustųjų išskirti tik 6 asmenys, todėl jų detali analizė nepateikiama. Visgi, rezultate, didžiosios daugumos nuomone (88 proc.) teigiama, kad jų priimami sprendimai naudojantis inovatyviomis finansinėmis paslaugomis tampa paprastesni ir aiškesni bei tik 14 proc. mano, kad dėl to iššaukiami impulsyvūs ir neapgalvoti sprendimai.

*Išvados.* Apibendrinant, galima teigti, kad beveik visi respondentai naudojami inovatyviomis finansinėmis paslaugomis bei aktyviausiai naudojami pinigų pavedimų ir mokėjimo paslauga. Inovatyvios finansinės paslaugos naudojimuisi patrauklios tampa dėl lengvos sąrankos ir konfigūracijos bei plataus funkcijų diapazono. Nors

plačiai išskiriama ne viena rizika: kibernetinių saugumo pavojai, vartotojų duomenų apsaugos galimas neužtikrinimas, pinigų plovimo atvejai. Tyrimo metu atrinktų asmenų, kurie naudojami FinTech paslaugomis, nustatyta, kad jų finansinis raštingumas yra žemas, nes didžioji dauguma (59 proc.) yra gebantys atsakyti tik į finansinio raštingumo vertinimo srities klausimą apie palūkanas. Vis dėlto respondentai, kurie naudojami inovatyviomis paslaugomis mano, kad tai didina jų finansinį raštingumą bei dėl to sprendimai tampa aiškesni ir paprastesni.

---

### Literatūra

- [1] Lietuvos bankas. (2020) Finansinės technologijos ir inovacijos. <https://www.lb.lt/finansines-technologijos-ir-inovacijos>
- [2] Moenjok, T., Kongprajya, A., & Monchaitrakul, C. (2020). FinTech, Financial Literacy, and Consumer Saving and Borrowing: The Case of Thailand.
- [3] Ran, X., Tan, T., Phan, T. Q., & Keppo, J. (2019). The Role of Financial Literacy in Online Peer-to-Peer Lending: An Empirical Approach.

**G. Astrauskaitė<sup>1</sup>,  
E. Kazlauskas<sup>2</sup>**

*<sup>1,2</sup> Vilniaus universitetas,  
Filosofijos fakultetas,  
Psichologijos institutas,  
Psichotraumatologijos centras*

## **PSICHOLOGINIO ATSPARUMO MEDIJUOJANTIS EFEKTAS POTRAUMINIO STRESO REAKCIJOMS PAAUGLYSTĖJE**

**Įvadas.** Psichologijoje vis daugiau domimasi psichologinėmis traumomis bei jų sukeliama pasekmėmis [1]. Įvairiuose tyrimuose atskleidžiama, kad apie 70 proc. europiečių per savo gyvenimą patiria bent vieną potencialiai trauminį įvykį [2]. Nors bendras susidomėjimas trauminėmis patirtimis auga, tačiau vaikų ir paauglių patiriami trauminiai įvykiai ir potrauminio streso reakcijos išlieka mažai tyrinėjamos. Tyrimuose atsiskleidžia nemažas potencialiai trauminių įvykių paplitimas paauglių imtyje. Epidemiologinėje studijoje atliktoje Didžiojoje Britanijoje nustatyta, kad 31,10 proc. paauglių iki 18 metų buvo patyrę bent vieną traumuojančią įvykį, iš kurių 7,80 proc. buvo nustatytas potrauminio streso sutrikimas [3]. Manoma, kad vaikai ir paaugliai gali būti daug pažeidžiamesni nei suaugę asmenys dėl tuo pat metu aktyviai vykstančių įvairių raidos procesų bei pokyčių [3]. Tyrimai rodo, kad paauglių per gyvenimą patirti potencialiai trauminiai įvykiai siejasi su: potrauminio streso sutrikimu bei kompleksinio potrauminio streso sutrikimu, taip pat depresija, nerimo sutrikimais, elgesio sutrikimais, savižala bei bandymais nusižudyti [3, 4, 5]. Nepaisant patirtų potencialiai trauminių įvykių, ne visiems paaugliams pasireiškia potrauminio streso reakcijos. Tai siejama su paauglių psichologiniu atsparumu [6, 7]. Tyrinėjant trauminę patirtis svarbu atkreipti dėmesį į psichologinį atsparumą, padedantį išgyventi trauminę patirtis [8]. Aptarti tyrimai rodo, kaip svarbu tyrinėti ir geriau suprasti paauglių patiriamus trauminius įvykius, potrauminio streso reakcijas bei paauglių psichologinį atsparumą. Šio darbo tikslas buvo – išanalizuoti paauglių trauminių patirčių ir trauminio streso reakcijų bei psichologinio atsparumo ypatumus.

**Tyrimo metodika.** Tyrime dalyvavo 103 paaugliai: 65 mergaitės (63,1%) ir 38 berniukai (36,9%). Tiriamųjų amžius buvo nuo 12 iki 15 metų. ( $M = 13,32$ ;  $SD = 0,66$ ). Paauglių patiriamos potencialiai trauminės patirtys buvo įvertintos naudojant vaikų ir paauglių traumas klausimyną (CATS) [9]. Paauglių patiriamos potrauminio streso reakcijos buvo įvertintos naudojant tarptautinį traumas klausimyną (ITQ-CA) [10, 11]. Psichologiniam atsparumui įvertinti buvo naudojama trumpoji psichologinio atsparumo skalė (RS-14) [12, 9].

**Rezultatai.** Tyrimo imtyje ( $n = 103$ ) bent vieną potencialiai trauminį įvykį per savo gyvenimą patyrė 64 (62,2%) paaugliai. Daugiausiai paauglių – 39,8 proc. ( $n = 41$ ) patyrė rimtą nelaimingą atsitikimą ar sužalojimą, tokį kaip automobilio avarija, šuns įkandimas ar sporto trauma. Šiek tiek mažiau paauglių 19,40 proc. ( $n = 20$ ) nurodė, kad yra matę, kaip kažkam iš jų aplinkos pliaukštelėjo ar trenkė. Taip pat 18,40 proc.



( $n = 19$ ) paauglių nurodė, kad patyrė stresą ar baimę keliančią medicininę procedūrą. Paaugliams patyrusiems potencialiai trauminius įvykius stipriausiai pasireiškė tokios potrauminio streso reakcijos: grėsmės jausmas ( $M = 2,57$ ;  $SD = 2,04$ ) ir vengimas ( $M = 2,51$ ;  $SD = 2,38$ ) bei santykių sunkumai ( $M = 1,69$ ;  $SD = 2,09$ ). Tyrime atskleidė reikšmingos paauglių patiriamų asmens organizacijos sunkumų ir psichologinio atsparumo sąsajos. Kuo stipriau paaugliams pasireiškia afektų reguliacijos sunkumai ( $r = -0,35$ ,  $p < 0,001$ ), neigiamas savęs vertinimas ( $r = -0,27$ ,  $p < 0,01$ ) bei santykių sunkumai ( $r = -0,33$ ,  $p < 0,01$ ), tuo žemesnis paauglių psichologinis atsparumas.

**Išvados.** Tyrimo imtyje bent vieną potencialiai traumuojantį įvykį per savo gyvenimą patyrė 62,2 proc. paauglių. Tyrime nustatyta, kad aukštesnis paauglių psichologinis atsparumas susijęs su silpniau pasireiškiančiais trauminių įvykių sukeliama potrauminiu stresu būdingais neigiamu požiūriu į save, afektų reguliacijos ar santykių sunkumų požymiais. Tyrimas atskleidžia, kad psichologinis atsparumas yra svarbus apsauginis veiksnys po patirtų traumų, tačiau būtini tolesni longitudinaliniai tyrimai siekiant geriau suprasti paauglių patiriamą stresą ir atsparumą.

Preveninės ir intervencinės programos, orientuotos į paauglių psichologinį atsparumą, padėtų paaugliams sėkmingiau susitvarkyti su trauminių patirčių sukeliama ilgalaikiais sunkumais: afektų reguliacijos sunkumais, neigiamu savęs vertinimu bei sunkumais santykių srityje.

---

### Literatūra

- [1] Olff, M. (2018). Psychotraumatology on the move. *European Journal of Psychotraumatology*, 9, 1–7.
- [2] Darves-Bornoz, J.-M., Alonso, J., de Girolamo, G., Haro, J.-M., Kovess-Masfety, V., Lepine, J.-P., ... Ormel, J. (2008). Main Traumatic Events in Europe: PTSD in the European Study of the Epidemiology of Mental Disorders Survey. *Journal of Traumatic Stress*, 21(5), 455–462.
- [3] Lewis, S. J., Arseneault, L., Caspi, A., Fisher, H. L., Matthews, T., Moffitt, T. E., ... Danese, A. (2019). The epidemiology of trauma and post-traumatic stress disorder in a representative cohort of young people in England and Wales. *The Lancet Psychiatry*, 6(3), 247–256.
- [4] Bellis, M. A., Hughes, K., Leckenby, N., Jones, L., Baban, A., Kachaeva, M., ... Terzic, N. (2014). Adverse childhood experiences and associations with health-harming behaviours in young adults: surveys in eight eastern European countries. *Bulletin of the World Health Organization*, 92(9), 641–655.
- [5] Ross, N., Gilbert, R., Torres, S., Dugas, K., Jefferies, P., McDonald, S., ... Ungar, M. (2020). Adverse childhood experiences: Assessing the impact on physical and psychosocial health in adulthood and the mitigating role of resilience. *Child Abuse and Neglect*, 103, 1–8.
- [6] Masten, A. S., & Barnes, A. (2018). Resilience in Children: Developmental Perspectives. *Children*, 5(7), 1–16
- [7] Mažulytė, E. (2016). A Psychometric Evaluation of the Lithuanian Version of the 14-Item Resilience Scale (RS-14). *Jaunųjų Mokslininkų Psichologų Darbai*, 5, 1–6.
- [8] Kazlauskas, E. (2017). Challenges for providing health care in traumatized populations: Barriers for PTSD treatments and the need for new developments. *Global Health Action*, 10(1), 6–9.
- [9] Sachser, C., Berliner, L., Holt, T., Jensen, T. K., Jungbluth, N., Risch, E., ... Goldbeck, L. (2017). International development and psychometric properties of the Child and Adolescent Trauma Screen (CATS). *Journal of Affective Disorders*, 210, 189–195.
- [10] Cloitre, M., Shevlin, M., Brewin, C. R., Bisson, J. I., Roberts, N. P., Maercker, A., ... Hyland, P. (2018). The International Trauma Questionnaire: development of a self-report measure of ICD-11 PTSD and complex PTSD. *Acta Psychiatrica Scandinavica*, 138(6), 536–546.
- [11] Kazlauskas, E., Zelvienė, P., Daniunaite, I., Hyland, P., Kvedaraitė, M., Shevlin, M., & Cloitre, M. (2020). The structure of ICD-11 PTSD and Complex PTSD in adolescents exposed to potentially traumatic experiences. *Journal of Affective Disorders*, 265, 169–174.
- [12] Wagnild, G. (2009). A Review of the Resilience Scale. *Journal of Nursing Measurement*, 17(2).

M. Aušraitė,  
K. Žardeckaitė-  
Matulaitienė

*Vytauto Didžiojo universitetas*

## TĖVŲ BEI SU VAIKAIS DIRBANČIŲ PROFESIONALŲ KLAIDINGŲ ĮSITIKINIMŲ APIE VAIKŲ PSICHIKOS SVEIKATĄ YPATUMAI

Emocijų ir elgesio sutrikimai, prasidedantys vaikystėje ir paauglystėje, yra vieni iš dažniausių vaikų psichikos sutrikimų. 2019 m. jie buvo diagnozuoti apie 10 tūkst. Lietuvoje gyvenančių vaikų iki 18 metų [1]. Nors šiais laikais mokslu pagrįstos žinios paneigia mitus apie psichikos sutrikimus, visuomenėje vis dar egzistuoja klaidingi įsitikinimai apie vaikų psichikos sveikatą. Užsienio tyrimai rodo, jog emocijų ar elgesio sunkumų (EES) turintys vaikai yra laikomi pavojingesniais bei mažiau protingais nei jų bendraamžiai, psichikos sutrikimams dažniau nei somatiniams susirgimams priskiriamos moraliai nepriimtinos priežastys, pvz., netinkamas vaiko auklėjimas ar pastangų kontroliuoti sutrikimą stoka [2, 3, 4]. Šie įsitikinimai gali būti susiję su atstūmimu ar kitokiu neteisingu elgesiu vaiko atžvilgiu [5]. Jie gali priklausyti nuo įvairių veiksnių, pvz., žinių apie psichikos sutrikimus, ankstesnio kontakto su EES turinčiu vaiku kokybe ir kt. [2, 6]. Vis dėlto apie klaidingus įsitikinimus, susijusius su vaikų psichikos sutrikimais, žinoma labai nedaug, o Lietuvoje atliktų tyrimų šia tema iš viso nepavyko rasti. Būtų itin svarbu nagrinėti su vaikais bendraujančių žmonių, t. y. tėvų bei profesionalų, klaidingus įsitikinimus apie vaikų psichikos sveikatą, nes šių žmonių klaidingas požiūris gali turėti didžiausią neigiamą įtaką vaikų psichikos sveikatai. Visų pirma, klaidingi įsitikinimai gali trukdyti atpažinti vaikų EES ir laiku kreiptis pagalbos. Stigmatizuojantis požiūris į EES turinčius vaikus ar jų šeimas taip pat gali paskatinti gėdos jausmą, kuris sulaiko nuo pagalbos ieškojimo, o suvokta ir internalizuota stigma yra susijusi su žemesne vaiko saviverte [7, 8]. Geresnis tėvų bei su vaikais dirbančių profesionalų klaidingų įsitikinimų apie vaikų psichikos sveikatą ypatumų supratimas būtų naudingas rengiant EES turinčių vaikų stigmatizavimo mažinimo programas. Gauti rezultatai padėtų suprasti, į kurią grupę (tėvų ar profesionalų) būtų naudingiausia nukreipti šias programas bei kurių klaidingų įsitikinimų mažinimas yra aktualiausias. Taigi, šio pristatymo **tikslas** – įvertinti tėvų bei profesionalų klaidingų įsitikinimų apie vaikų psichikos sveikatą ypatumus.

Tyrime dalyvavo 106 tėvai bei su vaikais dirbantys profesionalai (47 tėvai, 59 profesionalai). Dėl skirtingos darbo specifikos, profesionalų – pedagogų bei pagalbą teikiančių profesionalų (psichologų, socialinių darbuotojų bei kt.) duomenys buvo analizuojami atskirai. Dėl itin mažo vyrų įsitraukimo (tyrime dalyvavo tik 2 vyrai), siekiant patikimesnių rezultatų, buvo analizuojami tik moterų duomenys.

**Klaidingi įsitikinimai** buvo vertinami tiriamųjų prašant perskaityti dažniausiai pasitaikančius klaidingus apie vaikų psichikos sveikatą ir prašant 7 balų Likerto skalėje įvertinti, kiek jie sutinka su nurodytu klaidingu įsitikinimu (1 – visiškai nesutinku, 7 – visiškai sutinku). **Atsiribojimas** nuo EES turinčių vaikų buvo vertintas Nuostatų apie vaikų psichikos sveikatą klausimyno Asmeninės stigmos skale ( $Cr_{\alpha}=0,84$ ) [9]. Didėnis balų skaičius reiškia stipriau išreikštą atsiribojimą. Siekiant kontroliuoti **socialinį pageidaujamumą**, buvo naudojama Įspūdžio valdymo skalė ( $Cr_{\alpha}=0,71$ ) iš Koreguoto socialinio pageidaujamumo inventoriaus [10]. Siekiant tikslesnių rezultatų, tiriamųjų, surinkusių aukščiausius įspūdžio valdymo skalės balus (5 tiriamųjų), duomenų į statistinę analizę buvo nuspėsta neįtraukti.

**1 lentelė.** Tėvų (N=44), pedagogų (N=32) bei pagalbą teikiančių profesionalų (N=23) klaidingų įsitikinimų apie vaikų psichikos sveikatą palyginimas

	Vidurkis			$\chi^2$ reikšmė	p
	Tėvai	Pedagogai	Profesion.*		
EES turintys vaikai yra pavojingesni už kitus vaikus	4,48	3,91	4,00	2,80	0,25
Vaikų EES kyla dėl netinkamo auklėjimo	3,18	3,66	3,00	2,35	0,31
EES turintys vaikai per mažai stengiasi, jog pakeistų savo emocijas ar elgesį	2,45	3,44	2,13	10,51	<b>&lt;0,05</b>
EES turintys vaikai yra mažiau protingi už kitus vaikus	2,11	2,22	2,09	0,27	0,87

\*Pagalbą teikiantys profesionalai

1 lentelėje pateikti duomenys rodo, kad klaidingas įsitikinimas, jog EES turintys vaikai per mažai stengiasi, jog pakeistų savo emocijas ar elgesį, pedagogų grupėje buvo stipriau išreikštas nei tėvų ( $U=467,50$ ,  $p=0,01$ ) bei pagalbą teikiančių profesionalų grupėje ( $U=207,00$ ,  $p=0,01$ ). Įsitikinimų, jog EES turintys vaikai yra pavojingesni, mažiau protingi už kitus vaikus bei kad EES kyla dėl netinkamo auklėjimo, išreikštas tėvų, pedagogų bei pagalbą teikiančių profesionalų imtyse nesiskyrė.

**2 lentelė.** Sąsajos tarp klaidingų įsitikinimų apie vaikų psichikos sveikatą bei atsiribojimo nuo EES turinčių vaikų

	Tėvai	Pedagogai	Pagalbą teikiantys profesionalai
EES turintys vaikai yra pavojingesni už kitus vaikus	<b>0,36*</b>	<b>0,62**</b>	<b>0,45*</b>
Vaikų EES kyla dėl netinkamo auklėjimo	0,19	0,25	-0,02
EES turintys vaikai per mažai stengiasi, jog pakeistų savo emocijas ar elgesį	0,22	<b>0,53**</b>	0,25
EES turintys vaikai yra mažiau protingi už kitus vaikus	0,16	<b>0,44*</b>	0,14

\* $p<0,05$ ; \*\* $p<0,01$

2 lentelėje pateikti rezultatai rodo, jog klaidingas įsitikinimas, kad EES turintys vaikai yra pavojingesni už kitus vaikus, yra susijęs su stipriau išreikštu atsiribojimu nuo EES turinčių vaikų visose tirtose grupėse. Pedagogų grupėje su stipriau išreikštu atsiribojimu buvo susiję ir įsitikinimai, jog EES turintys vaikai per mažai stengiasi, jog pakeistų savo emocijas bei elgesį bei yra mažiau protingi už kitus vaikus.

Gauti rezultatai rodo, jog siekiant mažinti EES turinčių vaikų stigmatizavimą, galėtų būti aktualus teisingo pedagogų požiūrio į tai, kiek pats vaikas savo pastangomis gali valdyti EES, formavimas. Taip pat galėtų būti naudinga mažinti tėvų bei profesionalų klaidingą įsitikinimą, jog EES turintys vaikai yra pavojingesni už kitus vaikus. Pedagogų grupėje galėtų būti aktualus ir klaidingų įsitikinimų, jog EES turintys vaikai per mažai stengiasi, jog pakeistų savo emocijas bei elgesį bei yra mažiau protingi už kitus vaikus, mažinimas.

---

## Literatūra

- [1] Higienos instituto Sveikatos informacijos centras. *Lietuvos gyventojų sveikata ir sveikatos priežiūros įstaigų veikla 2019 m. (išankstiniai duomenys)*. Vilnius. 2020. 105 psl.
- [2] Martin, J. K., Pescosolido, B. A., Olafsdottir, S., McLeod, J. D. The Construction of Fear: Americans' Preferences for Social Distance from Children and Adolescents with Mental Health Problems. *Journal of Health and Social Behavior*, 2007, 48(1), 50-67.
- [3] Brook, U., Watemberg, N., Geva, D. Attitude and knowledge of attention deficit hyperactivity disorder and learning disability among high school teachers. *Patient Education and Counseling*, 2000, 40, 247-252.
- [4] Coleman, D., Walker, J. S., Lee, J., Friesen, B. J., Squire, P. N. Children's Beliefs About Causes of Childhood Depression and ADHD: A Study of Stigmatization. *Psychiatric Services*, 2009, 60(7), 950-957.
- [5] Mukolo, A., Heflinger, C. A., Wallston, K. A. The stigma of childhood mental disorders: A conceptual framework. *Journal of the American Academy of Child & Adolescent Psychiatry*, 2010, 49(2), 92-103.
- [6] Kaushik, A., Kostaki, E., Kyriakopoulos, M. The stigma of mental illness in children and adolescents: A systematic review. *Psychiatry Research*, 2016, 243, 469-494.
- [7] Heflinger, C. A., Hinshaw, S. P. Stigma in child and adolescent mental health services research: Understanding professional and institutional stigmatization of youth with mental health problems and their families. *Administration and Policy in Mental Health and Mental Health Services Research*, 2010, 37(1-2), 61-70.
- [8] Corrigan, P. W., Watson, A. C., Barr, L. The self-stigma of mental illness: Implications for self-esteem and self-efficacy. *Journal of social and clinical psychology*, 2006, 25(8), 875-884.
- [9] Heflinger, C. A., Wallston, K. A., Mukolo, A., Brannan, A. M. Perceived stigma toward children with emotional and behavioral problems and their families: The Attitudes about Child Mental Health Questionnaire (ACMHQ). *Journal of Rural Mental Health*, 2014, 38(1), 9-19.
- [10] Paulhus, D. L. Measurement and control of response bias. In: *Measures of personality and social psychology attitudes*. San Diego: Academic Press. 1991, 17-59.

**J. Janavičiūtė,  
L. Šinkariova**

*Vytauto Didžiojo universitetas,  
Socialinių mokslų fakultetas,  
Psichologijos katedra*

## **INSULTĄ PATYRUSIŲ PACIENTŲ KOGNITYVINIŲ FUNKCIJŲ SĄSAJOS SU DEPRESIŠKUMU IR SAVIVEIKSMINGUMU**

Galvos smegenų insultas yra dažna mirties priežastis visame pasaulyje, o mirtingumo rodiklius padidina ir sveikimo procesą apsunkina po insulto atsiradę kognityvinių funkcijų sutrikimai bei pasireiškiantis depresiškumas [1, 2]. Nėra aišku, kodėl vieniems pacientams pasireiškia poinsultinė depresija ir kognityvinių funkcijų sutrikimai, o kitiems ne. Mokslininkai gauna nevienareikšmius rezultatus apie mirtų dviejų reiškinį ryšį – vieni ryšį randa [3, 4], o kiti ne [5, 6]. Tuo tarpu didesnis saviveiksmingumas yra siejamas su mažesniu depresiškumu, geresne gyvenimo kokybe ir kasdieniu funkcionavimu [7], todėl svarbu nagrinėti šių trijų reiškinų sąsajas.

Tyrimo tikslas – įvertinti kognityvinių funkcijų sąsajas su depresiškumu ir saviveiksmingumu.

Tyrimo dalyvavo 22 insultą patyrę. Tiriamųjų amžius svyravo nuo 61 iki 89 metų ( $M=78,09$ ;  $SD=8,6$ ).

Tiriamiesiems buvo pateikti socialiniai – demografiniai klausimai. Insultą patyrusių pacientų kognityvinės funkcijos buvo matuotos Adenbruko kognityvinių tyrimo III-iaja versija [8]. Depresiškumui išmatuoti buvo naudotas Paciento sveikatos klausimynas [9], saviveiksmingumui – Saviveiksmingumo klausimynas insultą patyrusiems pacientams [10]. Siekiant nustatyti įvykusio insulto paveiktą smegenų pusrutulį buvo naudotas piršto bakstelėjimų neuropsichologinis instrumentas [11].

Tyrimo rezultatai atskleidė, kad insultą patyrusių pacientų kognityvinės funkcijos nėra susijusios su depresiškumu ar saviveiksmingumu bendroje insultą patyrusių pacientų grupėje. Insultą patyrusių pacientų grupėje, kurie pasižymi geresnėmis kognityvinėmis funkcijomis, geresnės dėmesio funkcijos yra susijusios su mažesniu depresiškumu ir geresniu saviveiksmingumu. Toje tiriamųjų grupėje blogesnės kalbos funkcijos yra susijusios su didesniu saviveiksmingumu atliekant fizinių pastangų reikalaujančias užduotis ir bendru saviveiksmingumu. Taip pat, geresni erdviniai gebėjimai yra susiję su didesniu savveiksmingumu įveikiant savkontrolės reikalaujančius iššūkius ir bendru saviveiksmingumu. Insultą patyrusių pacientų grupėje, kurie pasižymi blogesnėmis kognityvinėmis funkcijomis, geresni erdviniai gebėjimai yra susiję su didesniu saviveiksmingumu.

---

## Literatūra

- [1] Lewin, A., Jöbges, M., & Werheid, K. (2013). The influence of self-efficacy, pre-stroke depression and perceived social support on self-reported depressive symptoms during stroke rehabilitation. *Neuropsychological rehabilitation*, 23(4), 546-562.
- [2] Kutlubaev, M. A., & Hackett, M. L. (2014). Part II: predictors of depression after stroke and impact of depression on stroke outcome: an updated systematic review of observational studies. *International Journal of Stroke*, 9(8), 1026-1036.
- [3] Murata, Y., Kimura, M., & Robinson, R. G. (2000). Does cognitive impairment cause poststroke depression?. *The American Journal of Geriatric Psychiatry*, 8(4), 310-317.
- [4] Kauhanen, M. L., Korpelainen, J. T., Hiltunen, P., Brusin, E., Mononen, H., Maatta, R., Nieminen, P., Sotaniemi, K. A. and Myllyla, V. V. (1999). Poststroke depression correlates with cognitive impairment and neurological deficits. *Stroke*, 30(9), 1875-1880.
- [5] Gillen, R., Tennen, H., McKee, T. E., Gernert-Dott, P., & Affleck, G. (2001). Depressive symptoms and history of depression predict rehabilitation efficiency in stroke patients. *Archives of physical medicine and rehabilitation*, 82(12), 1645-1649.
- [6] Morrison, V., Pollard, B., Johnston, M., & MacWalter, R. (2005). Anxiety and depression 3 years following stroke: demographic, clinical, and psychological predictors. *Journal of psychosomatic research*, 59(4), 209-213.
- [7] Jones, F., Riazi, A. (2011). Self-efficacy and self-management after stroke: a systematic review. *Disability and rehabilitation*, 33(10), 797-810.
- [8] Hsieh, S., Schubert, S., Hoon, C., Mioshi, E., & Hodges, J. R. (2013). Validation of the Addenbrooke's Cognitive Examination III in frontotemporal dementia and Alzheimer's disease. *Dementia and geriatric cognitive disorders*, 36(3-4), 242-250.
- [9] Spitzer, R. L., Kroenke, K., Williams, J. B., & Löwe, B. (2006). A brief measure for assessing generalized anxiety disorder: the GAD-7. *Archives of internal medicine*, 166(10), 1092-1097.
- [10] Jones, F., Partridge, C., & Reid, F. (2008). The Stroke Self-Efficacy Questionnaire: measuring individual confidence in functional performance after stroke. *Journal of clinical nursing*, 17(7b), 244-252.
- [11] Reitan, R. M. (1959). *Manual for administration of neuropsychological test batteries for adults and children*. Neuropsychology Laboratory, Indiana University medical Center.

**M. Marcinkevičiūtė,  
D. Gailienė**

*Vilniaus universitetas,  
Psichologijos institutas*

## **VYRŲ SUICIDIŠKUMO YPATUMAI ARTIMŲJŲ AKIMIS**

Lietuvoje registruojamų savižudybių skaičius viršija Europos vidurkį 2,07 karto, o mažiausius skirstinyje Azerbaidžano rodiklius net 12,27 karto [1]. Pastebimi ir reikšmingi savižudybių paplitimo skirtumai tarp lyčių. Europos regione, remiantis naujausia pateikta Europos regiono apžvalga, 2016 m. visose šalyse vyrų savižudybių užfiksuota bent kelis kartus daugiau nei moterų [2]. Lietuvoje šis skirtumas dar didesnis. Jeigu Europoje vidutiniškai vyrų nusižudo 3,74 karto daugiau nei moterų, Lietuvoje jų nusižudo 6,12 kartų daugiau nei moterų [1]. Galima kelti prielaidą, kad Lietuvos socioekonominė ir kultūrinei tradicijai būdinga tam tikra specifika, dėl kurios čia įvyksta daugiau savižudybių ir yra didesnis atotrūkis tarp vyrų ir moterų savižudybių paplitimo nei daugelyje pasaulio šalių. Taip pat tai galėtų reikšti, jog dėl šių didelių skirtumų kitose šalyse atlikti suicidologiniai tyrimai turėtų būti atsargiai taikomi Lietuvos gyventojų populiacijai.

Nors savižudybių rodikliai pastaraisiais metais šalyje palengva ima mažėti [3], atotrūkis tarp vyrų ir moterų rodiklių išlieka, o tikrosios rodiklių skirtumų tarp vyrų ir moterų priežastys tyrinėjamos itin retai. Siekiant geriau suprasti, kokį vaidmenį savižudybės procese gali turėti lytis, šiame tyrime pasirinkta vyrų imtis. Kokybinė atskleidžiamoji analizė buvo taikyta siekiant susidaryti bendrą vaizdą apie vyrų savižudybės procesą ir išsikelti prielaidas apie galimai reikšmingus proceso ypatumus. Kadangi tyrimo imtį sudarė nusižudžiusiųjų artimieji, savižudybės proceso metu dalyvavę nusižudžiusiųjų gyvenime, tyrime buvo siekiama ne tik analizuoti vyrų suicidiškumui būdingus ypatumus, bet ir geriau suprasti, kokią reikšmę vaizduojamam savižudybės procesui galėjo turėti artimųjų, kaip pasakotojų, perspektyva.

Tyrimo imtį sudaro 5 tyrimo dalyviai, nusižudžiusiųjų mama, dukra, patėvis ir dvi gyvenimo partnerės (vid. amžius 49 metai; SD = 12,07). Duomenų rinkimui šiame tyrime naudota pusiau struktūruoto interviu strategija. Duomenų analizei naudota kokybinės teminės analizės pagal Braun ir Clarke metodika [4].

Taikant teminės analizės metodą išryškėjo 6 temos, kurias artimieji palietė pasakojimo apie nusižudžiusiuosius metu, padedančios geriau suprasti jų istoriją: „Nusižudžiusiųjų patirti sunkumai“, „Būta ženklų bylojusių apie norą gyventi“, „Kitos nusižudžiusiųjų gyvenimo aplinkybės“, „Nusižudžiusiųjų būdo savybės“, „Pokyčiai prieš savižudybę“ ir „Savižudybės veiksmo aprašymas“. Taip pat, išryškėjo 3 temos, šiame tyrime siejamos su artimųjų pasakojimo ypatumais: „Artimieji nori, tačiau jiems sunku dalintis istorija“, „Kaltės jausmo konfliktas santykių su savižudybės procesu“ ir

“Po savižudybės svarbus aplinkinių elgesys”. Tyrime siekta susidaryti bendrą vyrų savižudybės procesui būdingų ypatumų vaizdą, paanalizuoti, kas kiekvienoje iš išryškėjusių temų buvo svarbu artimiesiems, todėl pavienės šio tyrimo temos turėtų būti interpretuojamos atsargiai.

Remiantis tyrimo rezultatais ir literatūros apžvalga, šio tyrimo metu nustatyta, jog po įvykusios savižudybės artimiesiems gali būti būdingas kaltės jausmo konfliktas, kurio metu jie mėgina įvertinti, kiek prisidėjo prie įvykusios savižudybės. Tokiu atveju, biografinio pasakojimo metu artimieji gali pateikti tokią praeities įvykių (savižudybės proceso) versiją, kuri būtų reikšminga jiems asmeniškai, t. y. padėtų priimti įvykusią savižudybę. Vis dėlto, biografinio pasakojimo kaip duomenų rinkimo strategijos patikimumas yra patvirtintas daugelyje tyrimų [5, 6], todėl prieinama išvados, jog artimųjų biografiniai pasakojimai yra patikimas informacijos šaltinis, galintis padėti geriau suprasti vyrų suicidiškumo ypatumus. Tačiau, artimųjų pasakojime pateikti vyrų suicidiškumo ypatumai geriausiai atspindi tą savižudybės proceso pusę, kuri gali būti matoma ir patiriama žmonėms iš šalies. Tai dalis, o ne visas savižudybės procesas. Remiantis artimųjų pasakojimais, šiame tyrime vyrų suicidiškumo ypatumus geriausiai atspindi **nesėkmės patyrimas** sprendžiant susiklosčiusius sunkumus bei **stiprėjantis emocinis atsiribojimas** nuo aplinkinių žmonių.

---

### Literatūra

- [1] World Health Organization. (2018). *Global Health Observatory (GHO) data: Crude rates: by WHO region/country*. Paimta iš (2020 balandžio 11 d.): [https://www.who.int/gho/mental\\_health/suicide\\_rates\\_crude/en/](https://www.who.int/gho/mental_health/suicide_rates_crude/en/)
- [2] World Health Organization. (2018). *Global Health Observatory (GHO) data: World Health Statistics data visualizations dashboard*. Paimta iš (2020 balandžio 11 d.): <https://apps.who.int/gho/data/node.sdg.3-4-viz-2?lang=en>
- [3] Higienos institutas. (2019). Statistinių duomenų apie mirties priežastis paieškos priemonė. Paimta iš: [http://hi.lt/lt/paieskos\\_priemone.html](http://hi.lt/lt/paieskos_priemone.html)
- [4] Braun, V., & Clarke, V. (2013). *Successful Qualitative Research: A Practical Guide for Beginners*. London: Sage Publications.
- [5] Guevara-Werlang, B., & Botega, N. J. (2003). A semi-structured interview for psychological autopsy in suicide cases. *Brazilian Journal of Psychiatry*, 24(5), 212-219. <https://doi.org/10.1590/s1516-44462003000400006>
- [6] Zhang, J., Wiczorek, W. F., Jiang, C., Zhou, L., Jia, S., Sun, Y., ... Conwell, Y. (2002). Studying Suicide with Psychological Autopsy: Social and Cultural Feasibilities of the Methodology in China. *Suicide and Life-Threatening Behavior*, 32(4), 370–379. <https://doi.org/10.1521/suli.32.4.370.22342>



**D. Šakinytė,  
R. Markšaitytė**

*Vytauto Didžiojo universitetas*

## **SOCIALINIŲ REKLAMŲ, SKIRTŲ VAIRAVIMO IŠGĖRUS PREVENCIJAI, EFEKTYVUMO RODIKLIAI**

Remiantis mokslinė literatūra, vairavimas išgėrus – tai finansinė, socialinė bei viena didžiausių XXI a. pasaulio problemų, o kartu viena pagrindinių jaunų vyrų mirties priežasčių [1]. Pastebima, kad bendrai apie 30 – 40 % žmonių žūčių kelyje yra susijusios su vairavimu išgėrus. Tuo tarpu, remiantis Lietuvos kelių policijos tarnybos duomenimis, 2018 m. dėl neblaivių vairuotojų kaltės žuvo 22, sužeisti 248 žmonės, 2019 m. žuvo 21, sužeisti 269 žmonės [2]. Manoma, kad su laiku nelaimingų atsitikimų, susijusių su vairavimu išgėrus, skaičiai gali didėti, o vairavimas išgėrus tapti trečia dažniausių mirties ar negalios priežasčių pasaulyje [3].

Siekiant spręsti vairavimo išgėrus problemą yra taikomi keli sprendimo būdai. Vienas iš jų – įstatymai, nurodantys leistiną alkoholio kiekį kraujyje vairuojant ir su jų nesilaikymu susijusios nuobaudos. Kitas, taip pat plačiai taikomas pagalbos būdas – socialinės reklamos, kuriomis siekiama sukelti baimės jausmą ir tokiu būdu paskatinti nevairuoti išgėrus. Manoma, kad socialinės reklama kai kuriais atvejais yra galimai efektyvesnis pagalbos būdas lyginant su įstatymais ir jų nesilaikymu susijusiomis bausmėmis. Vis dėlto, taip pat pastebima, kad socialinės reklamos, skirtos vairavimo išgėrus prevencijai, baimės jausmą sukelia ne visuomet ir dėl to galimai sumažėja reklamos, kaip prevencijos priemonės, efektyvumas. [4, 5]. Nors užsienio literatūroje yra išskiriama įvairių reklamos efektyvumą lemiančių veiksnių, susijusių su reklamos kontekstu (reklamose naudojama muzika, vaizdais), kurie gali lemti didesnį ar mažesnį sukeltą baimės jausmą, vis dar trūksta žinių, kas Lietuvoje rodomas socialines reklamas galėtų padaryti efektyvesnėmis.

Tyrimo tikslas – įvertinti į baimę apeliuojančių socialinių reklamų, skirtų vairavimo išgėrus prevencijai, efektyvumą bei su efektyvumu susijusius veiksnius.

Tyrimo metu buvo taikomas fokus grupės metodas bei papildomai pateikiami trumpi klausimai, kuriais buvo siekiama įvertinti reklamų sukeltą baimės jausmą. Iš viso tyrime buvo atliekamos 4 fokus grupės – 2 merginų ir 2 vaikinių. Bendrai tyrime dalyvavo 23 vairavimo teisę turintys aukštųjų mokyklų studentai – 13 moterų ir 10 vyrų. Tiriamųjų amžiaus siekė nuo 19 iki 25 metų (vidurkis – 22,5, stand. nuokrypis – 2,21). Tyrimo metu tiriamiesiems buvo rodomos dvi automobilių kelių direkcijos kurtos socialinės reklamos, skirtos vairavimo išgėrus prevencijai. Pirmojoje reklamoje vaizduojamas neblaivus automobilį vairuojantis vyras, artėjantis prie pėsčiųjų perėjos, per kurią eina vaikas. Vairuotojui nespėjus suvaldyti automobilio, vaikas yra partrenkiamas prieš pat mokinio kitoje gatvės pusėje laukiančią mamą.

Antroje reklamoje vaizduojami du neblaivūs vaikinai, įsėdantys vairuoti automobilį. Vaikinams važiuojant automobilyje garsiai skamba muzika, vaikinai kvailioja, kai staiga už jų nugarų atsiranda šmėkla, kuri tarsi mirtis kvėpuoja į nugarą, tačiau fizinės neigiamos pasekmės nėra rodomos.

Tyrimo rezultatai parodė, kad nei viena iš matytų socialinių reklamų tiriamiesiems baimės jausmo nesukėlė. Kaip to priežastis tiriamieji nurodė nepakankamai tikrovišką bei neaiškų reklamos siužetą ir pateikimą – nepakankamai aiškų neblaivaus vairuotojo vaizdavimą arba tokio elgesio pasekmių vaizdavimą. Taip pat pakankamai stereotipiško muzikinio fono arba reklamoje pateikiamų rekomendacijų nevairuoti išgėrus naudojimą („nevairuok išgėręs, netapk žudiku“). Tiriamieji nurodė, kad siekiant, jog reklama sukeltų didesnį baimės jausmą ir paskatintų nevairuoti išgėrus, būtų reikalinga pateikti aiškesnį reklamos siužetą, kuriame būtų aiškiai matoma (o ne nuspėjama) elgesio priežastys bei pasekmės. Tiriamieji taip pat nurodė, kad reklamoje būtų pravartu pateikti ne nurodymą nevairuoti išgėrus, bet retorinį klausimą, kuris leistų susimąstyti ir labiau paskatintų iš tiesų nevairuoti išgėrus. Vis dėlto, nors ir nereikšmingai, tačiau skyrėsi tiriamiesiems rodytų reklamų sukeltas baimės lygis priklausomai nuo lyties. Remiantis statistine analize, vyrams kiek didesnį baimės jausmą sukėlė reklama, kurioje vaizduojama galima mirties grėsmė, kai moterims – kurioje vaizduojama fizinė žala, susijusi su vairavimu išgėrus. Tyrimo rezultatai taip pat atskleidė, kad reklama, kurioje vaizduojami panašesnio į tiriamuosius amžiaus asmenys (jauni suaugusieji), tiriamiesiems sukėlė didesnę baimę, nei reklama, kurioje buvo vaizduojamas vyresnio amžiaus neblaivus vairuotojas, su kuriuo tiriamiesiems buvo sunkiau susitapatinti.

Atsižvelgiant į gautus rezultatus bei siekiant, kad socialinės reklamos būtų efektyvios sukeldamos baimės jausmą ir kartu skatinančios nevairuoti išgėrus, yra svarbu kurti aiškesnio turinio reklamas, atsižvelgiant į populiacijos dalį, kuriai reklama bus skirta. Taip pat reklamose įtraukti retorinių klausimų, kurie leistų tiriamiesiems susimąstyti ir kartu geriau įsiminti reklamą. Manoma, kad šie veiksniai galėtų ne tik paskatinti nevairuoti išgėrus, bet ir sumažinti su neblaiviu vairavimu susijusių nelaimingų atsitikimų skaičių kelyje.

---

## Literatūra

- [1] Wali, B., Ahmed, A., Iqbal, S., Hussain, A. Effectiveness of enforcement levels of speed limit and drink driving laws and associated factors–Exploratory empirical analysis using a bivariate ordered probit model. *Journal of traffic and transportation engineering*. 2017, 4(3), 272-279.
- [2] Lietuvos kelių policijos tarnyba. *Kelių eismo taisyklių pažeidimo statistika*. Vilnius. Aplankyta: 2020 – 06 – 15.
- [3] Carey, R. N., McDermott, D. T., Sarma, K. M. The impact of threat appeals on fear arousal and driver behavior: A meta-analysis of experimental research 1990–2011. *PLoS one*, 2013, 8(5).
- [4] Zhang, X. The influence of fear and authority on psychological reactance: A study of the effectiveness of public service announcement campaigns on drunk driving prevention among college students. 2014. Doctoral dissertation. Iowa State University.
- [5] Dainora Šakinytė. Ar socialinės reklamos, skirtos vairavimo išgėrus prevencijai, kelia baimę?: Psichologijos bakalauro darbas / Mokslinis vadovas dr. Rasa Markšaitytė. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. Socialinių mokslų fakultetas. Psichologijos katedra. 2018 – 37 p. [Rankraštis] saugomas VDU Psichologijos katedroje.

**V. Šarkauskaitė,  
L. Bukšnytė-Marmienė**

*Socialinių mokslų fakultetas,  
Vytauto Didžiojo universitetas,  
Lietuva*

## **DARBUOTOJŲ NUOSTATŲ Į ORGANIZACINIUS POKYČIUS REIKŠMĖ DARBO ATLIKIMO KOKYBEI**

Didėjanti konkurencija tarp atskirų organizacijų, besikeičianti ekonominė situacija šalyje ir pasaulyje, naujų technologijų vystymasis ir ketvirtoji pramonės revoliucija bei jos inovacijos lemia tai, kad organizacijoms yra svarbu prisitaikyti prie vykstančių pokyčių siekiant išlaikyti konkurencinį pranašumą ir sėkmingą veiklą [1]. Pokyčiai organizacijoje yra vienas iš svarbiausių procesų, kuris vyksta organizacijos gyvavimo laikotarpiu, ir tampa būtina sąlyga organizacijos efektyviam funkcionavimui. Tačiau pokyčius sėkmingai įgyvendinti nėra lengvas uždavinys organizacijų, vykdančių pokyčius, praktika rodo, kad dažnu atveju nepavyksta sėkmingai įgyvendinti pokyčių, kas lemia prastus organizacijos rezultatus ar net visos organizacijos veiklos nutraukimą [2,3]. Tad kyla klausimas, kokie psichosocialiniai veiksniai yra reikšmingi siekiant sėkmingai įgyvendinti pokyčius ir užtikrinti darbuotojų darbo atlikimo kokybę. Manoma, kad vienas iš svarbių psichosocialinių veiksnių, lemiančių sėkmingą organizacijos veiklą pokyčių metu, yra darbuotojų nuostatos į vykstančius pokyčius. Mokslininkų teigimu, darbuotojų nuostatos į pokyčius gali lemti visos organizacijos veiklos rezultatus, jos tikslų pasiekimą ir pokyčių įgyvendinimo efektyvumą [4]. Atkreiptinas dėmesys, jog nors užsienio šalyse nuostatos, kaip darbuotojų elgesį pokyčių metu veikianti charakteristika, yra gana plačiai tyrinėjamos, Lietuvoje šia tema tyrimų yra mažai. Nors būtų galima manyti, kad kitose šalyse atliktų tyrimų rezultatai gali būti pritaikomi ir Lietuvoje, taip nėra. Atsižvelgiant į Lietuvos verslo vystymosi istoriją, galima pastebėti, kad Lietuvos verslas yra išgyvenęs labai specifinę raidą nuo sovietinių mąstymų pagrįsto požiūrio bei sprendimų iki dabartinio modernaus, vakarietiško požiūrio. Remiantis tuo Lietuvos įmonėse dirbančių darbuotojų nuostatomis į pokyčius gali būti būdinga skirtinga raiška nei kitų šalių organizacijų darbuotojams.

Darbuotojų nuostatos į pokyčius organizacijoje ir darbo atlikimo kokybė yra tarpusavyje susiję veiksniai. Nors galima pastebėti, kad yra tyrėjų susidomėjimas šiomis sąsajomis yra stebėtina mažai tyrimų, kurie analizuoja, kaip darbuotojų nuostatos į pokyčius veikia darbuotojų darbo atlikimo kokybę [5,6,7]. Teigiamos darbuotojų nuostatos į organizaciją ir joje vykdomus pokyčius lemia tai, kad darbuotojai rečiau nori palikti savo darbo vietą, taip pat padidina darbuotojų produktyvumą [8]. Mokslininkų atliktame tyrime buvo nustatyta, kad darbuotojų nuostatos yra susiję su darbo rezultatais ir svarbu ne tik kokios susiformavę nuostatos į pokyčius, bet ir į patį darbą [9]. Atliktuose tyrimuose pastebima, jog darbuotojų nuostatos į pokyčius yra teigiamai susijusios su darbuotojų darbo atlikimo kokybe [10]. Nors tyrimai rodo darbuotojų nuostatų į pokyčius organizacijoje ir darbo atlikimo kokybės sąsajas, literatūroje dažnai autoriai mini, jog vis

dar trūksta tyrimų ir yra poreikis domėtis šiais veiksniais bei padėti formuoti teoriją ir literatūrą apie darbuotojų nuostatas į pokyčius organizacijoje ir veiklos atlikimo kokybę [11]. Ir nors dauguma atliktų tyrimų patvirtina prielaidą apie šių veiksmų sąsajas yra tyrimų, kurie parodė, kad darbuotojų nuostatos į pokyčius turi teigiamą, bet nereikšmingą poveikį darbo atlikimo kokybei [12]. Atsižvelgiant į tai šio tyrimo tikslas - nustatyti darbuotojų nuostatų į organizacinius pokyčius reikšmę jų darbo atlikimo kokybei.

Tyrimas atliktas naudojant internetinės apklausos metodą. Taip pat šio tyrimo metu buvo atlikta focus grupė bei sukurta metodika skirta matuoti darbuotojų nuostatas į pokyčius organizacijoje, metodikos patikimumas ir validumas įvertintas tyrimo metu. Tyrime naudotos metodikos:

- **Darbuotojų nuostatoms į pokyčius organizacijoje** įvertinti buvo naudojama R. Dunham ir kt. (1989) metodika skirta vertinti darbuotojų nuostatas į pokyčius organizacijoje (angl. *Attitude toward change instrument*) Cronbach's alfa koeficientas - 0,91.
- **Subjektyviai suvokiama darbuotojų darbo atlikimo kokybė** buvo įvertinta naudojant L. Koopmans (2015) individualaus subjektyviai vertinamo darbo atlikimo klausimyną (angl. *Individual work performance questionnaire*) Cronbach's alfa koeficientas - 0,83.

Tyrimo dalyvavo 261 įvairiose organizacijose dirbantys asmenys. Iš šių tiriamųjų 199 (76%) buvo moterys ir 62 (24%) vyrai. Tiriamųjų amžius nuo 19 iki 62 metų, vidutinis tyrime dalyvavusių asmenų amžius 31 metai.

Tyrimo rezultatai atskleidė statistškai reikšmingą ryšį tarp darbuotojų nuostatų į pokyčius organizacijoje ir subjektyviai suvokiamos darbo atlikimo kokybės (žr. 1 lentelė).

**1 lentelė.** Darbuotojų nuostatų į pokyčius organizacijoje reikšmės darbo atlikimo kokybei tiesinės regresinės analizės rezultatai

	Nestandardizuoti koeficientai		Standartizuoti koeficientai	t	p
	$\beta$	Standartinė paklaida	$\beta$		
Konstanta	2,346	0,170		13,775	<0,001
Darbuotojų nuostatos į organizacinius pokyčius	0,344	0,044	0,443	7,823	<0,001
<b>Tiesinės regresinės analizės modelio rezultatai</b>					
R	R <sup>2</sup>	Pataisytas R <sup>2</sup>			
0,443	0,197	0,193			

Gauti rezultatai atskleidė jog elgesinis nuostatų komponentas yra reikšmingas veiksnys prognozuojantis darbuotojų subjektyviai suvokiamą darbo atlikimo kokybę (žr. 2 lentelė).

**2 lentelė.** Darbuotojų nuostatų į pokyčius organizacijoje komponentų reikšmės darbo atlikimo kokybei žingsninės tiesinės regresinės analizės rezultatai

	Nestandardizuoti koeficientai		Standartizuoti koeficientai	t	p
	$\beta$	Standartinė paklaida	$\beta$		
Konstanta	2,401	0,153		15,726	<0,001
Elgesinis komponentas	0,322	0,038	0,466	8,365	<0,001
<b>Tiesinės regresinės analizės modelio rezultatai</b>					
R	R <sup>2</sup>	Pataisytas R <sup>2</sup>			
0,466	0,217	0,214			

Analizuojant atskirus nuostatų komponentus (emocinį, kognityvinį, elgesinį) ir jų ryšį su subjektyviai suvokiama darbo atlikimo kokybe atlikta žingsninė tiesinė regresinė analizė. Pastebėta, kad darbuotojų nuostatų į pokyčius organizacijoje kognityvinio ir emocinio komponento vertinimas nėra reikšmingas darbuotojų subjektyviai suvokiamai darbo atlikimo kokybei. Darbuotojų nuostatų į pokyčius elgesinio komponento vertinimas yra reikšmingas veiksnys darbuotojų subjektyviai suvokiamai darbo atlikimo kokybei ( $p < 0,001$ ).

Apibendrinant, atlikto tyrimo rezultatai patvirtino, jog darbuotojų nuostatos į pokyčius organizacijoje yra reikšmingas veiksnys prognozuojantis subjektyviai suvokiamą darbo atlikimo kokybę. Taip pat nuostatų elgesinio komponento vertinimas yra reikšmingas veiksnys galintis prognozuoti darbuotojo subjektyviai suvokiamą darbo atlikimo kokybę. Tikėtina, kad darbuotojo nuostatos labiausiai pasireiškia per elgesinio komponento vertinimą. Kuo darbuotojai pozityviau vertina nuostatas į pokyčius organizacijoje tuo geresnė jų subjektyviai suvokiama darbo atlikimo kokybė.

---

### Literatūra

- [1] Doll, G. A., Cornelison, L. J., Rath, H., & Syme, M. L. (2017). Actualizing culture change: The Promoting Excellent Alternatives in Kansas Nursing Homes (PEAK 2.0) program. *Psychological services*, 14(3), 307.
- [2] Lewis, L. (2019). *Organizational change*. John Wiley & Sons, Incorporated.
- [3] Fernandez, S., & Rainey, H. G. (2017). Managing successful organizational change in the public sector. In *Debating Public Administration* (pp. 7-26). Routledge.
- [4] Walker, H. J., Armenakis, A. A., & Bernerth, J. B. (2007). Factors influencing organizational change efforts. *Journal of Organizational Change Management*.
- [5] Balogun, J., & Johnson, G. (2004). Organizational restructuring and middle manager sensemaking. *Academy of management journal*, 47(4), 523-549.
- [6] Elias, S. M. (2009). Employee commitment in times of change: Assessing the importance of attitudes toward organizational change. *Journal of Management*, 35(1), 37-55.
- [7] Walker, H. J., Armenakis, A. A., & Bernerth, J. B. (2007). Factors influencing organizational change efforts. *Journal of Organizational Change Management*.
- [8] Jernigan, I. E., Beggs, J. M., & Kohut, G. F. (2002). Dimensions of work satisfaction as predictors of commitment type. *Journal of managerial psychology*.
- [9] Wei WC, Chu SH (2008). Empirical Study on the Correlation among Personality Traits, Work Attitudes, Service Quality, Job Performances and Customers' Satisfaction – A Financial Holding Company in Taiwan. *Int. J. Lisrel*, 1(2): 1-24.
- [10] Wang, H.-J., Lu, C.-Q. and Lu, L. (2014), "Do people with traditional values suffer more from job insecurity? The moderating effects of traditionality", *European Journal of Work and Organizational Psychology*, Vol. 23 No. 1, pp. 107-117.
- [11] Hettiarachchi, H. A. H., & Jayarathna, S. M. D. Y. (2014). The effect of employee work related attitudes on employee job performance: A study of tertiary and vocational education sector in Sri Lanka.
- [12] Susanty, A., & Miradipta, R. (2013). Employee's job performance: The effect of attitude toward works, organizational commitment, and job satisfaction. *Jurnal Teknik Industri*, 15(1), 13-24.

**T. Vadvilavičius,  
A. Stelmokienė**

*Vytauto Didžiojo universitetas*

## **KAIP MINUSAS GALI SUKURTI PLIUSĄ? RYŠYS TARP TAMSIOSIOS TRIADOS ASMENYBĖS SAVYBIŲ IR DARBO IR ŠEIMOS TEIGIAMOS SĄVEIKOS**

Darbas ir šeima yra vienos svarbiausių šiuolaikinio žmogaus gyvenimo sričių, kurios nepertraukiamai sąveikauja tarpusavyje ir veikia viena kitą [5, 9]. Tiek darbe, tiek šeimoje žmonės atlieka skirtingus vaidmenis, kurie kelia vienokius ar kitokius uždavinius bei stresą, jeigu vaidmenys yra sunkiai suderinami [9]. Įvairių tyrimų rezultatai atskleidė, kad patiriamas darbo-šeimos konfliktas (vaidmenų nesuderinamumas) yra neigiamai susijęs su pasitenkinimu darbu ir gyvenimu [3], teigiamai susijęs su stresu, perdegimu, ketinimu išeiti iš darbo [6]. Vis dėlto, bėgant laikui, mokslininkai pradėjo vartoti darbo ir šeimos praturtinimo terminą, kuriuo siekta apibūdinti, kaip vaidmenys darbe (pvz., vadovo) gali pagerinti gyvenimo kokybę atliekant vaidmenis šeimoje (pvz., tėčio) arba atvirkščiai, vaidmenys šeimoje praturtina vaidmenis darbe [3, 10]. Darbo-šeimos praturtinimas yra teigiamai susijęs su pasitenkinimu darbu, įsitraikimu į darbą, organizaciniu pilietiškumu [11].

Įvairių tyrimų rezultatai atskleidė, jog pozityvios asmenybės savybės, pvz., proaktyvumas, sąmoningumas, turi nemažai įtakos darbuotojų, o ypač vadovų, teigiamos darbo-šeimos sąveikos pasireiškimui [5]. Vis dėlto, mokslinėje literatūroje vis labiau atkreipiamas dėmesys į tamsiąsias asmenybės savybes ir jų raišką organizaciniame kontekste. Mokslinėje literatūroje populiariausiu asmenybės modeliu, aprašančiu tamsiąją asmenybės pusę, yra laikomas D. L. Paulhus ir K. M. Williams (2002) tamsiosios triados asmenybės modelis, kurį sudaro trys asmenybės savybės: Makiavelizmas, narcisizmas ir psichopatija. Teigiama, jog tamsiosios triados asmenybės savybėmis pasižymintys asmenys yra labiau linkę išnaudoti kitus, manipuliuoti kitais, siekdami asmeninės naudos sau sugeba išsisukti iš įvairių nepatogių situacijų, elgiasi neetiškai [8]. Vis dėlto, empirinių duomenų apie tai, ar tamsiąja triada pasižymintys asmenys geba lengviau pasiekti teigiamą darbo-šeimos sąveiką, trūksta. Todėl vienas pagrindinių šio projekto tikslų yra ištirti, kaip tamsiosios triados asmenybės bruožai siejasi su teigiama darbo-šeimos sąveika. Tikimasi, jog šie duomenys papildys vadovavimo ir asmenybės psichologijos sričių žinias.

Tyrimo tikslas – įvertinti darbuotojų ir vadovų Tamsiosios triados asmenybės sąsajas su jų patiriama darbo-šeimos sąveika.

Tyrimė dalyvavo 130 darbuotojų (iš jų 84% moterų). Vidutinis tiriamųjų amžius - 35,27 m. (SN=11,43). 95 tiriamieji tyrimo metu turėjo aukštąjį universitetinį išsilavinimą, 15 vidurinį, 14 aukštąjį neuniversitetinį, 5 nebaigtą aukštąjį ir 1 pagrindinį. 55 tiriamieji buvo vadovai. Kiekybiniame skerspjūvio tyrime, duomenys buvo rinkti

tiriant darbo-šeimos sąveiką (72 tiriamieji, iš kurių 32 vadovai)) ir šeimos-darbo sąveiką (60 tiriamųjų, iš kurių 23 vadovai). Siekiant įvertinti Tamsiosios triados asmenybės savybes, buvo naudotas „Tamsiojo tuzino“ klausimynas [4], Cronbach  $\alpha = 0,835$ . Darbo ir šeimos sąveikai vertinti buvo naudojami keturi instrumentai: Darbo-šeimos konflikto arba Šeimos-darbo konflikto skalės [2] (atitinkamai Cronbach  $\alpha = 0,888$  ir 0,906) ir Darbo-šeimos arba Šeimos-darbo praturtinimo skalės [1] (atitinkamai Cronbach  $\alpha = 0,907$  ir 0,914).

Pradžioje buvo siekiama išsiaiškinti, ar vadovai ir darbuotojai skiriasi pagal Tamsiosios triados asmenybės savybių ir darbo-šeimos sąveikos išreikštumą. Visgi, tyrimo rezultatai atskleidė, jog vadovai ir darbuotojai statistiškai reikšmingai nesiskiria pagal tiriamų reiškinių išreikštumą. Siekiant įvertinti Tamsiosios triados asmenybės savybių ir darbo-šeimos sąveikos ryšį vadovų ir darbuotojų imtyse, buvo atlikta neparametrinė koreliacinė analizė (žr. 1 lentelė).

**1 lentelė.** Tamsiosios triados asmenybės savybių, darbo-šeimos konflikto ir praturtinimo ryšys, vadovų ir darbuotojų imtyse.

	Darbo-šeimos konfliktas	Darbo-šeimos praturtinimas	Šeimos-darbo konfliktas	Šeimos-darbo praturtinimas
Vadovų imtis				
1. Bendras Tamsiosios triados įvertis	0,255	-0,061	0,268	-0,341
2. Makiavelizmas	0,307	-0,091	0,139	-0,532**
3. Psichopatija	-0,231	-0,082	0,200	-0,062
4. Narcisizmas	0,439*	0,026	0,113	-0,070
Darbuotojų imtis				
5. Bendras Tamsiosios triados įvertis	0,126	0,012	0,267	-0,287
6. Makiavelizmas	-0,045	0,114	0,145	-0,266
7. Psichopatija	-0,093	0,232	0,221	-0,152
8. Narcisizmas	0,412**	-0,319*	0,192	-0,325

\*  $p < 0,05$ ; \*\*  $p < 0,01$

Rezultatai atskleidė, kad vadovų imtyje Makiavelizmas yra statistiškai reikšmingai neigiamai susijęs su šeimos-darbo praturtinimu, o narcisizmas yra statistiškai reikšmingai teigiamai susijęs su darbo-šeimos konfliktu. Tuo tarpu darbuotojų imtyje, narcisizmas yra statistiškai reikšmingai teigiamai susijęs su darbo-šeimos konfliktu ir neigiamai su darbo-šeimos praturtinimu.

Kadangi narcisizmas buvo statistiškai reikšmingai susijęs su darbo-šeimos konfliktu abejuose, vadovų ir darbuotojų, imtyse, papildomai buvo atlikta tiesinė regresinė analizė bendroje vadovų ir darbuotojų imtyje. Analizė atskleidė, kad narcisizmas darbo-šeimos konfliktą paaiškina 17,8 proc. ( $F=16,323$ ,  $p < 0,001$ ;  $\beta=0,435$ ,  $p < 0,001$ ).

Tyrimo rezultatai leidžia kelti prielaidą, jog narcisizmu pasižymintys asmenys, šeima yra suvokiama kaip labiau leidžianti patenkinti savo asmeninius poreikius, o darbas yra suvokiamas kaip trukdantis tuos poreikius patenkinti. Įvairių tyrimų rezultatai atskleidžia, jog narcisizmu pasižymintys asmenys yra linkę siekti prestižo, kontroliuoti kitus, tačiau dėl įvairių organizacinių taisyklių ir reikalavimų to gali būti neįmanoma pasiekti. Tokiu atveju, šeima tampa pagrindine socialine erdve laisvai reikšti ir tenkinti savo poreikius. Vis dėlto, pastarajai prielaidai pagrįsti reikalingi tolimesni tyrimai. Taip pat, tyrimo rezultatai leidžia dalinai paneigti kelias teorines prielaidas, jog Tamsiosios triados asmenybės savybės gali padėti asmenims pasiekti pozityvią darbo-šeimos (šeimos-darbo) sąveiką, tačiau reikalingi tolimesni tyrimai.

---

## Literatūra

- [1] Carlson, D. S., Kacmar, K. M., Wayne, J. H., Grzywacz, J. G. Measuring the positive side of the work–family interface: Development and validation of a work–family enrichment scale. *Journal of vocational behavior*, 2006, 68(1), 131-164.
- [2] Carlson, D. S., Kacmar, K. M., Williams, L. J. Construction and Initial Validation of a Multidimensional Measure of Work–Family Conflict. *Journal of Vocational Behavior*, 2000, 56, 249–276.
- [3] Casper, W. J., Vaziri, H., Wayne, J. H., DeHauw, S., Greenhaus, J. The jingle-jangle of work–non-work balance: A comprehensive and meta-analytic review of its meaning and measurement. *Journal of Applied Psychology*, 2018, 103(2), 182.
- [4] Jonason, P. K., Webster, G. D. The dirty dozen: A concise measure of the dark triad. *Psychological assessment*, 2010, 22(2), 420.
- [5] McNamara, T. K., Pitt-Catsoupes, M., Matz-Costa, C., Brown, M., Valcour, M. Across the continuum of satisfaction with work–family balance: Work hours, flexibility–fit, and work–family culture. *Social science research*, 2013, 42(2), 283-298.
- [6] Nohe, C., Sonntag, K. Work-family conflict, social support, and turnover intentions: A longitudinal study. *Journal of Vocational Behavior*, 2014, 85(1), 1-12.
- [7] Paulhus, D. L. Measurement and control of response bias. In J. P. Robinson, P. R. Shaver, L. S. Wrightsman (eds.), *Measures of personality and social psychology attitudes*. San Diego, CA: Academic Press. 1991. p. 768.
- [8] Paulhus, D. L., Williams, K. M. The dark triad of personality: Narcissism, Machiavellianism, and psychopathy. *Journal of research in personality*, 2002, 36(6), 556-563.
- [9] Wang, M., Kwan, H. K., Zhou, A. Effects of servant leadership on work–family balance in China. *Asia Pacific Journal of Human Resources*, 2017, 55(4), 387-407.
- [10] Zhang, Y., Xu, S., Jin, J., Ford, M. T. The within and cross domain effects of work-family enrichment: A meta-analysis. *Journal of Vocational Behavior*, 2018, 104, 210-227.
- [11] Zhao, K., Zhang, M., Kraimer, M. L., Yang, B. Source attribution matters: Mediation and moderation effects in the relationship between work-to-family conflict and job satisfaction. *Journal of Organizational Behavior*, 2019, 40(4), 492-505.



## DESTRUKTYVIUS SANTYKIUS PATYRUSIŲJŲ MOTYVAI, INSPIRUOJANTYS DVASINĖS PAGALBOS PAIEŠKAS RELIGINĖSE ORGANIZACIJOSE

**Tyrimo aktualumas.** Mokslinėje literatūroje, apibendrinančioje daugelį destruktivių santykius patyrusiųjų tyrimų rezultatus (Kolodej, 2005; Vveinhardt, Žukauskas, 2012; ir kt.), atkreipiamas dėmesys į tai, kad aukos dažnai nežino, kur ieškoti pagalbos arba ta pagalba nebūna efektyvi. Nemažai tyrimų rodo, kad asmens religingumas ir vertybių atitikimas santykyje su teikiančiu pagalbą institutu yra reikšmingi kriterijai priimant sprendimą ieškoti pagalbos (Freiheit ir kt., 2006; Moreno, Cardemil, 2013; ir kt.). Be to, reikšminga tai, kad tiek tikėjimas, tiek religinės praktikos turi pozityvius įtakos savivertei, tarpasmeniui jautrumui ir psichologinei gerovei nepriklausomai nuo kultūros (Plante, Boccaccini, 1997; Pakpour ir kt., 2014; Cummings ir kt., 2015; Estrada ir kt., 2019), o kuo didesnis asmens religingumas ir dvasingumas, tuo labiau išauga poreikis greta psichikos pagalbos specialisto kreiptis į asmenis, kurie specializuojasi religinės dvasinės pagalbos srityje (Abe-Kim ir kt., 2004). Nepaisant to, stokojama tyrimų, kuriuose būtų nagrinėjama religinė dvasinė pagalba nukentėjusiems darbo vietoje (Torner, 2018; Deikus, 2019a, 2019b).

**Tyrimo tikslas** – ištirti destruktivių santykius patyrusiųjų motyvus, inspiruojančius dvasinės pagalbos paiešką religinėse organizacijose.

**Tyrimo metodai:** aspektinė ir sisteminė mokslinės literatūros analizė, anketinė apklausa, aprašomoji statistika.

**Teorinė apžvalga.** Destruktyvių tarpusavio santykius patyrusi auka išgyvena stiprias emocijas ir/arba fizinis kančias (Vartia, 2001; Duffy, Sperry, 2007; Merilainen ir kt., 2016; ir kt.), o kraštutiniai – mobingo – atvejais jaučiasi bejėgė, negalinti apsiginti (Nielsen ir kt., 2015). Darbe išgyvenamos krizės neigiamai paveikia karjerą, santykius šeimoje, sutrikdo aukų socialinį gyvenimą ir pareikalauja ženklų išlaidų gydymui (Carnero, Martinez, 2005; Duffy, Sperry, 2007). Tyrimai rodo, kad religinė dvasinė pagalba yra veiksmingas būdas įveikiant traumuojančių situacijų sukeltas krizes (Schuster ir kt., 2001; Hartwick, Kang, 2013; Deventer-Noordeloos, Sremac, 2018). Ieškant pagalbos, be religinių įsitikinimų, svarbus kintamasis yra paskirai kultūrai būdingos vertybės ir santykis su religine organizacija bei kliūtys, susijusios su pagalbą teikiančio asmens kompetencija, informacijos pasiekiamumu, nuostatomis ir kt. (Hagmaier, 1963; Lageman, 1984; Webb, 2012; Turner, 2018). Lietuvoje atliktas tyrimas parodė, kad krikščioniškos organizacijos nepasinaudoja turimomis galimybėmis padėti darbo aplinkoje nukentėjusiems aukoms dėl siauros jų veiklos specializacijos ir žinių trūkumo (Deikus, 2019a, 2019b).

**Tyrimo metodologija.** Empiriniams tyrimui atlikti pasirinktas kiekybinio tyrimo metodas - apklausa, naudojant autoriaus sudarytą uždaro tipo klausimyną. Klausimyno formavimas apėmė keletą etapų: (1) mokslinių straipsnių, skelbiamų Web of Science

Core Collection (Clarivate Analytics), Scopus ir Ebsco duomenų bazėse, analizė; (2) tyrimo instrumentų, gretimų analizuojamai temai, analizė; (3) tyrimo instrumento pirminės versijos parengimas; (4) ekspertinis tyrimo instrumento vertinimas; (5) tyrimo instrumento korekcijos, atsižvelgiant į ekspertų pastabas; (6) tikslinės populiacijos apklausa; (7) tyrimo instrumento korekcijos, atsižvelgiant į tikslinėje apklausoje dalyvavusių asmenų komentarus; (8) parengta galutinė klausimyno versija apklausai atlikti.

**Tyrimo organizavimas.** Klausimynas buvo patalpintas į elektroninę apklausų platformą. Pasirūpinta apsauga nuo nepilnai užpildytų anketų, uždrausti vienodi atsakymų reitingai ir klausimyno pildymas iš to paties IP adreso. Prieiga prie klausimyno nebuvo vieša, respondentams buvo platinama elektroninė apklausos nuoroda asmeniškai elektroniniu paštu.

**Tyrimo etika.** Respondentams buvo pristatytas tyrimo tikslas, garantuotas anonimiškumas ir konfidencialumas, paaiškinta, kad surinkti duomenys bus naudojami išimtinai tik mokslu tikslais, gautas informuotas sutikimas dalyvauti tyrime.

**Tyrimo imtis.** Prieš pradėdant apklausą buvo paskaičiuota, kad esant 95 proc. tikimybei ir ne didesnei kaip 5 proc. paklaidai, imtis turėtų būti 384 respondentai, nes 2018 metų Lietuvos statistikos departamento skelbiamais duomenimis, Lietuvoje dirbančiųjų populiaciją sudarė 1 389 788 pilnamečiai asmenys. Apklausa buvo atliekama 2020 metų sausio-kovo mėnesiais, joje dalyvavo 463 dirbantys asmenys (nuo 18 iki pensinio amžiaus ir pensinio amžiaus dirbantys asmenys), iš kurių vyrai sudarė 39,5 proc., moterys 60,5 proc. 79,5 proc. respondentų – tikintys į Dievą, iš kurių didžiąsą dalį sudarė Romos katalikai (72,8 proc.).

**Tyrimo rezultatai.** Stipriausi interkoreliaciniai ryšiai nustatyti tarp santykio su pagalba teikiančio asmens sąlygotų motyvų ir religinių organizacijų vertybių (0,757,  $p=0,000$ ), asmeninių vertybių (0,709,  $p=0,000$ ) bei aplinkybių sąlygotų motyvų (0,665,  $p=0,000$ ). Regresinė analizė parodė, kad dažniau patiriant neigiamus veiksmus didesnę reikšmę turės aplinkybių sąlygoti motyvai, net jeigu pagalbos žinomumas ir asmeninės vertybės bei pritarimas religinių organizacijų vertybėms lieka tokie pat. Aplinkybės, kurios lemia religinės dvasinės pagalbos ieškojimą, bus tuo svarbesnės, kuo didesnis pritarimas religinių organizacijų vertybėms ir pagalbos žinomumas.

**Išvados.** Tyrimo rezultatai patvirtina stiprias individualizuoto santykio su Dievu tendencijas, persiduodančias ir religinei praktikai, didesnis trikdys dvasinės pagalbos plėtos galimybei gali būti asmeninių santykių su religine organizacija ir ją reprezentuojančiais asmenimis patirtys. Tai, kad asmuo nesijaučia laukiamas religinėje bendruomenėje ar išgyventas tarpasmeninis santykis su dvasininku nepateisino turėtų lūkesčių, gali tapti svariu argumentu atsisakant kreiptis dvasinės pagalbos. Kita vertus, identifikuotas tam tikras informacijos apie teikiamą pagalbą trūkumas pasitraukia į antrąjį planą kaip mažiau svarbus ir išryškėja su aplinkybėmis ir individualiu santykiu, jo kokybe susiję motyvai. Šiuo atveju, remiantis tyrimo rezultatais, minėti motyvai vienodai svarbūs nepriklausomai nuo to, kokio pobūdžio neigiamų bendradarbių elgesį yra patyręs asmuo. Taigi, tyrimo rezultatai leidžia brėžti keletą rekomendacinių gairių dviem lygmenimis: (i) dvasinę pagalbą teikiančių organizacijų ir (ii) atskirų pastoracinę-dvasinę pagalbą teikiančių asmenų.

**Finansavimo šaltinis.** Mokslinis tyrimas finansuojamas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712-16-0144 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“.

---

## Literatūra

- [1] Abe-Kim, J., Gong, F., Takeuchi, D. Religiosity, spirituality, and help-seeking among Filipino Americans: Religious clergy or mental health professionals? *Journal of Community Psychology*, 2004, 32(6), 675-689. <https://doi.org/10.1002/jcop.20026>.
- [2] Carnero, M. A., Martínez, B. Economic and health consequences of initial stage of mobbing: the Spanish case. *XXX Simposio de Análisis Económico, Universidad de Murcia.*, 2005, [http://www.webmeets.com/files/papers/SAE/2005/104/CM05\\_june05.pdf](http://www.webmeets.com/files/papers/SAE/2005/104/CM05_june05.pdf)

- [3] Cummings, J. P., Carson, C. S., Shrestha, S., Kunik, M. E., Armento, M. E., Stanley, M. A., Amspoker, A. B. Santa Clara Strength of Religious Faith Questionnaire: psychometric analysis in older adults. *Aging & Mental Health*, 2015, 19(1), 86-97. <https://doi.org/10.1080/13607863.2014.917606>
- [4] Deikus, M. "...kiek kartų tai padarėte vienam iš šių mažiausiųjų mano brolių, man padarėte" (Mt 25,40): Lietuvos krikščioniškų organizacijų pagalba mobingo aukoms. *Iššūkiai ir socialinė atsakomybė versle-Challenges and Social Responsibility in Business*, 2019a, 64-75.
- [5] Deikus, M. Readiness of Lithuanian religious organizations to provide assistance to persons suffering from mobbing: is the potential exploited? *Visuomenės saugumas ir viešoji tvarka-Public Security and Public Order*, 2019b, 22, 32-53.
- [6] Deventer-Noordeloos, F., Sremac, S. The lived religion of polish sex-trafficked survivors: a targeted investigation for practical theological analysis. *Practical Theology*, 2018, 11(5), 437-449. <https://doi.org/10.1080/1756073X.2018.1536839>
- [7] Duffy, M., Sperry, L. Workplace mobbing: Individual and family health consequences. *The Family Journal*, 2007, 15(4), 398-404. <https://doi.org/10.1177/1066480707305069>
- [8] Estrada, C. A. M., Lomboy, M. F. T. C., Gregorio, E. R., Amalia, E., Leynes, C. R., Quizon, R. R., Kobayashi, J. Religious education can contribute to adolescent mental health in school settings. *International Journal of Mental Health System*, 2019, 13, 28. <https://doi.org/10.1186/s13033-019-0286-7>
- [9] Freiheit, S. R., Sonstegard, K., Schmitt, A., Vye, C. Religiosity and Spirituality: A Psychometric Evaluation of the Santa Clara Strength of Religious Faith Questionnaire. *Pastoral Psychology*, 2006, 55, 27-33. <https://doi.org/10.1007/s11089-006-0029-y>
- [10] Hagmaier, G. Spiritual direction and non-directive counseling. Catholic Theological Society of America. *Proceedings of the Eighteenth Annual Convention*, St. Louis, Missouri, 1963, June 24-27, 125-129.
- [11] Hartwick, J. M. M., Kang, S. J. Spiritual Practices as a Means of Coping with and Ameliorating Stress to Reduce Teacher Attrition. *Journal of Research on Christian Education*, 2013, 22(2), 165-188. <https://doi.org/10.1080/10656219.2013.808979>
- [12] Hunsinger, D. D. Bearing the Unbearable: Trauma, Gospel and Pastoral Care. *Theology Today*, 2011, 68(1), 8-25. <https://doi.org/10.1177/0040573610394922>
- [13] Kolodej, Ch. *Mobbing: Psychoterror am Arbeitsplatz und seine Bewältigung*. Wien: Wuv, 2005, 272 p. ISBN 978-3851148824
- [14] Lageman, A. G. Marketing Pastoral Counseling. *Journal of Pastoral Care*, 1984, 38(4), 274-282. <https://doi.org/10.1177/002234098403800404>
- [15] Meriläinen, M., Sinkkonen, H.-M., Puhakka, H., Kayhko, K. Bullying and inappropriate behaviour among faculty personnel. *Policy Futures in Education*, 2016, 14(6), 617-634. <https://doi.org/10.1177/1478210316639417>
- [16] Moreno, O., Cardemil, E. Religiosity and Mental Health Services: An Exploratory Study of Help Seeking Among Latinos. *Journal of Latina/o Psychology*, 2013, 1(1), 53-67. <https://doi.org/10.1037/a0031376>
- [17] Nielsen, M. B., Tangen, T., Idsoe, T., Matthiesen, S. B., Magerøy, N. Post-traumatic Stress Disorder as a Consequence of Bullying at Work and at School. A Literature Review and MetaAnalysis. *Aggression and Violent Behavior*, 2015, 21, 17-24. <https://doi.org/10.1016/j.avb.2015.01.001>
- [18] Pakpour, A. H., Plante, T. G., Saffari, M., Fridlund, B. The Santa Clara Strength of Religious Faith Questionnaire (SCSORF): A validation study on Iranian Muslim patients undergoing dialysis. *Journal of Religion and Health*, 2014, 53(6), 1885-1897. <http://doi.org/10.1007/s10943-014-9856-9>
- [19] Plante, T. G., Boccaccini, M. T. The Santa Clara Strength of Religious Faith Questionnaire. *Pastoral Psychology*, 1997, 45, 375-387. <https://doi.org/10.1007/BF02230993>
- [20] Schuster, M. A., Stein, B. D., Jaycox, L. H., Collins, R. L., Marshall, G., Elliott, M. N., Zhou, A. J., Kanouse, D. E., Morrison, J. L., Berry, S. H. A National Survey of Stress Reactions after the September 11, 2001, Terrorist Attacks. *The New England Journal of Medicine*, 2001, 345(20), 1507-1512. <https://doi.org/10.1056/NEJM200111153452024>
- [21] Turner, L. Help and hindrance: clergy talking about bullying. *Practical Theology*, 2018, 11(5), 450-461. <https://doi.org/10.1080/1756073X.2018.1536354>
- [22] Vartia, M. A-L. Consequences of workplace bullying with respect to the well-being of its targets and the observers of bullying. *Scandinavian Journal of Work, Environment & Health*, 2001, 27(1), 63-69. <https://doi.org/10.5271/sjweh.588>
- [23] Vveinhardt, J., Žukauskas, P. *Mobingas darbuotojų santykiuose: individas, organizacija, sociumas*. Monografija. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas, 2012, 456 p. ISBN 978-9955-12-847-2
- [24] Webb, M. S. Church Marketing: Building and Sustaining Membership. *Services Marketing Quarterly*, 2012, 33(1), 68-84. <https://doi.org/10.1080/15332969.2012.633440>

**E. Petrauskaitė<sup>1</sup>,  
A. Šapkauskienė<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> *Kauno technologijos universitetas*  
<sup>2</sup> *Vilniaus universitetas*

## **BLOKŲ GRANDINĖS TECHNOLOGIJOS PRITAIKYMO FINANSŲ SEKTORIJE GALIMYBIŲ TYRIMAS**

Blokų grandinės technologija pirmą kartą buvo pritaikyta 2008 m. asmens ar grupės asmenų pasivadinusių Satoshi Nakamoto, kurie išstobulinę šią sistemą pritaikė ją pirmajai kriptovaliutai bitkoinui platinti ir naudoti. Naujosios technologijos patikimumas kuriant autentišką informaciją, saugumas, decentralizuotumas, registruojamos informacijos skaidrumas ir mažesnė apgaulių tikimybė pritraukia finansų sektoriaus specialistus naudoti inovatyvius sprendimus kasdienėms operacijoms bei atveria galimybes technologijos panaudojimui viešojo sektoriaus ar privataus verslo reikmėms. Pagrindinis blokų grandinės technologijos sukūrimo tikslas – užtikrinti atliekamų finansinių operacijų tikslumą, greitį ir patikimumą bei sukurti galimybę atlikti grįžtamasias operacijas. Šiais laikais finansinės operacijos dažniausiai negali vykti be patikimo tarpininko (banko ar registro valdytojo) įsikišimo, tačiau tokios operacijos dažniausiai užtrunka ilgiau ir susiduria su žmogiškomis klaidomis, kadangi nė viena sistema negali aktyviai veikti be patikimo asmens patvirtinimo ar iniciatyvos. Blokų grandinės technologijos panaudojimas pirmosioms kriptovaliutoms sumažino ne tik nepatikimos informacijos kiekį ir abejones rinkoje, bet ir transakcijų, atliekamų tarp tiekėjo ir pirkėjo, kainą (komisinius) [1].

Blokų grandinė veikia kaip plati ir begalinė registruojamų duomenų saugykla, kuriai nėra reikalingas nei tarpininkas, nei registro valdytojas, kuris užtikrintų užregistruojamos informacijos tikrumą, patikimumą ir skaidrumą. Kuriamas duomenų registras pildomas prie vieno informacijos bloko prijungiant kitą dalyvių patvirtintą informacijos bloką, sudaryta iš unikalių informacijos įrašų, informacijos patvirtinimo įrašo ir ankstesnių blokų patvirtinimo įrašų. Blokų grandinės veikimas paremtas maišos kodu (angl. *hash*) ir maišos kodo funkcijomis (angl. *hash code functions*). Maišos kodas yra matematinė funkcija, kuri gaunamą informaciją (angl. *input*) transformuoja ir paverčia išeiga (angl. *output*). Teigiama, kad maišos funkcija yra sunkiai pakeičiama ir sudėtingai užšifruota, tad turint maišos funkcijos rezultatą neįmanoma atkurti pradinės informacijos [2]. Blokų grandinės technologija sulaukia dėmesio ir dėl jos veikimą užtikrinančių konsensuso algoritmų, vartotojams priskiriamo autentiško kriptografinio parašo bei išmaniųjų sutarčių taikymo. Pagrindiniai technologijos konsensuso algoritmai yra paremti atliekamomis matematinėmis funkcijomis ir pasitelkiama kompiuterine energija [3] arba nuo vartotojų turimos ir valdomos sistemos dalies [4] – tiek vienas, tiek kitas konsensuso algoritmas užtikrina vartotojų įsitraukimą į grandinės kūrimo procesą bei leidžia kurti skaidrią, autentišką ir nepakeičiamą informacijos registrą.

Manoma, kad blokų grandinės technologija ir jos teigiamos savybės įvairioms finansų sektoriaus sritims suteiks daugiau efektyvumo, pasitikėjimo ir skaidrumo.

Dažnai blokų grandinės technologija gali būti apibūdinama kaip radikali inovacija, visiškai pakeičianti egzistuojančius procesus gamybos, vertės grandinės valdymo bei finansų srityse ir lyginama su internetu bei jo atsiradimo istorija [5, 6]. Blokų grandinės technologijos pritaikymas yra vienas pagrindinių aspektų, kuris pakeis finansinių paslaugų teikimą ir finansų sektorių įgalinant Fintech įmonių aktyvumą [7]. Bendrai vertinant finansinių paslaugų teikimo ypatybes, vis didesnį poveikį besikeičiantiems įpročiams ir praktikoms turi informacinių technologijų inovacijos, kurių pritaikymo ir adaptacijos klausimai finansų sektoriuje yra nagrinėjami nuolat [8].

Blokų grandinės technologija suteikia galimybes sukurti tiesioginį atsiskaitymo procesą tarp dviejų asmenų (P2P), kurio metu visiškai nereikalingas tarpininkas. Tarpininko eliminavimas turėtų pagerinti ir tarpvalstybinius mokėjimus, kurie atliekami skirtingomis valiutomis, padaryti juos pigesnius, greitesnius ir reikalaujančius mažiau papildomos informacijos apie mokėjimo operacijoje dalyvaujančias šalis [9]. Tikimasi, kad mokėjimų operacijos atliekamos panaudojant blokų grandinės technologiją eliminuos esamas kliringo, atsiskaitymo ir suderinimo praktikas bei pakeis SWIFT ir SEPA mokėjimų sistemas, kurios reikalauja daug rankinio darbo, yra lėtos ir neefektyvios [10].

Žymiausią įtaką blokų grandinės technologijos vystymui padarys ir daugiausiai patirties bei praktinio pritaikymo atvejų kuriant paslaugas grįstas blokų grandinės technologija suteiks būtent FinTech įmonės [11]. Europoje 2018 m. buvo įsteigta ir veikė 15 proc. blokų grandinės technologiją vystančių startuolių (187-ni iš 1 211 visame pasaulyje) [12]. Tuo tarpu, Lietuva siekia tapti FinTech įmonių centru – remiantis „Investuok Lietuva“ ataskaita apie FinTech įmones Lietuvoje 2019 - 2020 metais, Lietuva užėmė ketvirtąją vietą globaliame FinTech reitinge, o Vilnius – pirmąją vietą pagal technologinių startuolių TUI pritraukimo indeksą (angl. *FDI Attraction Index*). Be to, augantis darbuotojų skaičius Lietuvos FinTech įmonėse reiškia, jog sektorius stiprėja ir bręsta. Didžioji dalis Lietuvoje veikiančių FinTech įmonių specializuojasi mokėjimų ir perlaidų srityje, kuri, kaip minėta, gali būti žymiai paveikta blokų grandinės technologijos siūlomų sprendimų [13]. Dėl to svarbu išanalizuoti Lietuvoje veikiančių FinTech įmonių kėtinimą pritaikyti blokų grandinės technologiją savo veikloje bei tiekiamiems produktams ir teikiams paslaugoms bei kokie veiksniai reikšmingai lemia galimybes pritaikyti technologiją.

Pagrindinės sritys, kurias turi įvertinti kiekviena blokų grandinės technologiją planuojanti diegti organizacija yra susijusios su technologiniais, organizaciniais ir konkurenciniais (aplinkos) veiksniais, šių veiksnių įtakai išmatuoti naudojamas TOE inovacijų tyrimo modelis. Technologinių veiksnių grupei priskiriami diegiamos technologijos kompleksiško ir jos suteikiamo santykinio pranašumo kintamieji, organizaciniais veiksniais – vadovybės palaikymo ir organizacijos išlaidų kintamieji, aplinkos veiksniais – rinkos dinamikos, konkurencinio spaudimo ir valstybės skatinimo kintamieji. [16-18]

Apklausus 55-ias Lietuvoje veikiančias FinTech įmones (elektroninių pinigų įstaigas, mokėjimo įstaigas, sutelktinio finansavimo platformos operatoriai, tarpusavio skolinimosi platformos operatoriais ir elektroninių pinigų įstaigos tarpininkai) paaiškėjo, kad 64 proc. organizacijų domisi blokų grandinės technologiją ir jos principais, 9 proc. testuoja technologiją, dar 9 proc. diegia technologijas sprendimus veikloje ir teikiams paslaugoms, 18 proc. organizacijų visiškai nesidomi blokų grandinės technologija. Kiekvienos apklaustos organizacijos atstovas vertino technologiniams, organizaciniais ir aplinkos konstruktais kintamiesiems priskirtus teiginius ir nuomone apie organizacijos kėtinimą diegti blokų grandinės technologiją Likerto 5-ų balų skalėje. Remiantis respondentų atsakymais suformuoti aštuoni tyrimo modelį atitinkantys faktoriai vertinantys jau minėtus skirtingus taikomo modelio veiksnus. Pasitelkiant daugianarės tiesinės regresijos modelį nustatyta, kad statistiškai reikšmingą teigiamą įtaką organizacijos galimybei įdiegti blokų grandinės technologiją turi

organizacinių veiksnių grupei priskiriamas vadovybės palaikymo veiksnys ( $\beta=0,41$ ,  $p<0,05$ ), organizacijos išorinės aplinkos veiksnių grupei priskiriamas konkurencinis spaudimas ( $\beta=0,32$ ,  $p<0,05$ ) ir technologinių veiksnių grupei priskiriamas santykinis pranašumas ( $\beta=0,28$ ,  $p<0,05$ ). Visi šie trys kintamieji paaiškina 52 proc. ketinimo įsidiesti blokų grandinės technologiją kintamojo sklaidos apie vidurkj. Taigi, galima teigti, jog diegiant šią inovatyvią technologiją daugiausiai įtakos turi organizacijos vadovų iniciatyva įdiegti inovaciją, skirti darbo jėgos ir finansinių išteklių blokų grandinės technologijai bei palaikymas ir delegavimas vykdant naujus projektus. Kadangi 44 proc. respondentų tiki, jog kitos finansų sektoriaus įmonės jau testuoja arba diegia blokų grandinės technologiją grįstus sprendimus, konkurencinis spaudimas papildomai veikia organizacijos poreikį diegti blokų grandinės technologiją. Organizacijų įsitikinimas, jog blokų grandinės technologija leistų augti finansų sektoriaus efektyvumui taip pat yra vienas iš didžiausių įtaką darančių veiksnių, kuris užtikrintų sektoriaus organizacijų įgaunama santykinį pranašumą.

---

## Literatūra

- [1] Nakamoto, S. (2008). *Bitcoin: A peer-to-peer electronic cash system*.
- [2] Pilkington, M. Blockchain technology: principles and applications. *Research handbook on digital transformations*, 2016, p. 225 – 253.
- [3] Zheng, Z., Xie, S., Dai, H. N., Chen, X. ir Wang, H. Blockchain challenges and opportunities: A survey. *International Journal of Web and Grid Services*, 2019, 14(4), p. 352-375.
- [4] Joshi, A. P., Han, M. ir Wang, Y. A survey on security and privacy issues of blockchain technology. *Mathematical Foundations of Computing*, 2018, 1(2), p. 121-147.
- [5] Chang, S. E., Chen, Y. C., ir Wu, T. C. Exploring blockchain technology in international trade. *Industrial Management & Data Systems*, 2019, Vol. 119 (8), p 1712 – 1733.
- [6] Hua, X., Huang, Y. ir Zheng, Y. Current practices, new insights, and emerging trends of financial technologies. *Industrial Management & Data Systems*, 2019, Vol. 119 (7), p. 1401-1410.
- [7] Gomber, P., Kauffman, R. J., Parker, C. ir Weber, B. W. On the fintech revolution: Interpreting the forces of innovation, disruption, and transformation in financial services. *Journal of Management Information Systems*, 2018, 35(1), p. 220-265.
- [8] Clohessy, T., Acton, T. Investigating the influence of organizational factors on blockchain adoption. *Industrial Management & Data Systems*, 2019, Vol. 119 (7), p. 1457-1491.
- [9] Yoo, S. Blockchain based financial case analysis and its implications. *Asia Pacific Journal of Innovation and Entrepreneurship*, 2017, 11(3), p. 312-321.
- [10] Casey, M., Crane, J., Gensler, G., Johnson, S., ir Narula, N. The impact of blockchain technology on finance: a catalyst for change. *ICMB, International Center for Monetary and Banking Studies*, 2018, p. 9 – 19.
- [11] Holotiu, F., Pisani, F. ir Moormann, J. Radicalness of blockchain: an assessment based on its impact on the payments industry. *Technology Analysis & Strategic Management*, 2018, Vol. 31(8), p. 915-928.
- [12] Publications Office of the EU: *Study on Blockchain. Legal, governance and interoperability aspect (SMART 2018/0038)*, 2020.
- [13] Invest Lithuania. (2020). *FinTech Report 2019 – 2020*.
- [14] Wang, Y., Han, J. H. ir Beynon-Davies, P. Understanding blockchain technology for future supply chains: A systematic literature review and research agenda. *Supply Chain Management: An International Journal*, 2019, 24(1), p. 62-84.
- [15] Hughes, A., Park, A., Kietzmann, J., ir Archer-Brown, C. Beyond Bitcoin: What blockchain and distributed ledger technologies mean for firms. *Business Horizons*, 2018, 62(3), p. 273-281.
- [16] Clohessy, T., Acton, T. ir Rogers, N. Blockchain adoption: Technological, organisational and environmental considerations. *Business Transformation through Blockchain*, 2019, p. 47-76.
- [17] Janssen, M., Weerakkody, V., Ismagilova, E., Sivarajah, U. ir Irani, Z. A framework for analysing blockchain technology adoption: Integrating institutional, market and technical factors. *International Journal of Information Management*, 2020, 50, p. 302-309.
- [18] Wong, L. W., Leong, L. Y., Hew, J. J., Tan, G. W. H., ir Ooi, K. B. Time to seize the digital evolution: Adoption of blockchain in operations and supply chain management among Malaysian SMEs. *International Journal of Information Management*, 2019, Vol. 52, 101997.

**A. Sabaliauskaitė,  
Ž. Stankevičiūtė**

*Kauno technologijos universitetas,  
Ekonomikos ir verslo fakultetas*

## **SKAITMENINIŲ TRANSFORMACIJŲ POVEIKIS ORGANIZACIJŲ ŽMONIŲ IŠTEKLIŲ VALDYMUI**

Skaitmeninė transformacija daro poveikį visiems ekonomikos sektoriams ir keičia mūsų gyvenimo, darbo ir bendravimo būdus. Praeityje Europos gerovę lėmė transporto infrastruktūra, pramonė, aukštos kokybės paslaugos. Tuo tarpu ateities gerovę užtikrins investicijos į skaitmeninę infrastruktūrą ir jos modernizavimą [1]. Šiandieninės organizacijos yra įpareigos prisitaikyti prie didelių pokyčių, sąlygotų staigaus technologijų progreso [2]. Pokyčiai susiję ne tik su technologiniais procesų aspektais, tokiais kaip linijų automatizavimas ar pažangesni įrenginiai, bet kartu ir daro poveikį vadybai. Atsižvelgiant į dabartines pasaulines tendencijas, žmonių kapitalas yra svarbiausias aukštųjų technologijų įmonių ir įmonių, užsiimančių skaitmenine pertvarka, išteklius [3]. Todėl yra svarbu užtikrinti, kad ir žmonių išteklių vadyba atitiktų rinkos situaciją bei tendencijas, juolab kad technologijos keičia ir pačią žmonių išteklių vadybos funkciją.

Siekiant išsiaiškinti skaitmeninės transformacijos poveikį organizacijų žmonių išteklių valdymui nuspręsta atlikti pusiau struktūruotus interviu, kurių metu būtų bendraujama su žmonių išteklių valdymo specialistais. Interviuojamiesiems pateikta 16 klausimų, pirmieji 3 – demografiniai klausimai apie pareigas, išsilavinimą, kiti 13 – tyrimo klausimai susiję su skaitmenine transformacija ir personalo valdymu. Klausimai formuoti atsižvelgiant į literatūros analizės metu išsiskirtas poveikio sritis žmonių išteklių vadybai. Keletas klausimų pavyzdžių: Papasakokite kokius informacinių technologijų įrankius ir kaip naudojate žmonių išteklių valdyme? Kokius procesus reikėjo pakeisti/koreguoti dėl informacinių technologijų įtakos? Kaip informacinės technologijos veikia darbuotojų įsitraukimą į organizacijos veiklą?

Interviuojamieji – skirtingas patirtis turintys žmonių išteklių valdymo atstovai, 9 moterys ir 1 vyras, amžius svyruoja nuo 24 iki 55 metų. Organizacijų veiklos sektorius: 2 švietimo įstaigos (didelės organizacijos), 4 gamybinės įmonės (2 didelės, 2 vidutinės), 4 paslaugas teikiančios įmonės (2 didelės, 1 vidutinė ir 1 maža).

Atsižvelgiant į interviu klausimus, vykdoma duomenų analizė, išskiriant kategorijas ir subkategorijas. Pirmiausia išskirti įrankiai naudojami žmonių išteklių valdyme ir jų naudojimo tikslas. Interviuojamųjų išvardyti įrankiai suskirstyti į penkias kategorijas: komunikacijos platformos, informacijos kaupimas, valdymo užtikrinimo priemonės, tobulėjimas ir kita. Dalis naudojamų priemonių nustebino, kaip pavyzdžiui, socialinių tinklų naudojimas oficialiai komunikacijai (komunikacijos elementams), įdomesnis sprendimas pasirodė ir interaktyvios skelbimų lentos. Teigiamą įspūdį paliko

tai, kad organizacijos pradeda naudoti apklausų sistemas savo veiklos tobulinimui ir šis įrankis tampa neatskiriama veiklos dalimi.

Tyrimo rezultatai leidžia teigti, kad dėl informacinių technologijų integracijos pasikeitė ir žmonių išteklių valdymo skyriaus vaidmuo organizacijoje. Ryškūs pasikeitimai pastebėti šiose srityse: darbo organizavimas, teikiamos paslaugos darbuotojams bei žmonių išteklių valdymo specialistų įgūdžiai. Interviuojamieji paminėjo, kad atsirado daugiau planavimo, struktūrizavimo „atsirado darbų planavimas“. Taip pat tenka praleisti daugiau laiko prie sistemų, programų, bet galutinis rezultatas yra labiau atliepiantis poreikius, galima greičiau gauti reikiamą informaciją. Išryškėjo kintančios žmonių išteklių valdymo skyriaus funkcijos ir teikiamos paslaugos darbuotojams, kai atsakomybė tenka ne tik už įdarbinimą, išdarbinimą, bet ir už mokymus, konsultavimą bei veiklų koordinavimą. Žmonių išteklių valdymo specialistams taikomi reikalavimai irgi nuolat kinta. Kaip pavyzdys, dėl skaitmeninės transformacijos įtakos specialistai turi gebėti naudotis įvairiais informacinių technologijų įrankiais, būti imlūs naujai informacijai, gebėti analizuoti ir optimizuoti taikomus sprendimus „stengiamės na kažkaip optimizuoti, išnaudoti visokius įrankius“.

Tyrimo metu domėtasi, kaip technologijos keičia žmonių išteklių valdymo skyriaus komunikaciją su darbuotojais. Didelių pasikeitimų nepastebėta, bet pavyko išskirti šias kategorijas: komunikacijos įrankiai, tikslai, komunikacijos būdo pasirinkimo dažnumas bei poveikis komunikacijai. Pagrindiniai komunikacijos įrankiai yra elektroninis paštas, telefonas, pačios sistemos, komunikacijos platformos bei socialiniai tinklai. Kalbant apie tikslus, dabar daugiau komunikuojama konsultavimo tikslais. Įsidiėgus informacinių technologijų įrankius virtualios komunikacijos padaugėjo, tačiau gyvas bendravimas skatinamas. Žmonių išteklių valdymo specialistai, vadovai paminėjo, kad įsidiėgus daugiau įrankių, komunikacija tapo efektyvesnė ir aktyvesnė. Nustebino tai, kad pasireiškia ir nestabilumas, nes tyrimo metu išryškėjo, jog sumažėjo darbuotojų dalyvavimas papildomose veiklose, jei apie tai pranešama tik el. laiškais.

Analizuojant kokie pokyčiai vyko organizacijų struktūrose dėl skaitmeninės transformacijos išryškėjo dvi aiškios sritys: naujos pareigybės bei papildomos funkcijos. Galima pastebėti, kad visos naujai atsiradusios funkcijos, bent jau paminėtosios interviu, yra susijusios su informacinėmis technologijomis tai analitika, programavimas bei sistemų palaikymas. Kaip papildomos funkcijos dažniausiai pasireiškiančios yra šios: informacijos suvedimas, apdorojimas, dokumentų formos atnaujinimas.

Interviu metu žmonių išteklių valdymo atstovų buvo klausta ar dėl informacinių technologijų buvo atliktos kokių nors procesų korekcijos. Analizuojant atsakymus išryškėjo, jog pokitimų įvyko šiuose procesuose: atrankos, adaptacijos, motyvavimo, dokumentų valdymo, tvarkų rengimo ir kituose procesuose. Įmonės diegiasi kandidatavimo sistemas bei atrankų koordinavimo sistemas, o dėl skaitmeninės transformacijos pradėta naudotis ir kitais, įvairesniais ir labiau pažangiais, atrankų kanalais. Pereinant prie adaptacijos, interaktyvūs tyrimai, mokymai bei testavimas padeda žmonių išteklių valdymo skyriams užtikrinti, kad naujokams bus užtikrintas sklandus įsiliejimas į organizaciją. Motyvavimo procesas irgi turi naujų elementų, pusmetinių pokalbių eiga ir turinys buvo koreguoti, o tai dabar leidžia palyginti skirtingų laikotarpių rezultatus.

Tyrimu siekta išsiaiškinti ir kokią vertę informacinės technologijos teikia žmonių išteklių valdymui. Iš interviu su srities profesionalais išskirtos šios kategorijos: ekonominis poveikis, naujos galimybės, darbuotojų gerovė bei organizacijos veiklos atsekamumo užtikrinimas. Iš ekonominio poveikio pusės informacinės technologijos padeda pasiekti platesnę auditoriją, didina veiklos efektyvumą bei produktyvumą. Kartu atveriamos ir naujos galimybės duomenų analizei, yra galimybė surinkti



daugiau duomenų ir greičiau bei tiksliau juos apdoroti. Duomenys naudojami idėjų pagrindimui (vadovų įtikinimui) „visada vadovam reikia „parduoti“ idėjas <...> personalas daugiau turi emocinių dalykų <...> mum IT padeda emocijas paversti skaičiais“ bei tikslingesnei komunikacijai.

Apibendrinant galima teigti, kad organizacijų žmonių išteklių valdymo skyrių atstovai mato skaitmeninės transformacijos poveikį žmonių išteklių valdymo pokyčiams, patį pokyčių procesą vertina teigiamai ir įžvelgia tame naudą. Kaip didžiausią privalumą įvardina rutininių darbų kiekio sumažėjimą bei palengvintą dokumentų valdymo procesą. Įžvelgiamos ir naujos duomenų analizės galimybės, kurios leidžia pagrįsti siūlymus, priimti sprendimus.

---

### Literatūra

- [1] Europos komisija, “EUROPOS PARLAMENTO IR TARYBOS REGLAMENTAS dėl 2021–2027 m. Skaitmeninės Europos programos sudarymo,” Briuselis, 1-3, 2018.
- [2] Colbert, A., Yee, N., & George, G., “The digital workforce and the workplace of the Future.,” *Academy of Management Journal*, vol. 59, 731-739, 2016.
- [3] Tatiana Kharlamova A. K., “Human capital development in the digitalization risk management process,” in *Atlantis Highlights in Computer Sciences*, vol. 1, 199-203, 2019.

G. Tūskaitė,  
L. Dagilienė

*Kauno technologijos  
universitetas (studento studijų  
institucija ir vadovo – tyrimų  
atlikimo – institucija)*

## APLINKOSAUGOS, SOCIALINĖS IR VALDYMO INFORMACIJOS ATSKLEIDIMO ĮTAKA FINANSINIAMS REZULTATAMS

Įmonių socialinė atsakomybė (toliau – JSA) yra apibūdinama kaip nuolatinis verslo įsipareigojimas elgtis etiškai ir prisidėti prie ekonomės plėtros tobulinant darbo jėgos, o taip pat ir visuomenės gyvenimo kokybę. [1] Aplinkosauginės, socialinės bei valdymo atskaitomybės modelis angliškai yra vadinamas ESG (angl. *environmental, social, governance*) yra JSA raiškos atskleidimo modelis ir apima įmonės rodiklius trijoje srityse: aplinkosaugos, socialinėje bei valdymo. [2]

Įmonių socialinė atsakomybė (JSA), klimato pokyčiai, skaitmeninių technologijų plėtra paskatino nefinansinės informacijos atskleidimą įvairioms suinteresuotosioms šalims, ypač investuotojams. JSA konceptualizavimui šiame tyrime pasirenkamas aplinkosaugos, socialinės bei valdymo atskaitomybės (informacijos atskleidimo) modelis, vadinamas ESG.

Vienos labiausiai žinomų pasaulyje organizacijų, kuriančių informacijos atskleidimo metodikas, yra GRI (Global Reporting Initiative) ir SASB (Sustainability Accounting Standards Board). GRI standartai yra skirti suteikti informaciją įvairioms suinteresuotosioms šalims, todėl apima labai platų temų spektrą. SASB taiko ESG atskleidimo principą ir teikia informaciją investuotojams bei sutelkia dėmesį į finansiškai reikšmingus tvarumo klausimus. ESG informacija yra ypatingai svarbi investuotojams, nes padeda priimti investavimo sprendimus, atsižvelgiant į JSA veiklas. Aktualu pabrėžti, jog JSA yra akcentuojama ne tik kaip siekis užtikrinti suinteresuotųjų poreikius, tačiau JSA teikia naudos ir pačiai organizacijai, prisidedama prie didesnio pelno generavimo [3,4]. Mokslinėje literatūroje [5,3] pabrėžiama teigiamas JSA strategijos įgyvendinimo poveikis įmonės finansiniams rezultatams. Tačiau yra tyrimų [6,7], kurie nenustatė reikšmingo ryšio tarp ESG informacijos atskleidimo ir finansinių rezultatų. Dėl šios priežasties kyla problemiškas klausimas – kokios sąsajos vyrauja tarp įmonių aplinkosauginės, socialinės, valdymo informacijos atskleidimo bei finansinių rezultatų?

Todėl šio **tyrimo tikslas** – ištirti verslo įmonių viešai atskleidžiamos ESG informacijos sąsajas su finansiniais rezultatais.

Aplinkosaugos srities rezultatai atspindi, kaip veiksmingai įmonė sprendžia aplinkosaugos klausimus palikdama geresnę aplinką ateities kartoms. Socialinės srities rezultatai atspindi, kaip ir koku mastu įmonė vykdo savo socialinę veiklą ir suderina ją su visuomenės interesais. [8] Trečioji ESG atskleidimo informacija yra valdymo informacija, susijusi su įmonės vidine veikla ir leidžiančia investuotojams bei kitoms suinteresuotoms šalims daryti išvadas apie tai, kokia įmonės valdymo politika, kiek yra vadovų, koks jų pasiskirstymas lyčių atžvilgiu, kokia yra balsavimo teisių lygybė, vykdomosios valdžios susirinkimų dažnumas ir kt.

Teigiami pasiekimai ir atskleisti rezultatai ESG srityje generuoja visuomenės palankumą ir atitinkamai nulemia aukštesnę įmonės vertę [9]. Įgyvendinant JSA ir saugant darbuotojų socialinę gerovę, galima pagerinti produktyvumą, sustiprinti įmonės įvaizdį bei padidinti visuomenės pasitikėjimą. Tai galiausiai sumažina veiklos sąnaudas ir pagerina finansinius rezultatus [10].

Platus ESG informacijos atskleidimas gali padidinti įmonės akcijų kainą ir rinkos vertę [11], ko pasekoje auga reputacija ir didėja klientų lojalumas prekės ženklui. Klientai, jų ryšys su įmone yra akivaizdūs, kadangi pirkėjų sprendimai daro tiesioginį poveikį įmonių finansiniams rezultatams [12]. Sukuriamas konkurencinis pranašumas, kuris gali pasireikšti didesniais pardavimais ir mažesnėmis operacijų ir monitoringo išlaidomis. Vadinasi, toks informacijos atskleidimas gali sumažinti įmonės sąnaudas ir duoti realios ekonominės naudos, kuri padidintų įmonės pinigų srautus [13]. ROA glaudžiai ir reikšmingai koreliuoja su JSA rezultatais. [14], tarp JSA bei ROE rodiklio egzistuoja teigiamas ryšys [15]. Tačiau randamas ir neigiamas ryšys tarp ESG veiklos ir įmonės finansinių rezultatų [16], neigiamas JSA poveikis ROA [17], JSA neigiamai asocijuojasi su ROE [18].

Tyrimo rezultatai buvo gauti taikant turinio analizę ir vertinimą pagal balų sistemą, koreliacinę ir regresinę analizes suformuluotoms hipotezėms verifikuoti.

Tyrimo imtis – Top 2000 didžiausios įmonės pasaulyje pagal Forbes sąrašą (*Forbes. The World's Largest Public Companies*). Tyrimui buvo pasirinkti keturi ekonomikos sektoriai: gėrimų, maisto gamybos, elektronikos bei automobilių ir sunkvežimių gamybos. Tyrimo laikotarpis 2018 m.

Finansiniai rodikliai buvo ieškomi *Bloomberg* terminalo duomenų bazėje: pajamos, pelnas, EBITDA, ROA, ROE ir ROS. Investicijos bei nefinansiniai ESG rodikliai buvo atrenkami iš pasirinktų įmonių JSA bei metinių ir finansinių ataskaitų.

Dažniausiai pasitaikantis žodis įmonių ataskaitose buvo *environment/environmental*. Šis žodis iš viso buvo pakartotas net 14461 kartą per visų įmonių ataskaitas. Be to, dažnai buvo vartojamas žodis *sustainability/sustainable* – net 8529 kartus, o *CSR/social responsibility* – 2988 kartus. Akivaizdu, jog šie visi žodžiai yra susiję su aplinkosauga, todėl galima teigti, jog įmonės labiausiai linkę atskleisti būtent informaciją apie aplinkosaugos veiklas. Rečiausiai vartoti žodžiai iš kiekvienos srities buvo *eco-friendly* (229 kartai – aplinkosaugos informacija), *child labor* (252 kartai – socialinė informacija) bei *transparency* (291 kartas – valdymo informacija). Populiariausia JSA ataskaitose teikiama informacija yra iš aplinkosaugos srities (40 proc. visų balų), tuo tarpu socialinė (31 proc.) ir valdymo (29 proc.) informacija atskleidžiama labai panašiai.

Tiriant JSA veiklas, atskleistas per ESG modelį, ir finansinių rezultatų ryšį, akivaizdu, jog atskleidžiant vis daugiau aplinkosauginės informacijos, įmonės pajamos, bendrasis pelnas ir EBITDA didės. Socialinė informacija koreliuoja su pajamomis, valdymo srityje nėra nei vienos koreliacijos su finansiniais rodikliais, todėl siekis labiau atskleisti valdymo informaciją neprisidės prie nei vieno finansinio rodiklio didinimo.

Investuojant didės tik pajamos, o kiti finansiniai rodikliai nebus paveikti investicijų rodiklio.

Tiriant, ar įmonės, kurių finansiniai rezultatai geresni, linkę atskleisti daugiau ESG veiklos rodiklių, paaiškėjo, jog egzistuoja koreliacijos ryšiai tarp aplinkosaugos srities ir pajamų bei EBITDA, taip pat tarp valdymo srities ir pajamų.

Regresinė analizė atskleidė, jog pajamas nuspėja investicijos į JSA veiklas bei ESG rodikliai. Didžiausią įtaką pajamų augimui daro investicijos į JSA veiklą, o kiek mažesnė įtaką pajamoms daro ESG rodikliai.

Taigi aplinkosaugos rodiklių didesnis atskleidimas generuos įmonėms didesnes pajamas ir geresnius EBITDA finansinius rodiklius, o atskleidžiant daugiau valdymo srities rodiklių (pavyzdžiui, kiek moterų užima vadovaujančias pareigas, vadovų

atlyginimų dydžiai, vyrų ir moterų pasiskirstymas tarp valdybos narių ir kt.), bus jaučiamas pajamų išaugimas. Visgi socialinės informacijos atskleidimo išaugimas neprišidės prie nei vieno finansinio rodiklio didinimo. Tuo tarpu regresinė analizė atskleidė tai, kad pajamos priklauso nuo investicijų į JSA veiklą ir nuo ESG rodiklių.

---

## Literatūra

- [1] Wang, Z., Hsieh, T. S., and Sarkis, J. "CSR performance and the readability of CSR reports: too good to be true?", *Corporate Social Responsibility and Environmental Management*, (2018), Vol. 25 No. 1, pp. 66-79
- [2] De Grosbois, D. "Corporate social responsibility reporting by the global hotel industry: Commitment, initiatives and performance", *International Journal of Hospitality Management*, (2012), Vol. 31 No. 3, pp. 896-905.
- [3] Wang, Q., Dou, J., and Jia, S. (2016)", A meta-analytic review of corporate social responsibility and corporate financial performance: The moderating effect of contextual factors", *Business & Society*, Vol. 55 No. 8, pp. 1083-1121.
- [4] Reverte, C., Gómez-Melero, E., and Cegarra-Navarro, J. G. (2016), "The influence of corporate social responsibility practices on organizational performance: evidence from Eco-Responsible Spanish firms", *Journal of Cleaner Production*, Vol. 112, pp. 2870-2884.
- [5] Brooks, C. and Oikonomou, I. (2018), "The effects of environmental, social and governance disclosures and performance on firm value: A review of the literature in accounting and finance", *The British Accounting Review*, Vol. 50 No. 1, pp. 1-15.
- [6] Rhou, Y., Singal, M., and Koh, Y. (2016), "CSR and financial performance: The role of CSR awareness in the restaurant industry", *International Journal of Hospitality Management*, Vol. 57, pp. 30-39.
- [7] Gilley, K. M., Worrell, D. L., Davidson III, W. N., and El-Jelly, A. (2000), "Corporate environmental initiatives and anticipated firm performance: the differential effects of process-driven versus product-driven greening initiatives", *Journal of management*, Vol. 26 No. 6, pp. 1199-1216.
- [8] Rezaee, Z. "Corporate sustainability: Theoretical and integrated strategic imperative and pragmatic approach", *The Journal of Business Inquiry*, (2017), Vol. 16 No. 1, pp. 60-87
- [9] Fatemi, A., Glaum, M. and Kaiser, S. "ESG performance and firm value: The moderating role of disclosure", *Global Finance Journal*, (2018), Vol. 38, pp. 45-64.
- [5-9] Jamali, D., and R. Mirshak. "Corporate Social Responsibility (CSR): Theory and Practice in a Developing Country Context.", *Journal of Business Ethics*, 2007, Vol. 72 No. 3, pp. 243–262.
- [6-10] Parget, I. R., & Eilbirt, H. The practice of business social responsibility: The underlying factors. *Business horizons*, (1975), Vol. 18 No. 4, pp. 5-10.
- [7-11] Giuliano, R., Mahy, B., Rycx, F., & Vermeulen, G. "Does corporate social responsibility make over-educated workers more productive?", *Applied economics*, (2017), Vol. 49 No. 6, pp. 587-605.
- [8-12] García-Madariaga, J., and Rodríguez-Rivera, F. "Corporate social responsibility, customer satisfaction, corporate reputation, and firms' market value: Evidence from the automobile industry", *Spanish Journal of Marketing-ESIC*, (2017), Vol. 21 No. S1, pp. 39-53.
- [9-13] Barnett, M. L. and Salomon, R. M. "Beyond dichotomy: The curvilinear relationship between social responsibility and financial performance", *Strategic management journal*, (2006), Vol. 27 No. 11, pp. 1101-1122.
- [10-14] Wang, Z., and Sarkis, J. "Corporate social responsibility governance, outcomes, and financial performance", *Journal of Cleaner Production*, (2017), Vol. 162, pp. 1607-1616.
- [11-15] Galbreath, J. Does primary stakeholder management positively affect the bottom line?. *Management decision*. (2006).
- [12-16] Brammer, S., Brooks, C. and Pavelin, S. "Corporate social performance and stock returns: UK evidence from disaggregate measures", *Financial management*, (2006), Vol. 35 No. 3, pp. 97-116.
- [13-17] Dooley, R. S., and Lerner, L. D. "Pollution, profits, and stakeholders: The constraining effect of economic performance on CEO concern with stakeholder expectations", *Journal of Business Ethics*, (1994), Vol. 13 No. 9, pp. 701-711.
- [14-18] Greening, D. W., and Turban, D. B. "Corporate Social Performance and Organizational Attractiveness to Prospective Employees", In *Proceedings of the International Association for Business and Society*, (1996, July), Vol. 7, pp. 489-500.

V. Vaseris,  
B. Švagždienė

*Lietuvos sporto universitetas*

## VIEŠŪJŲ ERDVIŲ PRITAIKYMAS VIETOS BENDRUOMENĖS SVEIKATINGUMO POREIKIAMS

**Ištirtumo laipsnis.** Miestai vis labiau plečiasi, vis mažiau atrandama vietos viešoms, atviroms erdvėms, miestas planuojamas atsižvelgiant į urbanistinius elementus, erdvėms neskiriant pakankamai dėmesio ir kūrybinio potencialo[1]. Anot R. Prapiestienės (2003) [2], „sparčiai augant miesto gyventojų skaičiui visame pasaulyje, klesti architektūra. Prasidėjus intensyviai statybų periodui natūraliai aplinkai ir žalesiems miestų plotams dažnai paliekami tik statyboms netinkami plotai, o rekreaciniai žalieji plotai – dažnai tampa naujų statybinių objektų zona. Miestų želdinių ir želdynų raida miesto sistemoje tapo gana sudėtinga“[3]. Pastaruoju metu žmonėms vis labiau rūpi, kokioje aplinkoje jie gyvena ar ilsisi, ir nebesvarstoma, ar rūpintis savo sveikata yra reikalinga ir naudinga. Pripažįstame, kad sveikai gyventi – neišvengiama būtinybė. Juk norime būti ne tik patrauklūs, jaunatviški, energingi, bet ir jaustis darniai su savimi, artimaisiais ir visa aplinka. M. Burinskienė (2003)[4] pažymi, kad pastaruoju metu įvairiuose miestuose siekiama suformuoti tinkamas sąlygas skirtingiems žmonių poreikiams tenkinti, tad pagrindinis dėmesys kreipiamas ne tik į miesto fizinės infrastruktūros plėtrą, bet ir į kitus dalykus, siekiant sukurti darnią socialinių, ekonominių ir ekologinių aspektų pusiausvyrą[5].

**Sprendimo naujumo argumentacija ir svarbiausi mokslo darbai.** Mokslininkai I. Urbonaitė [6, 7], A. A. Donnelly'is, T. E. MacIntyre'as [8], V. Ratten [9] ir kiti akcentuoja, kad šiandien vis labiau didėja poreikis analizuoti žmonių sveikatai paveikias bendro fizinio aktyvumo, fizinės veiklos natūralioje aplinkoje rekreacijos raiškos formas ir galimybes, kuriuos pasitelkus vyksta nuolatiniai žmogaus kūrybiniai ir fizinės bei dvasinės reprodukcijos procesai. Autoriai vieningai pažymi, kad rekreacinė veikla, rekreacinės funkcijos yra stiprūs tiek fizinės, tiek socialinės erdvės elementai: juos pasitelkiant perteikiamas kultūrinis miesto turinys, vertybės, pasaulėžiūra. Taigi nesunku daryti prielaidą, kad tiek dabar, tiek netolimoje ateityje šios erdvės formavimo ir tvarumo bei aplinkosaugos (ekologiškumo) klausimai vardan bendruomenės gerovės išliks tiek pat svarbūs ar taps dar aktualesni, nes miestų plėtra ir raida vyksta labai intensyviai ne tik Lietuvoje [10, 11].

**Tyrimo metodų procedūros ir tyrimo eiga.** Tyrimas vyko trimis etapais:

1 etapas – mokslinės ir teorinės literatūros apie viešosios erdvės sampratą studijavimas, tikslo, uždavinių, probleminių klausimų formulavimas ir teorinės dalies rašymas, klausimyno (klausimų bloko) sudarymas.

2 etapas – vykdoma informantų paieška, atranka. Pristatomas tyrimo tikslas,

uždaviniai ir, gavus žodinių informantų sutikimą dėl dalyvavimo tyrime, derinamas laikas ir susitikimo vieta tyrimui atlikti.

3 etapas – tyrimo rezultatų analizavimas, apibendrinimas, darbo tobulinimas, užbaigimas. Pasak A. Valackienės [12], visi šie etapai moksliniame tyrime glaudžiai tarpusavyje susiję ir izoliuoti juos vieną nuo kito negalima. Tyrimo tikslui pasiekti atliktas kokybinis tyrimas – interviu. Gauti duomenys apdoroti naudojant turinio analizės (angl. Content) metodą.

### **Tyrimo rezultatai ir aptarimas.**

#### **Viešosios erdvės suvokimas ir pritaikomumas bendruomenės poreikiams.**

Analizuojant Viešosios erdvės sampratą – viešosios erdvės daugialypiškumas gautus duomenys, iš informantų atsakymų galima matyti, kad viešojoje erdvėje – tai vieta, leidžianti gyventojams jaustis komfortiškai savo gyvenamojoje vietoje: „kur galime išgerti kavos, pasivaikščioti su draugais arba vaikais, kur galime nusivežti svečius ir pan., kad „ nėra gėda gyventi čia “(M3), galime „ mėgautis praleistu laiku su kitais žmonėmis...“(M1). „Viešojoje erdvėje yra vieta, kurioje kiekvienas, nepaisant skirtumų, socialinio sluoksnio ar rasės, gali mėgautis praleistu laiku, tam tikroje erdvėje su kitais žmonėmis“(M1), bei „ yra atviros ir prieinamos visiems“(V4), erdvė „ kurioje žmonės išreiškia savo nuomonę, poziciją tam tikrais klausimais“(M3). Analizuojant tyrimo duomenis matyti, kad informantai viešąją erdvę suvokia ne tik kaip vietą, leidžiančią gyventojams jaustis komfortiškai savo gyvenamojoje vietoje, bet ir išskiria jos fizinius prieinamumo, pasiekiamumo aspektus: „Viešojoje erdvėje, mano manymu, yra visiems žmonėms pritaikyta vieta, kurią galima pasiekti įvairiais būdais (mašinos, dviračiai, pėstute, vežimėliai...“(M2), „Vieša erdvė turėtų būti pasiekama kiekvienam žmogui“(M3), „Vietos, kurios yra atviros ir prieinamos visiems“(M4). Juk tinkamai sutvarkyta susisiekimo infrastruktūra padeda socializuotis, įsitraukti į socialinį, kultūrinį gyvenimą, realizuoti save, savo pomėgius, suteikia galimybę „ pasikultūrinti“, „prasiblaškyti“, pasportuoti, pasivaikščioti...“(M3), nueiti „ į koncertą, spektaklį, filmą“(M3), arba, priešingai, suteikia galimybę atitrūkti nuo intensyvaus gyvenimo, – teigia informantai. Analizuojant tyrimo atsakymus, išryškėjo ir kita informantų išskirta viešosios erdvės sampratą – laisvalaikis. Laisvalaikis – laisvas laikas nuo tiesioginio dalyvavimo darbe, ir veikla, kuri padeda pagrįsti savo laisvą laiką. Laisvalaikį galima traktuoti kaip savotišką rekreacijos formą, kuomet vyksta veikla (judėjimas). „Laisvalaikio praleidimas su šeima, artimaisiais“(M5) gamtoje, anot informantų, suteikia „ žvalumo, energijos, džiugios ir geros nuotaikos, didina ištvermę ir, manau, stiprina sveikatą. „ mūsų šeima labai mėgsta būti gryname ore, vaikai daug juda. Esame pamėgę Kalniečių parką, Šilainių parką, Pažaislio vienuolyno parką, Draugystės parką, Panemunės šilą“(M5). Apibendrinant galima teigti, kad viešojoje erdvėje – tai vieta, leidžianti gyventojams jaustis komfortiškai savo gyvenamojoje vietoje, kuri yra estetiška ir prieinama visiems bendruomenės nariams nepaisant skirtumų, vieta, kurioje galima mėgautis praleistu laiku su kitais žmonėmis, ilsėtis ar pramogauti, išreikšti savo nuomonę, ir kuri yra prieinama bei pasiekama visiems žmonėms.

**Bendruomenės sveikatinimo poreikių patenkinimas ir galimybės.** Informantai teigia: „manau, kad iki tam tikro lygio bendruomenės laisvalaikio paslaugų poreikis patenkinamas, tačiau sveikatinimo poreikiai galėtų būti atliepti plačiau, galbūt galėtų būti pritaikomi platesnei auditorijai (ne tik sportininkams, bet ir šeimoms ir pan.)“(V6). Informantai atkreipia dėmesį, kad „Kauno mieste yra daug gerų viešų vietų, tačiau taip pat yra tokių viešų vietų, kuriose yra skirstomas socialinis sluoksnis ar netgi ta pati rasė, manau, to neturėtų būti “(M1). Informantai pastebi, kad laisvalaikio, sveikatinimo poreikiams patenkinti: „ nuolat šioje srityje yra siekiama tobulumo. Manau visos galimybės yra suteikiamos, tereikia jomis pasinaudoti“(M2), „visada

atsiranda naujovių, ir jos padeda sukurti dar palankesnę erdvę produktyviam laiko praleidimui “(M1). Informantų nuomone, sveikatinimo, „laisvalaikio paslaugų Kaune yra pakankamai ir jų infrastruktūra yra nuolat gerinama, ypač viešų vietų, tai yra labai sveikintina. Ir tikrai akivaizdžiai matomas padidėjęs žmonių susidomėjimas, tiek treniruokliai yra labai pasiteisinęs dalykas, ir visi parkai atgyja. Daugėja naujų laisvalaikio paslaugų centrų “(M2), „ tikrai daug sporto klubų, daug atskirų ir įvairių sporto šakų, mokymo centrų, pirčių, baseinų – iš esmės leisti laiką aktyviai galimybių daug “(M3). Didėjant laisvalaikio paslaugų pasiūlai, didėja ir prieinamumo galimybės, todėl kuo „daugiau skirtingų laisvalaikio praleidimo būdų, tuo daugiau aktyvumo, tuo platesnis žmonių akiratis, o visa tai savaime mažina visus blogus dalykus žmonių kultūroje ir laisvalaikio praleidimo būduose bei gerėja žmonių sveikata“(M3). Apibendrinant galima daryti prielaidą, kad bendruomenės laisvalaikio paslaugų poreikio užtikrinimas, prieinamumas ir galimybės sveikatinimo poreikiams patenkinti yra pakankamos, tik, anot informantų, reikia noro ir pastangų jomis pasinaudoti, kiekvienas gali atrasti tai, kas jam priimtina. Šiandienos požiūris į laisvalaikio, sveikatinimo paslaugų organizavimą yra pasikeitęs, ir yra orientuotas į bendruomeniškumo bei pilietiško didinimą, visuomenės gyvenimo kokybės gerinimą. Yra siekiama sveikos, sumanios ir saugios bendruomenės prioriteto įgyvendinimo. Paslaugų gerinimui užtikrinti viešosios erdvės yra tvarkomos pagal šiuolaikinius, įtraukties ir dalyvavimo standartus. Informantų nuomone, visada yra kur tobulėti ir siekti geriausių rezultatų.

**Viešųjų erdvių infrastruktūra.** Analizuojant viešųjų erdvių, Nemuno salos infrastuktūros modernizavimą, gerinimą – laisvalaikio, sveikatinimo zonų ir organizuojamų renginių atliepiamumą bendruomenės, miesto svečių sociokultūriniais, rekreaciniais poreikiams, informantų nuomonės pasiskirstė į šiek tiek labiau neigiamas ir šiek tiek mažiau teigiamas nuomones. Informantų nuomone, viešojoje erdvėje – „Nemuno saloje organizuojami susibūrimai daugiau atliepia visuomenės socialinius ir tik mažiau sveikatinimo poreikius“(V6). Kaip teigia vienas iš informantų: „Nemana, kad visos Kauno viešosios erdvės yra pritaikytos sveikatinimo poreikiams, ypač Nemuno salos erdvė, kurioje nėra įrengti vaikščiojimui tinkami takeliai“(V6). Kita vertus, anot informantų, „Nemuno sala, mano manymu, yra labai geroje strateginėje vietoje, nes Nemuno sala yra pačiame Kauno miesto centre. Nemuno sala yra pakankamai ribojama nuo miesto šurmilio, tai viena iš geriausių vietų praleidžiant laisvalaikį miesto centre, bet šiek tiek atsiribojusi nuo automobilių, paslaugų centrų“(M2), tačiau „ ten tikrai kažko trūksta. Ką dabar galima veikti saloje? Nueiti ant pleduko pasėdėti, pasivažinėti dviračiais? Nesakau, kad tai yra blogai, bet tai galima padaryti ir paprastame parke. Vien dėl vietos ten būtų galima sukurti kažką daugiau“(M3). Nemuno sala informantams asocijuojasi su negatyvia sąveika, potyrių, nekeliančiu teigiamų emocijų, „pati nežinau, kodėl, bet aš ten dažnai nesilankau. Iš paskutinio apsilankymo prisimenu, kad dalis salos buvo sutvarkyta, dalis ne. Net nesinorėjo vaikščioti dėl didelės žolės ir pan. Gal dabar taip nebėra, labai seniai buvau. Atrodo ta vieta labai gerai, bet nepasakyčiau, kad ten labai jau daug žmonių būtų. Kalniečių paprastame parke, atrodo, būna daugiau, nors tai labiau miesto kraštas“(M3). Kiti informantai teigia, kad nepakanka suformuotų takelių: „Trūksta ištiestų takelių“(M5), trūktų daugiau bėgimo takelių“(V6), prasta jų danga, ji nėra pritaikyta, „kad galėtum važinėti paspirtuku ar riedučiais“(M5), „šiek tiek apmaudu, kad Nemuno saloje pagrindinę erdvę užima treniruokliai, trūksta poilsio zonų“(V6) ir „su maudyklomis yra šiek tiek sunkiau, galėtų būti ir daugiau pasirinkimo variantų“(M1). Aplinka veikia žmogų, o žmogus savo veikla keičia aplinką, tirdamas ją ir pritaikydamas savo reikmėms. Infrastruktūros gerinimas, atsinaujinimas bet kurioje srityje prideda klientų pasitikėjimo, nes mato funkcionuojantį (tobulinamą) variantą, tačiau viešųjų erdvių modernizavimas

ir infrastruktūrų gerinimas turi tenkinti visas žmonių grupes, t. y ir senjorus, ir jaunus žmones“ (M1). Džiugu yra tai, kad Nemuno saloje organizuojamos „šeimų sporto šventės“ (V4), ten vyksta vienas iš didžiausių renginių – „Laisvės piknikas“. Manau, šie renginiai pritraukia ir įtraukia daug šeimų, draugų ir pavienių žmonių, kas tikrai skatina pabūti gamtoje, atsitraukti nuo kasdieniškų darbų ir tenkina bendruomenės sveikatingumo poreikius“ (M3). Informantai nurodo, kad viešoji erdvė turi būti sietina su bendruomenės erdve, kuri būtų pritaikyta tiek socialiniams, tiek rekreaciniams visuomenės narių poreikiams. Svarbu, kad erdvėje būtų siekiama užtikrinti visuomenės narių saugumą, aplinkos švarą“ (V6). Tyrimo dalyvių požiūris toks, kad „mes norime gyventi mieste, kuriame būtų ką veikti, kuriame būtų kur nueiti ir dar svečius nusi-vesti. Mes nenorime eiti į viešas erdves, kurios atrodo nepatrauklios, nepatogios ir pasenusios. Manau, kad nuolat šis procesas (modernizavimas) turi vykti, nes pasaulis nestovi vietoje: žmonės tobulėja, poreikiai nuolat auga, todėl neturėtume atsilikti nuo kitų valstybių ar miestų pavyzdžių“ (M3), reikia „kuo daugiau renginių“ (M5). „Kuo daugiau naujų pramogų, tuo daugiau skirtingų laisvalaikio praleidimo būdų, tuo daugiau aktyvumo, tuo platesnis žmonių akiratis, o visa tai savaime mažina visus blogus dalykus žmonių kultūroje ir laisvalaikio praleidimo būduose bei gerėja žmonių sveikata“ (M3). Informantų nuomone, „modernesnės viešosios erdvės (kuriose galbūt netgi rastųsi įvairūs meno kūriniai, instaliacijos ar kiti traukos objektai) prisidėtų prie patrauklesnio erdvių įvaidžio kūrimo“ (V6). Ši išsakyta nuomonė atliepia I. Dirgėlienės (2018) <sup>[13]</sup> įžvalgas, kad miestas ir jo architektūra – ne tik jaukios gatvės, prekybos centrai, parduotuvės, automobilių stovėjimo aikštelės ir pramogų erdvės. Ne mažiau svarbios ir erdvės šalia pastatų. Šios viešosios zonos – parkas, skveras, gėlynas, medžių, krūmų želdiniai ar vaikų žaidimų aikštelės – kuria miesto vertę. Apibendrinant galima teigti, kad viešųjų erdvių, Nemuno salos infrastruktūros modernizavimas, gerinimas – laisvalaikio, sveikatinimo zonų ir organizuojamų renginių atliepiamumas bendruomenės, miesto svečių sociokultūriniais, rekreaciniais poreikiams, informantų nuomone, atliepia tik iš dalies. Jų teigimu, Nemuno salos infrastruktūra atliepia bendrus socialinius ir kiek mažiau sveikatinimo poreikius. Informantai pastebi, kad trūksta pasivaikščiojimo takelių, o esamų kokybė neužtikrina pasirinktos veiklos realizavimo būdų (pvz., negalima pasivažinėti riedučiais ir pan.). Kitas aspektas, į kurį verta atkreipti dėmesį – nėra tinkamai prižiūrima ir tvarkoma veja. Informantų nuomone, šioje (modernizavimo) srityje dar yra daug kur tobulėti, kad būtų atliepti bendruomenės poreikiai, juolab, informantų nuomone, Nemuno sala yra labai geroje strateginėje vietoje – pačiame Kauno miesto centre ir yra pakankamai ribojama nuo miesto šurmulio.

### **Išvados ir perspektyvos**

1. Viešųjų erdvių samprata ir pritaikymo galimybės. Viešoji erdvė yra vieta, kurioje reiškiasi bendruomenės interesai. Viešoji erdvė – tai vieta, leidžianti gyventojams jaustis komfortiškai savo gyvenamojoje vietoje ir kuri yra estetiška, jauki bei priinama visiems bendruomenės nariams, nepaisant skirtingų, vieta, kurioje galima mėgautis praleistu laiku su kitais žmonėmis, ilsėtis ar pramogauti, reikšti, išsakyti savo nuomonę, ir kuri yra pasiekama įvairiais būdais.
2. Bendruomenės sveikatingumo poreikių identifikavimas. Tyrimu išsiaiškinta, kad viešųjų erdvių prieinamumas ir kokybė vis dar išlieka nepakankami. Miesto viešosios erdvės turėtų būti orientuotos į tolygų paskirstymą ir turėti adaptyvumą, mišresnę funkciją. Tvarkant, gerinant viešąsias erdves, reikia vadovautis šiuolaikinėmis nuostatomis, o svarbiausia – lygybės principu, kad ta pačia aplinka ir jos produktais galėtų naudotis visos žmonių grupės. Informantų nuomone,



formuojant, tvarkant, naujinant miesto viešąsias erdves, būtina atkreipti dėmesį į bendruomenės poreikius, lūkesčius. Siekti, kad erdvės atitiktų šiuolaikinius bendruomenės poreikius, t. y. sudarytų galimybę pailsėti, stiprinti sveikatą, sportuoti, žaisti, tobulinti žinias (edukacija, renginiai, susibūrimai, socialinės, pilietinės akcijos) pasirenkant miesto viešųjų erdvių galimybes.

3. Viešųjų erdvių infrastruktūroje pastebimas teigiamas bruožas – Kauno miesto pagražėjimas. Miesto viešosios erdvės yra tvarkomos, naujinamos, prižiūrimos ir gražinamos. Džiugu, kad gamtos turtai – miesto parkai – yra kardinaliai pasikeitę ir įgauna naują gyvenimą. Šiandienos viešosios ir žaliosios miesto erdvės stengiasi atliepti bendruomenės laisvalaikio, poilsio ir sveikatinimo poreikius, kurie yra svarbūs sveikatos determinantai. Tyrimo objektas – Nemuno sala – Kauno miesto viešojoje erdvėje, esanti labai geroje strateginėje vietoje – pačiame miesto centre ir turinti labai didelį potencialą, tačiau, ji vis dar nėra tinkamai „išnaudota“. Tyrimo rezultatai atskleidė informantų nuomonę, kaip galėtų keistis, tobulėti Nemuno salos infrastruktūra laisvalaikio, sveikatinimo poreikių tenkinimo požiūriu. Tyrimo dalyviai siūlo įrengti daugiau mažosios architektūros elementų, sutvarkyti jau esamus pasivaikščiavimo takus bei įrengti naujų, kurie būtų pritaikyti važiuoti dviračiu, paspirtuku, riedlente, reikėtų daugiau vaikų žaidimo aikštelių, paplūdimio, geresnio apšvietimo.

---

### Literatūra

- [1] Piekienė, N. (2015). Viešosios erdvės Lietuvos saugomų teritorijų kūrimo kontekste. *Miestų želdynų formavimas*, 1 (12), 208–215.
- [2] Prapiestienė, R. (2003). Lietuvos miestų žaliųjų plotų kaita laiko atžvilgiu. *Geografijos metraštis*, 36 (2), 108–114.
- [3] Kriūkienė, S. (2019). Lietuvos miestų atskirųjų rekreacinės paskirties želdynų palyginamoji analizė. Magistro darbas. VDU Žemės ūkio akademija, Kauno r. p. 52
- [4] Burinskienė, M. (2003). Subalansuota miestų plėtra. *Monografija*. Vilnius: Technika.
- [5] Čiegis, R., Žalvičienė, A. (2012). Darnus miestų vystymasis ir Europos Sąjungos investicijų įsisavinimas. *Vadybos mokslas ir studijos – kaimo verslų ir jų infrastruktūros plėtrai*, 1, 42–51.
- [6] Urbonaitė, I. (2011). Miesto teritorinių bendruomenių įtaka rekreacinių teritorijų formavimui. *Mokslas – Lietuvos ateitis*, 3(3), 30–37.
- [7] Urbonaitė, I. (2013). Rekreacinių funkcijų raiška Vilniaus miesto erdvinėje struktūroje: daktaro disertacija. Vilnius: Vilniaus Gedimino technikos universitetas.
- [8] Donnelly, A. A., MacIntyre, T. E. (2019). *Physical Activity in Natural Settings: Green and Blue Exercise*. Routledge, p. 364.
- [9] Ratten, V. (2019). *Social Entrepreneurship in Sport: How Sport Can Deliver Social Well-being*. Routledge, p. 108.
- [10] Grunskis, T. (2013). Miesto viešųjų erdvių sistemos samprata ir formavimo modeliai. *Acta Academiae artium Vilnensis. Dailė*, 71, 127–138.
- [11] Kroeger, J. Myers, C. Y. Morgan, K. (2019). *Nurturing Nature and the Environment with Young Children: Children, Elders, Earth*. Routledge, p. 156.
- [12] Valackienė, A. (2002). Moterų stresai darbo aplinkoje: jų identifikavimas socialinių tinklų ir asmenybės saviraiškos aspektu. *Organizacijų vadyba: sisteminiai tyrimai*, 21, 223–236.
- [13] Dirgėlienė, I. (2018). Viešosios erdvės – kokia turi būti tikroji miesto kokybė? Prieiga internetu: <https://structum.lt/straipsnis/viesosios-erdves-ndash-kokia-turi-buti-tikroji-miesto-kokybe/>

**L. Leonavičiūtė,  
R. R. Trimonienė**

*Šiaulių universitetas*

## **TAUTINIAI SANTYKIAI GIEDRAIČIŲ DEKANATE XIX A. II P. –1914 M.: JONIŠKIO IR INTURKĖS PARAPIJŲ ATVEJIS**

XIX–XX a. vyko sudėtingas ir prieštaringas modernios lietuvių tautos formavimosi procesas, kurį lydėjo sociokultūriniai ir politiniai to meto visuomenės socialinių struktūrų kaitos ypatumai, nulėmę tam tikrą visuomenės susipriešinimą. Visuomenė keitėsi iš tradicinės luominės į tautinę pilietinę, o čia nemažą vaidmenį vaidino pasaulietinių bei dvasinių struktūrų ir institucijų kaita, įvairių etninių bendruomenių padėtis, interesai, mentalitetas [3, 8].

Darbo tikslas – išnagrinėti tautinių santykių ir etnolingvistinės tapatybės kaitą Vilniaus vyskupijos Giedraičių dekanato Jonišchio ir Inturkės parapijose. Tikslui pasiekti iškelti šie uždaviniai: apžvelgti nacionalizmo ir nacionalinių sąjūdžių pagrindines teorijas; nustatyti tautinės katalikų sudėties kaitą Jonišchio ir Inturkės parapijose 1864–1914 m.; ištirti Jonišchio ir Inturkės parapijų dvasininkijos etninę priklausomybę ir jos vaidmenį nacionaliniame ir katalikiškajame sąjūdyje; išsiaiškinti lietuvių, lenkų religines-tautines aspiracijas spaudos draudimo metais ir jų įtaką tarpusavio santykiams; aptarti etnolingvistinės tapatybės apraiškas ir kaitą Jonišchio ir Inturkės parapijose 1864–1914 m.

Siekiant įgyvendinti darbo tikslą naudojamas aprašomasis metodas, kuris pateikia išsamų tiriamųjų objektų vaizdą apie tautinių konfliktų pobūdį ir mas-tą konkrečioje parapijose. Lyginamasis analoginis metodas naudojamas lyginant šaltinių informaciją, atskleidžiant lenkų ir lietuvių požiūrius į tautinius santykius. Statistinis metodas panaudotas renkant ir apibendrinant duomenis apie parapijų gyventojų skaičių ir jų tautinę sudėtį. Literatūros ir šaltinių analizės metodas padėjo analizuoti ir susisteminti mokslinę ir kraštotyrinę literatūrą bei naratyvinio pobūdžio šaltinius.

Lietuvos valstybiniame istorijos archyve ir Lietuvos mokslo akademijos Vrublevskių bibliotekoje saugomos kunigų tarnybinės anketos, gyventojų skundai ir prašymai Vilniaus vyskupijos administracijai, kiti dokumentai. Kai kurios kunigų ataskaitos ir pasiaiškinimai bei dekanų raštai leido rinkti ir papildyti duomenis apie dvasininkus ir jų veiklą, patikslinti ir palyginti turimus faktus apie tiriamosiose parapijose vykusius tautinių nesutarimų procesus. Analizuota tuometė spauda (dauguma leidinių yra epaveldas.lt) leido apžvelgti, kaip atsispindėjo etnolingvistinės tapatybės apraiškos.

Šiam tyrimui pasirinkta viena labiausiai paplitusių modernistinė nacionalizmo teorija. Jos tyrėjai akcentuoja, kad modernios visuomenės formavimuisi svarbus yra

išsilavinimas ir aukštos kultūros prieinamumas [4, 143–150]. Tai yra aktualu nagrinėjant XIX a. Lietuvos dvasininkijos ir dvarininkijos vaidmenį moderniam tautiniame sąjūdyje. Tuo laiku daugumą populiacijos sudarė mažai išsilavinę valstiečiai, kuriems didžiausią įtaką darė tikėjimas ir Bažnyčia.

Visiems tautiniams judėjimams svarbią ideologinę ir politinę reikšmę turėjo nacionalinė spauda, kuri vaidino reikšmingą vaidmenį tautiniam savęs identifikavimui [1, 85–88].

XIX a. viduryje Vilniaus apskrityje lietuviai galėjo sudaryti apie 65 % visų gyventojų. Vilniaus apskritis buvo ir margiausia kalbine sudėtimi, aiškios persvaros neturėjo nė viena kalba. Baltarusiškai kalbantieji sudarė ¼ dalį, lietuviškai, lenkiškai, žydiškai – po 1/5 dalį, rusiškai – 1/10 dalį apskrities gyventojų. [3, 108–114].

Statistiniai duomenys Jonišio ir Inturkės parapijų yra netolygūs ir fragmeniški. Jonišio parapijos gyventojų tautinę sudėtį, remdamasis LCIA duomenimis, pateikia Rimvydas Laužikas. Jo teigimu, Jonišio miestelyje 1866 m. gyveno 135 žydai, 90 katalikų ir 14 stačiatikių [5, 8]. Statistinės medžiagos apie gyventojų sudėtį Jonišio ir Inturkės miesteliuose pateikia asmuo, slapyvardžiu Anonimas. Nežinomas autorius, remdamasis 1890 m. Vilniaus gubernijos bajorų maršalo Adomo Pliaterio surinktais statistiniais duomenimis, nurodo, kad Jonišio valsčiuje (*włość Janiszki*) iš viso gyveno 6245 gyventojai, tarp jų 100 rusų, 787 lenkų ir baltarusių, 5078 lietuvių, 280 žydų. Jonišio gminoje (apylinkėje) – 461 gyventojų, iš jų 7 rusai, 200 lenkų ir baltarusių, 201 lietuvių, 53 žydai, o miestelyje – 7 rusai, 20 lenkų ir baltarusių, 53 žydai. Tas pats autorius nurodo, kad Inturkės miestelyje (Bebrusų valsčiuje) 1885 m. gyveno 331 gyventojų, iš jų 20 rusų, 110 lenkų, 200 žydų [2, 12–13, 18, 22].

Visgi surinkti duomenys apie etninę sudėtį nėra patikimi, nes dalis jų buvo sudaryta parapijų kunigų, kurie, remiantis savo tautinius įsitikinimais, galėjo juos koreguoti. Giedraičių dekanato parapijose XIX a. pab. lietuviai sudarė daugumą gyventojų, o bažnyčiose pamaldos vyko lietuvių kalba [6, 81]. XX a. pradžioje lietuvių kalba buvo vartota tik keliose bažnyčiose, tame tarpe ir Inturkės bei Jonišio bažnyčiose [6, 338].

Lyginant XIX a. pabaigos ir XX a. pradžios duomenis Vilniaus apskrityje galima pastebėti lenkų skaičiaus didėjimą. XX a. pradžioje parapijiečių surašymo metu kalbos pasirinkimo kriterijumi buvo laikyta įsigalėjusi maldų kalba. Parapijiečių surašymas kartais sukeldavo rimtų visuomeninių nesutarimų.

Parapijų dvasininkai iki XIX a. II pusės pabaigos bažnyčioje vartojo tik lenkų kalbą. Vėliau dauguma Jonišio ir Inturkės parapijos dvasininkų puoselėjo lietuvių kalbą, palaikė tautiškumą, organizavo ir platino draudžiamą spaudą, kėlė tautinio atgimimo dvasią, aktyviai dalyvavo lietuvių tautiniame sąjūdyje, kovojo už gimtosios kalbos teises bažnyčiose ir šiais klausimais pasisakė tuometinėje spaudoje.

XIX a. pabaigoje mišriose Inturkės ir Jonišio parapijose dėl šv. Mišių kalbos bažnyčiose dažnai kildavo konfliktai. Tiek lenkai, tiek lietuviai rašydavo skundus ir prašymus Vilniaus vyskupijos valdytojams. Abi etninės bendruomenės siekė įteisinti savo gimtąją kalbą bažnyčioje. Ypač intensyviai reikalavo palikti lenkų kalbą bažnyčioje vietos dvarininkai. Tiek lenkų, tiek lietuvių skundai ir konfliktai tęsėsi per visus XX a. pirmus dešimtmečius.

Etnolingvistinės tapatybės apraiškas ir kaitą Jonišio ir Inturkės parapijose 1864–1914 m. atspindi tuometinė spauda, kuri tapo moderniosios demokratinės tautos tapatumo sąlyga ir tautinio sąjūdžio komunikacine priemone. Tuometiniai laikraščiai nemažai dėmesio skyrė tautinių santykių aptarinėjimui, pranešdavo apie įvykius parapijose, skelbdavo parapijiečių skundus ir pasisakymus, iš kurių matyti tautiniai nusistatymai.

---

## Literatūra

- [1] Anderson, Benedict. *Įsivaizduojamos bendruomenės*. Vilnius: Baltos lankos, 2001. P. 85–88.
- [2] Anonim. Obszar języka litewskiego w guberni Wileńskiej, *Materialy antropologiczno-archeologiczne i etnograficzne* P. 12–13, 18, 22. Prieiga internete: <<https://books.google.lt/books?id=J08-AAAAYAAJ&pg=RA5-PA3&lpg=RA5-PA3&dq=anonim,+obszar+jezyka+litewskiego+w+gubernii+Wile%C5%84skie&source=bl&ots=rWpplr1p5w&sig=ACfU3U1v4zJdRzXSatBS1pw-bbk4f5i5bAA&hl=lt&sa=X&ved=2ahUKewi5k67CxOvjAhVcw8QBHZH3DvMQ6AEwBHoECA-gQAQ#v=onepage&q=Janiszki&f=false>>.
- [3] Bairašauskaitė, Tamara, et al. *Lietuvos istorija. Devynioliktas amžius: visuomenė ir valdžia*. Vilnius: Baltos lankos, 2011. P. 8.
- [4] Gellner, Ernest. *Tautos ir nacionalizmas*. Vilnius: Pradai, 1996. P. 143–150.
- [5] Laužikas, Rimvydas. *Joniškio parapijos istorija. Mašinarštis, Joniškis*, 1995. P. 8.
- [6] Merkys, Vytautas. *Tautiniai santykiai Vilniaus vyskupijoje 1798–1918 m.* Vilnius: Versus Aureus, 2006. P. 81.

**K. Sadlauskaitė,  
L. Jablonskienė**

*Vilniaus dailės akademija*

## **LIETUVOS KULTŪRINIO AUTENTIŠKUMO DISKURSAS VIZUALIUOSIUOSE MENUOSE 1989–2004 M.**

Lietuvos kultūra, tradicijos ir vertybės vystosi santykiyje su kitų šalių ir regionų kultūromis. Dėl istoriškai paveldėtų įsitikinimų ir dabartyje vykstančios tarpkultūrinės komunikacijos, kiekvieno Lietuvos piliečio savimonėje susiformavo individualus kultūrinis tapatybės modelis ir savos kultūros santykio su išorinėmis kultūromis supratimas. Šio supratimo specifika formuoja vieną svarbiausių, tačiau ne visada teigiamą santykį atspindinčių tarpkultūrinių santykių elementų, persipynusių su individualiais kiekvieno individo įsitikinimais ir esamų kultūros procesų dinamika – kultūrinio autentiškumo diskursą. Šio tyrimo metu buvo siekiama apčiuopti pagrindinius faktorius, nulėmusius meno lauko dalyvių pozicijas autentiškumo požiūriu ir ištirti 1989–2004 m. „Kultūrinio autentiškumo diskurso“ Lietuvos vizualiųjų menų lauke kaitą bei sąsajas su šiame laikotarpyje kultūriškai artimomis šalimis Rytų ir Vidurio Europoje.

Vokiečių dailėtyrininkas Hansas Beltingas pastebėjo, kad Rytų Europa Vakarų pasauliui tapo pagaliau prieinamu egzotiškuoju „kitu“, o „naujoji“ Europa pasidalino į dvi kultūriniu ir ekonominiu požiūriais nelygias dalis [1]. Šie geopolitiniai virsmai ir hierarchiniai santykiai taip pat paskatino tam tikrus kritinius pokyčius specifinių Rytų ir Vidurio Europos šalių dailėtyros laukuose – dailėtyrininkai įžvelgė klaidinančio, „uzurpuojančio“ Vakarų meno lauko formuojamo diskurso apie Rytų Europos meno istoriją pavojų [2]. Apie 2000 m. ryškesnės iniciatyvos permąstyti galios tarp Rytų ir Vakarų Europos santykius bei regioninės meno istorijos rašymo problemas pradėjo telktis Slovėnijoje. Šios tarptautinės iniciatyvos įgijo konferencijų, diskusijų ir leidinių pavidalus, iš kurių ryškiausi – kolekcija „ArtEast2000+“ [3] ir projektas „East Art Map“ [4]. Panašias problemas gvildenančių autorių kritinės įžvalgos vystytos ir kitose šalyse, pavyzdžiui, tarptautiniame projekte „FORMER WEST: Art and the Contemporary After 1989“ [5], o 2018 m. New Yorko Modernaus meno muziejaus straipsnių rinkinyje „Art and Theory of Post-1989 Central and Eastern Europe“ [6].

Šiuose leidiniuose Lietuvos ir kitų Baltijos šalių įnašas buvo palyginus menkas. Kultūrinio autentiškumo diskurso tyrimas taip pat parodė, kad nors dailėtyrininkai ir kritikavo meno lauke egzistuojantį hierarchinį santykį bei Vakarų pasaulio „vijimosi“ tendencijas, aštrios kritinės pozicijos, galinčios virsti atskirais, kritiniu didžiojo Vakarų

naratyvo kvestionavimu grįstais tyrimais, nebuvo – tam tikra Lietuvos meno raidos specifika buvo atskiriama motyvuojant regioninėmis charakteristikomis ir istoriniu, kontekstualiai determinuotu specifiškumu. Panašią meno lauko dalyvių laikyseną pastebėjo ir estų dailėtyrininkas Tanel Rander, savo tekstą pradėdamas teiginiu, kad geopolitinį Rytų Europos diskursą Baltijos šalys ignoroja apskritai [7]. Jis sako, kad Estijos konceptualus menas buvo įtrauktas į oficialią šalies dailės istoriją dėl sąsajų su Vakarų menu, o socialistinio realizmo pavyzdžiai pirmajame nepriklausomybės dešimtmetyje atsidūrė paraštėse siekiant sutvirtinti atskirumo nuo Sovietų Sąjungos idėją šalies tapatybės politikoje.

Lietuvos kultūrinio autentiškumo diskurso tyrimo medžiaga parodė, kad vizualiųjų menų kūrėjai dažnai išreiškia poreikį priklausyti globaliam pasaulio, o ne lokaliai meno lauko kontekstui – tai būdinga tiek tradicinei, tiek naująją raišką atstovaujantiems menininkams. Per visą 1989–2004 m. laikotarpį, aktyvėjant tarpkultūrinei komunikacijai ir menininkų veiklai išsiplečiant į užsienį, tradiconalizmo ir nacionalinio kriterijaus vaidmens mene kritika naujajam menui atstovaujančių kūrėjų pasakymuose pamažu neteko reikšmės – akcentuojamas tarptautinis profesinis bendrumas, kuris pamažu tapo realybe ir apjungė menininkus į tarptautinę profesinę bendruomenę.

Menininkų norą nebūti tapatinamiems su nacionaliniais kontekstais pastebi estų menotyrininkė ir kritikė Sirje Helme bei lenkų menotyrininkas ir kuratorius Piotras Piotrowskis [8]. Pokomunistinių šalių menininkai, o ypač Baltijos šalių meno laukų atstovai, nepaisant egzistuojančių kultūrinių skirtumų, išreiškė nenorą būti „kitokie“, atstovaujantys Vakarų atžvilgiu „kito“ regionui [9].

Kodėl Lietuvos ir Estijos kūrėjai stipriai nekvestionavo Europos kultūrinio pažangumo leistų paaiškinti ypatingai stipri europietiškoji tapatybė ir kultūriniai bei profesiniai galios interesai. Kaip teigia Helme, nors tam tikras skeptiškumas santykiyje su Europa išliko ir XX a., pats priklausymas Europos arealui kvestionuojamas niekada nebuvo [10]. Juk ir Lietuvoje „grįžimo į Europą“ tikslas buvo įrašytas į Lietuvos Sąjūdžio rinkiminę programą [11] bei pirmosios Vyriausybės programą [12]. Apie sovietmečio laikotarpio architektūrą rašiusi Marija Drėmaitė mini ypatingą Lietuvos ir kitų Baltijos šalių poziciją Tarybų Sąjungos kontekste – jos buvo geografiniai ir kultūriniai Sąjungos Vakarai. Lietuvos architektai išreiškė aiškią vertybinę orientaciją į Lietuvos dailės ir kultūros istoriją bei provakarietišką, su Skandinavijos šalimis siejamą profesinę bei kultūrinę orientaciją [13]. Tačiau sovietinės okupacijos patirtis ir sudėtingos nacionalinės ir europietiškosios tapatybių trintys vakarocentristinės orientacijos modelyje išlaiko problemišką savimonės būseną ir tuo pačiu kultūrinio autentiškumo kriterijų situaciją.

---

## Literatūra

- [1] Belting H., *Europe: East and West at the Watershed of Art History*. Art History After Modernism. The University of Chicago Press, London. 2003. P. 54–61.
- [2] Miessen M., Badovinac Z. *Undefined the Other*. East Coast Europe. Sternberg Press, Berlin. 2008. P. 65–79.
- [3] *Grammar of Freedom / Five Lessons: Works from the Artest 2000+ Collection*. Garage, [interaktyvus], [žiūrėta 2020-05-06], <https://garagemca.org/en/event/grammar-of-freedom-five-lessons-works-from-the-arteast-2000-collection>
- [4] IRWIN. *East Art Map*. Afterall, Londonas. 2006.
- [5] Hlavajova M., Sheikh S. *Former West: Art and the Contemporary after 1989*. The MIT Press, Cambridge. 2016.

- [6] Janevski A., Nouril K. Art and Theory of Post-1989 Central and Eastern Europe, The Museum of Modern Art, New York. 2018.
- [7] Rander T. The Discourse and Three Displays of Eastern Europe. Archives and Disobedience. Changing tactics of Visual Culture in Eastern Europe. Eesti Kunstiakadeemia Kirjastus, Tallinn. 2016. P. 109.
- [8] Helme S. Daktaro disertacija. *Problems of Post-War Modernism and Avant-Garde in Estonian Art. Eesti Kunstakadeemia. Alfapress, Tallinn. 2013. P. 60.*
- [9] Mikšionienė R. Narkevičius D. Menas tamsoje – tai paslaptys be skandalų. Mūzų malūnas. 1998. Nr. 15. P. 1, 7.
- [10] Helme S. Daktaro disertacija. *Problems of Post-War Modernism and Avant-Garde in Estonian Art. Eesti Kunstakadeemia. Alfapress, Tallinn. 2013. P. 58.*
- [11] Sąjūdžio rinkiminė programa, 1990-02-03. Lietuvos Sąjūdžio programa ir įstatai. Priimta Lietuvos Sąjūdžio Suvažiavime '90 1990 m. balandžio 22 d. Lietuvos Sąjūdis, Vilnius. 1990. P. 5.
- [12] LR Vyriausybės programa (1990 m. kovo 17 d. – 1991 m. sausio 10 d.). *Lietuvos ir Europos santykių dešimtmetis*. P. 77.
- [13] Drėmaitė M. Baltic Modernism. Architecture and Housing in Soviet Lithuania. DOM publishers, Berlin. 2017. P. 10.

R. Stakauskaitė<sup>1</sup>,  
N. Keršytė<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Vilniaus universitetas,  
<sup>2</sup> Literatūros, kultūros  
ir vertimo tyrimų institutas

## LIETUVOS DAINŲ ŠVENTĖS ANALIZĖ

Lietuvos Dainų šventė – nacionalinė tradicija, masinis kultūros renginys, UNESCO pripažinta pasaulio žodinio ir nematerialaus kultūros paveldo vertybė. 2018 m. įvykusi Dainų šventė „Vardan tos...“ buvo jubiliejinė – dvidešimtoji, taip pat sutapusi ir su Lietuvos valstybės atkūrimo šimtmečiu. Projekto „Lietuvos Dainų šventės analizė“ tikslas – įgyti kompetencijos semiotiškai analizuojant šventę kaip praktiką. Analizės objektu pasirinktas Ansamblių vakaras, kuriame derinami stilizuoti liaudies šokiai, liaudies muzika bei teatralizuoti elementai.

Šventinė praktika dažnai reiškiasi *ritualizavimu*. Ansamblių vakaras, lyginant su kitais Dainų šventės renginiais, yra labiausiai ritualizuotas. Taip pat Ansamblių vakaras yra ir labiausiai teatralizuotas, kuriamas kaip tam tikras naratyvinis diskursas, todėl analizuojamas pasitelkus dvi kategorijas: kaip šventinė *praktika* ir kaip reginys–*diskursas*. Analize siekiama atskleisti, kokios vertės dominuoja Ansamblių vakare „Tėvyne mūsų“, kaip tautiškumas derinamas su modernumu, kokia lietuviybės idėja propaguojama, taip pat svarstoma, ar išryškėja Lietuvos šimtmečio minėjimo specifika šioje, jubiliejinėje, Dainų šventėje.

Dainų šventėms skirtuose moksliniuose leidiniuose dažniausiai dominuoja *istorinio* pobūdžio analizės. Po švenčių spaudoje ir internetinėje žiniasklaidoje pasirodantiuose informacinėse žinutėse dažniausiai apsiribojama statistiniais pastebėjimais apie dalyvių skaičių ar žiūrovų spūstis, o straipsniuose vyrauja arba apibendrinta kritika be jokio analitinio pagrindo, arba emociniai šventinės patirties aprašymai. Gilesnių Dainų švenčių analizių stoką patvirtina ir kultūrologai. Parengtame analitiniame straipsnyje „Ansamblių vakaras: šventinis ritualas ir teatralizuotas reginys“ pateikiama ne vertinamoji, o neutrali šventės analizė.

Analizė parodė, kad Ansamblių vakaras – tai socialinių, istorinių ir estetinių įtampų laukas. Pamatinė įtampa skleidžiasi tarp vakaro kaip šventinio ritualo ir teatralizuoto koncertinio reginio.

1) Per šventinį ritualą ryškėja bendruomenės santykis su anapusybe (pagonių dievybėmis) ir protėviais, skleidžiasi specifinis santykis su laiku:

1. Apeigos, skirtos pagoniškomis dievybėms, formuoja gentinės (baltiškos) bendruomenės vaizdinį. Bendruomenė – ne istorinis, o vien gamtinis darinys: tarp jos narių veikia vien prigimtiniai šeimos–giminės santykiai (kraujo ryšys). Svarbiausias jos tikslas – nuolatinis atsinaujinimas per gimdymą.
2. Kadangi bendruomenė pateikiama kaip prigimtine–gamtinė, į socialinės hierarchijos viršūnę iškeliami Moteris-Gimdytoja: jos vaisingumas užtikrina



bendruomenės gyvybingumą ir tęstinumą, o bendruomenė, gyvenanti gimimų rate, yra susijusi su amžinu dabartiškumu (joje nėra mirties, natūralios egzistencinės raidos). Tai leidžia daryti išvadą, kad šventėje konstruojamas šiuolaikintas valstietiškos bendruomenės vaizdinys (nesenstanti, amžinai jauna visuomenė).

3. 2018 m. vykusį Dainų šventę skirta Lietuvos valstybės šimtmečiui. Nagrinėjant Ansamblių vakaro naratyvą, galima matyti, kad jame pateikiamas neistorinis Lietuvos valstybės vaizdinys: daugiausiai dėmesio skiriama ikivalstybiniam baltų genčių laikotarpiui, inscenizuojamos kovos su abstrakčiu išorės priešu. Tapatinant tautos, valstybės, šeimos ir genties sąvokas, valstybė vaizduojama ne kaip organizuota politinė bendruomenė, bet kaip vien šeiminiiais ryšiais saistoma bendrija.
4. Ritualizuotoje šventėje pateikiamas prigimtinės ir sinkretiškos lietuvių tapatybės modelis: XIX a. tautinio atgimimo metu susiformavusi tautinė tapatybė, paremta žemdirbiška liaudies kultūra ir baltiška-pagoniška religija, sulydoma su sekuliarus šiuolaikinio pasaulio siūloma amžinai jaunos ir nesenančios visuomenės vaizdiniu. Taigi, tautinė tapatybė iškyla kaip konstruktas, kuriame į viena supintas XIX a. romantinis ir XXI a. šiuolaikinis bendruomeninės tapatybės vaizdinys.  
II) Per teatralizuotą reginį, susijusį su vizualumu ir sceniškumu, atsiskleidžia tradicijos ir modernumo santykio problema:
5. Didžiąją Ansamblių vakaro programos dalį sudaro stilizuotas folkloras – tradicinių liaudies ansamblių, suklostėjusių sovietiniais laikais, muzika ir šokis. Kūrinių turinys lieka nesikeičiantis, tradicinis, paremtas tautiniais papročiais, o modernumas pasireiškia tik išraiškos (formos) plotmėje – liaudies meno stilistikoje.
6. Dainų šventės raidos požiūriu santykis tarp tradicijos ir modernybės yra susijęs su skirtumu tarp sceninio liaudies meno tradicijos pakartojimo (tolydumo) ir naujųjų įvedimo (pertrūkio tradicijoje). Kadangi kartojami nuo „Lietuvos“ ansamblio atsiradimo parašyti sceninės liaudies muzikos (J. Lingio, J. Švedo) kūriniai, Dainų šventės oponentams susidarą įspūdis, kad šventė nesikeičia nuo sovietinių laikų. Įvedamos stilistinės naujovės – modernizuotas folkloras su modernaus šokio elementais, šiuolaikinių kompozitorių muzika – lieka nepastebimos, nes jos susietos su tais pačiais turiniais, suformuotais nuo pat Ansamblių vakaro atsiradimo 1970 m.: žemdirbiško darbo arba šeimos papročiais.
7. Nors kūrinių išraiškos formos keičiasi, vis labiau eksperimentuojama su folkloru (modernizuotas folkloras), tačiau jais perteikiamas turinys išlieka tas pats: žemdirbiška, šeimtinė bendruomenė. Net žemdirbiškos patriarchalinės bendruomenės įvaizdyje pasirodančios naujovės – moteriškų dievybių ir moters iškėlimas į pirmą planą – galiausiai moteriai priskiria tik tradicinį moters–gimdyvės vaidmenį, nebeatitinkantį moters funkcionavimo šiuolaikinėje visuomenėje.

Parengus analitinį straipsnį siekiama sudalyvauti lietuvių visuomenėje vykstančiose daugiamestinėse kontraversiškose diskusijose dėl Dainų šventės, suteikti joms kritinio-akademiniio svorio. Verta dar kartą akcentuoti, kad *šventė–ritualas* pateikia tradicinius liaudies kultūros turinius, archajinį visuomenės vaizdinį, atitolusį nuo šiuolaikinės visuomenės, kurioje greta kaimo kultūros ne mažiau svarbi miesto kultūra, kur pagoniškos religijos likučiai integruoti į krikščionišką kultūrą, kur bendrijos ryšiai grįsti ne vien kraujo ryšiais, kur homogenišką gentinę bendriją pakeitusi heterogeniška istorinę atmintį turinti politinė bendrija.

Dabar šventėje dominuoja *liaudiškumo modernizacija* (vykusi jau sovietiniais laikais) – kai naujovių, modernumo ieškoma tik atlikimo formos plotmėje, turinį (pasakojimą apie bendruomenę, jos vaizdinius) paliekant iš esmės nepakitusius. Vietoj to galėtų būti judama *tautiškumo transformacijos* kryptimi, kai kartu su modernia forma būtų pateikiamas ir naujas turinys – kitokia tautos kaip bendrijos, jos tapatybės, jos narių santykių, veiklos formų samprata. Tai galbūt padėtų į šventę labiau įtraukti šiuolaikinį žiūrovą, nebesitapatinantį su žemdirbiška, pagoniška kultūra, ir taip sumažinti vis labiau pastebimą atotrūkį tarp šventės dalyvių ir žiūrovo, kaip pasyvaus stebėtojo.

**Studentų moksliniai tyrimai 2019/2020**  
Konferencijos pranešimų santraukos

Lietuvos mokslo taryba  
Gedimino pr. 3, LT-01103 Vilnius

ES investicijos – mokslui ir inovacijoms



Lietuvos  
mokslo  
taryba



Kuriame  
Lietuvos ateitį  
2014–2020 metų  
Europos Sąjungos  
fondų investicijų  
veiksmų programa

Finansuoja Europos socialinis fondas